



HAL
open science

Propagation non-linéaire de paquets d'onde.

Lysianne Hari

► **To cite this version:**

Lysianne Hari. Propagation non-linéaire de paquets d'onde.. Mathématiques générales [math.GM]. Université de Cergy Pontoise, 2014. Français. NNT: 2014CERG0726 . tel-01162925

HAL Id: tel-01162925

<https://theses.hal.science/tel-01162925>

Submitted on 11 Jun 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Propagation non-linéaire de paquets d'onde

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 25 Septembre 2014

pour l'obtention du

Doctorat de l'Université de Cergy-Pontoise
(Spécialité Mathématiques)

par

Lysianne HARI

Composition du jury

Rapporteurs : **Rémi CARLES**
Directeur de Recherche CNRS - Université Montpellier 2
Florian MÉHATS
Professeur - Université Rennes 1

Examineurs : **Thierry JECKO**
Maître de conférences - Université de Cergy-Pontoise
Alain JOYE
Professeur - Université Grenoble 1
Nikolay TZVETKOV
Professeur - Université de Cergy-Pontoise

Directeurs : **Thomas DUYCKAERTS**
Professeur - Université Paris 13 Nord
Clotilde FERMANIAN KAMMERER
Professeur - Université Paris-Est Créteil Val-de-Marne

Mis en page avec la classe thesul.

*A ma mère,
A tous les miens.*

Remerciements

Mes premiers remerciements sont destinés à mes chefs, Thomas Duyckaerts et Clotilde Fermanian, qui, tout au long de ces années de thèse, m'ont guidée, encouragée, ont supporté mes questions, et pire encore, mes absences de questions parfois ! Je les remercie pour leur disponibilité sans faille, leur patience, pour ce qu'ils m'ont apporté, tant sur le plan scientifique qu'humain, et surtout pour la confiance inestimable qu'ils ont su m'accorder avant même que je ne commence cette thèse. Merci de m'avoir donné cette chance d'appréhender le monde de la recherche (et même le monde tout court grâce à cela !) dans un climat si chaleureux, humain et détendu.

Je voudrais exprimer toute ma reconnaissance à mes rapporteurs, Rémi Carles, pour ses nombreux conseils avisés dans divers domaines - mathématiques ou non - et pour m'avoir permis de participer à mes premiers événements scientifiques dans des cadres idylliques, et Florian Méhats. Merci d'avoir accepté de rapporter cette thèse et pour le temps consacré à la relecture minutieuse de ce manuscrit. Je remercie aussi très chaleureusement Thierry Jecko, Alain Joye et Nikolay Tzvetkov qui me font l'honneur d'être membre de mon jury de thèse.

Mes remerciements vont ensuite à Caroline Lasser et Johannes Keller, ainsi qu'à tous les membres du laboratoire de mathématiques de la Technische Universität München pour leur accueil et leur bienveillance lors de mon séjour en Mars 2014.

Je tiens également à remercier l'ensemble des membres du laboratoire AGM de l'UCP au sein duquel j'ai passé d'excellentes années de thèse après cinq ans d'études post-bac dans la même université.

C'est avec amusement que je repense à ces années où j'hésitais à tutoyer la plupart des membres du laboratoire car ils étaient encore auréolés du statut de "prof" qui m'avaient enseigné les mathématiques en licence et en master. Je suis touchée qu'aujourd'hui, ils soient devenus des collègues si chaleureux et accessibles (et toujours aussi auréolés !), avec qui j'ai eu plaisir à enseigner à mon tour. Je tiens particulièrement à remercier Jean Delcourt pour avoir toujours su motiver et soutenir les étudiants, sans aucun à-priori, Raïka Dehy avec qui j'ai écrit mon premier fichier .tex en M1, et tous ceux qui m'ont un jour eue dans leur classe et m'ont permis d'arriver jusque là. Merci aussi à Vladimir Georgescu pour sa gentillesse, et son soutien précieux pour les jeunes, merci à ceux qui rendent le labo plus agréable, Patrick, pour le chocolat, le café, l'humour (tous les trois noirs et exquis), Thierry D. pour son écoute, sa présence et ses bons conseils pour motiver, Laurent, que je tiens à remercier pour sa compréhension et son aide pour les enseignements de ma dernière année de thèse, Eva pour sa bonne humeur et sa gentillesse, Andreï, pour ses conseils diététiques que je n'ai jamais suivis, Michela, Emmanuel V., Armen, Thierry H., Mathieu, Smaïl, François F., Christian, etc.

Merci à Thomas Ballesteros, sans qui les pauses du midi et les fiches de temps sont un peu moins drôles, Marie Carrette, Linda Isonne et Caroline Valadon pour leur aide indispensable et leur souci de bien faire.

Bien entendu, je remercie les "thésards et compagnie" qui ont su égayer le labo et qui ont alimenté notre fameux séminaire des thésards et surtout, le pot qui suit ! Je pense en particulier aux "anciens" : David pour ses pauses cafés dans la 5-33, qui arrivaient toujours au bon moment, Coni, Giona, Davit, Bruno, Alexandre B., Andrey, Anne-Sophie, Nicolas, les Juliens et leur humour absurde (rien de tel pour oublier un blocage mathématique !), à Salma, Séverine, Azba, Abil, Hong Cam et tellement d'autres.

Merci aux petits nouveaux, Mouhamadou, Thibault, Pierre, et les autres, de reprendre le flambeau !

J'adresse aussi mes remerciements aux nombreuses personnes rencontrées sur ma route "scolaire", et qui ont contribué à ce que je suis aujourd'hui. Je pense à mes professeurs - de mathématiques bien sûr, mais pas uniquement - dont certains m'ont marquée, notamment au collège, et ont été une source d'inspiration et de motivation dans un environnement de travail pas toujours facile.

Un immense merci à la poignée d'irréductibles amis sur qui je peux compter : je pense à Amal, la grande soeur de thèse - mais pas que - que je n'ai jamais eue, et Marou - mon acolyte pour les bêtises - pour leur gentillesse, leur présence, leur générosité et leur amitié plus qu'importante, je pense à Isabelle, pour toutes nos soirées papotage, pour « Brenda et Jason », pour son écoute et son soutien, je pense à Bertrand, voisin, ami, partenaire de JPB et de geekeries depuis si longtemps, et sa famille, à Laura pour sa bonne humeur et son entrain, à tout le reste de la bande, à Jérémie pour son écoute et son aide, notamment informatique, au cours de cette thèse, à "Dr.GG" qui a toujours su me motiver pour la recherche et tant d'autres que je ne cite pas.

Une petite pensée pour Doudou qui, selon mes amis, était exploité et rédigeait mes fichiers .tex dans le plus grand secret.

Enfin, je veux remercier ma famille : ma mère, mon frère Jean-Louis, et ma soeur Viviane, pour leur présence au quotidien, leur soutien et leur confiance qui sont essentielles, après toutes les épreuves traversées ensemble. Je veux, en particulier, dédier ce travail à ma mère, qui, seule contre tous, nous a toujours donné le meilleur, même dans les périodes les plus noires, au détriment d'elle-même, au prix de nombreux sacrifices et difficultés supportés avec une patience et une détermination dont peu de gens savent faire preuve. Je veux saluer son ouverture d'esprit, sa motivation, sa dévotion et son courage, qui nous ont poussé à donner le meilleur de nous-mêmes, dans les études et dans la vie en général, pour accéder à une indépendance et au confort du choix de vie, auxquels elle n'a pas eu droit.

Cette thèse a été financée par le projet ERC DISPEQ (Grant agreement no: 257293, Oct 2010-Oct 2015) coordonné par Nikolay Tzvetkov, Université de Cergy-Pontoise.

Résumé

Les résultats présentés dans cette thèse concernent l'étude, dans la limite semi-classique $\varepsilon \rightarrow 0$, de systèmes d'équations de Schrödinger non-linéaires couplées. Selon le potentiel considéré, le système peut, ou non, présenter un couplage linéaire, en plus de celui induit par le terme non-linéaire. Dans ce manuscrit, c'est la propagation d'états cohérents - états localisés dans l'espace des phases, et que l'on va faire vivre dans un niveau d'énergie donné - qui va nous intéresser.

Dans le cadre linéaire, plusieurs situations ont été étudiées, certaines préservant *l'adiabaticité*, et d'autres la brisant, faisant apparaître des transitions entre les niveaux d'énergie. Le rôle de la non-linéarité et l'interaction de ses effets avec un éventuel couplage linéaire sur ces phénomènes est une question importante pour comprendre des systèmes qui entrent en jeu dans des problèmes très actuels en physique quantique.

Dans un premier temps, le potentiel pris en compte aura des valeurs propres bien séparées par un trou spectral, et nous montrerons un théorème adiabatique pour une non-linéarité qui présente un exposant critique pour le paramètre semi-classique devant la non-linéarité. Un point de vue équivalent est de considérer des données petites de l'ordre d'une puissance positive du paramètre semi-classique. Il s'agit d'un résultat analogue à celui de Carles et Fermanian-Kammerer mais dans un cadre sur-critique L^2 .

Dans un deuxième temps, nous considérerons, pour le cas unidimensionnel, un potentiel explicite de taille 2×2 , qui présente un *croisement évité* : les deux valeurs propres sont séparées par un paramètre δ - paramètre adiabatique - qui va tendre vers zéro lorsque ε va tendre vers zéro. Nous montrerons alors que des transitions entre les modes ont lieu. Il s'agit ici d'une version non-linéaire des travaux d'Hagedorn et Joye où une telle transition est démontrée pour des systèmes linéaires.

Mots-clés: Systèmes d'équations de Schrödinger non-linéaires, Etats cohérents, Analyse semi-classique, Croisements évités.

Abstract

This thesis is devoted to the study of coupled nonlinear Schrödinger equations in the semi-classical limit $\varepsilon \rightarrow 0$. Depending on the potential we consider, the system can present a linear coupling, in addition to the nonlinear one. We will focus on the propagation of coherent states that will be polarized along a given eigenvector of the potential.

In the linear setting, several situations have been analyzed; some of them lead to adiabatic theorems whereas the others imply transitions between energy levels. When one adds a nonlinearity, understanding nonlinear effects on the propagation and the competition between them and the linear coupling becomes a very interesting issue.

We first consider a potential with eigenvalues that present a spectral gap and will prove an adiabatic theorem for a critical nonlinearity in the semi-classical sense. This is a L^2 -supercritical result, similar to the one proved by Carles and Fermanian-Kammerer for the one-dimensional case, which is L^2 -subcritical.

The second part of the thesis deals with an explicit 2×2 potential that presents an *avoided crossing* point : the minimal gap between its eigenvalues becomes smaller as ε tends to zero. We will prove that this system exhibits transitions between the modes. This result is a nonlinear version of the study performed by Hagedorn and Joye in the linear case.

Keywords: Nonlinear Schrödinger Systems, Coherent States, Semi-classical analysis, Avoided crossings.

Table des matières

Notations

Chapitre 1

Introduction

1.1	Motivations physiques et modèles mathématiques	11
1.2	Résultats connus	14
1.2.1	Propagation de paquets d'onde scalaires et théorèmes adiabatiques	14
1.2.2	Transitions non-adiabatiques à travers des croisements évités dans les cas linéaires	21

Chapitre 2

Présentation des travaux de thèse

2.1	Partie I : Un théorème adiabatique pour des états cohérents dans le cadre non-linéaire	23
2.1.1	Le problème	23
2.1.2	A propos des estimations de Strichartz	25
2.1.3	Théorème adiabatique et idées de preuve	26
2.1.4	Superposition non-linéaire en temps fini	29
2.1.5	Résultat annexe 1 : Amélioration du cas unidimensionnel pour des potentiels de type longue portée	31
2.1.6	Résultat annexe 2 : Décroissance de la Hessienne et bornes en temps longs pour les dérivées et moments du profil	31
2.2	Partie II : Propagation d'états cohérents à travers un croisement évité	33
2.2.1	Présentation du problème	33
2.2.2	Approximations et résultat principal	34
2.2.3	Contrôle du profil et validité de l'approximation dans la région adiabatique	36
2.2.4	Approximation dans la zone de croisement	42
2.3	Propagation au-delà du croisement et perspectives	46

Chapitre 3

Coherent States for Systems of L^2 -Supercritical Nonlinear Schrödinger Equations

3.1	Introduction	51
3.1.1	Classical trajectories	53
3.1.2	The ansatz	54

3.1.3	Long time behaviour	55
3.1.4	Nonlinear superposition	56
3.2	Preliminaries	57
3.2.1	About Strichartz estimates	57
3.2.2	Strategy of the proofs of main results	58
3.3	Proof of the main results	60
3.3.1	Estimate of the correction term	60
3.3.2	End of the proof of Theorem 3.1.5.	62
3.3.3	Large time case	66
3.4	Growth of Sobolev norms and momenta of the profile	71
3.5	About the one dimensional case	76
3.6	Nonlinear superposition	78
3.6.1	General considerations	78
3.6.2	Nonlinear superposition for data belonging to different modes	80
3.6.3	Nonlinear superposition of data belonging to same modes	82
3.7	Appendix 1: Strichartz estimates	83
3.8	Appendix 2: Global existence of the exact solution	84

Chapitre 4

Propagation of Coherent States through an Avoided Crossing

4.1	Introduction	85
4.2	Sketch of proof of the main theorem	90
4.3	Properties of the profile u_δ in the adiabatic region	93
4.4	Convergence of the approximation in the adiabatic region.	100
4.5	Approximation in the crossing region.	111
4.6	Transition between the modes	122

Bibliographie

125

Notations

- On note $\langle x \rangle = (1 + |x|^2)^{1/2}$.
- Si $1 \leq p \leq +\infty$, on note p' l'exposant dual qui vérifie :

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1.$$

- Soient a^ε et b^ε deux quantités dépendantes d'un paramètre ε . La notation $a^\varepsilon \lesssim b^\varepsilon$ signifie qu'il existe une constante $C > 0$, indépendante de ε , telle que pour tout $\varepsilon \in]0, 1]$, $a^\varepsilon \leq Cb^\varepsilon$.
- Soient $d, N \geq 1$, et $f : \mathbf{R} \times \mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}^N$. Soit $\alpha \in \mathbf{N}^d$. On définit $\partial_x^\alpha f$ de la façon suivante:

$$\partial_x^\alpha f(t, x) = \begin{pmatrix} \partial_x^\alpha f_1(t, x) \\ \vdots \\ \partial_x^\alpha f_N(t, x) \end{pmatrix}$$

- Pour $p \in \mathbf{N}$, l'espace fonctionnel $H_\varepsilon^p(\mathbf{R}^d)$ est défini par

$$H_\varepsilon^p(\mathbf{R}^d) = \left\{ f \in L^2(\mathbf{R}^d), \sum_{|\alpha| \leq p} \|\varepsilon^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}^2 < +\infty \right\}$$

Pour tout $f \in H_\varepsilon^p(\mathbf{R}^d)$, la norme associée est donnée par :

$$\|f\|_{H_\varepsilon^p(\mathbf{R}^d)} = \left(\sum_{|\alpha| \leq p} \|\varepsilon^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}^2 \right)^{1/2}$$

Chapitre 1

Introduction

1.1 Motivations physiques et modèles mathématiques

Cette thèse est consacrée à l'étude de la propagation d'états cohérents, ou paquets d'onde, dans des cadres non-linéaires. Les problèmes que nous allons regarder apparaissent principalement dans le domaine de la chimie quantique, lorsque l'on veut décrire de façon théorique la dynamique de molécules. Cette question motive les chercheurs depuis le début du siècle dernier, et nombre de phénomènes restent partiellement incompris ou peu rigoureusement démontrés aujourd'hui. Pour obtenir cette description moléculaire, il faudrait résoudre un système conséquent d'équations de Schrödinger dépendantes du temps, tâche très complexe à réaliser.

L'*approximation de Born-Oppenheimer*, introduite dans [16] en 1927, permet de simplifier ces calculs et exploite le fait que la masse des électrons est beaucoup plus faible que celle des noyaux. On utilise alors le rapport m/M , entre la masse m d'un électron et M celle des noyaux autour desquels il gravite, et plus précisément le paramètre $\varepsilon = \sqrt{m/M}$, qui est utilisé pour construire un développement de l'hamiltonien considéré. Les noyaux étant lourds comparés aux électrons, on est amené à examiner le problème d'un point de vue *semi-classique*, c'est-à-dire dans la limite où le paramètre ε tend vers zéro (*limite semi-classique*) : la dynamique des noyaux peut être approchée par une dynamique classique qui dépend de l'état des électrons. C'est ce qu'on appelle l'*approximation semi-classique* pour les noyaux.

Concrètement, on sélectionne une bande du spectre électronique isolée du reste, et on projette la partie électronique de l'hamiltonien total de la molécule sur cette bande. Cette information concernant les électrons est capturée dans une matrice, dont la taille est liée au rang du projecteur. Le nouvel hamiltonien \mathcal{H}^ε , après cette réduction de dimension, s'écrit alors

$$\mathcal{H}^\varepsilon = \frac{-\varepsilon^2}{2} \Delta_X + V(X), \quad (1.1)$$

où $X \in \mathbf{R}^{3N}$, donne la position des N noyaux et V est une matrice d'une taille $n \times n$, régulière, hermitienne qui contient l'information électronique. D'une équation d'abord scalaire pour la molécule, on arrive, via cette approximation, à une nouvelle équation matricielle qui régit le mouvement des noyaux, et qui dépend des états électroniques via le potentiel V , ceux-ci étant liés à ses valeurs propres.

L'analyse théorique de cette démarche et la justification rigoureuse de celle-ci ont été initiées, pour le cas indépendant du temps, par Hagedorn [58], Combes, Duclos, Seiler [36], suivis par Klein, Martinez, Seiler, Wang [79], et plus récemment pour le cas dépendant du temps, par Spohn et Teufel [96] ainsi que Martinez et Sordani pour des systèmes avec singularités de type coulombiennes [87] (voir aussi les manuscrits [82], [91] et leurs références, qui présentent plus en détail cette approximation et les questions sur sa validité dans diverses situations).

En travaillant dans ce cadre, la notion d'*adiabaticité* apparaît naturellement : les électrons se déplacent plus rapidement que les noyaux; ils adaptent très vite leurs états par rapport au lent mouvement des particules lourdes. On peut alors voir les choses de la façon suivante : un électron qui est dans un

niveau d'énergie donné de l'hamiltonien au temps initial restera approximativement, jusqu'à un certain temps, dans le niveau d'énergie associé à l'hamiltonien évolué au temps considéré : c'est l'*approximation adiabatique* (ou Théorème adiabatique) pour les électrons, formulée pour la première fois par Born et Fock dans [15] en 1928 et prouvée sous des hypothèses fortes sur l'hamiltonien.

Le théorème est ensuite démontré pour des conditions moins restrictives, plus de vingt ans plus tard par Kato [76]. Il est communément admis que cette approximation est valide en présence d'un trou ("gap") spectral entre les niveaux d'énergie des électrons considérés. Cependant, l'idée que celle-ci est une condition nécessaire pour obtenir des théorèmes adiabatiques est erronée et discutée dans [5] ainsi que dans [99].

Cette approximation n'est plus valide dans certaines situations parmi lesquelles on trouve le cas de croisement évité ou "presque-croisement": on regarde des niveaux d'énergie électroniques, qui se rapprochent mais sans jamais se croiser réellement. Il existe plusieurs types de croisements mais dans les travaux présentés dans ce manuscrit, nous retiendrons un cas simple, donné par la définition suivante :

Définition 1.1.1. Soient $d, n \in \mathbf{N}^*$, et $\Omega \subset \mathbf{R}^d$ un ouvert de \mathbf{R}^d . On suppose que $V_\delta(x)$ est une famille de matrices hermitiennes et régulières sur Ω , de taille $n \times n$ et $\delta \in [0, \delta_0)$, pour un $\delta_0 > 0$ fixé. On suppose aussi que $V_\delta(x)$ possède deux valeurs propres $\lambda_\delta^A(x), \lambda_\delta^B(x)$ isolées des autres, telles que pour tout $x \in \Omega$, $\lambda_\delta^A(x) \neq \lambda_\delta^B(x)$, pour $\delta > 0$. On introduit Γ donné par

$$\Gamma = \{x \mid \lambda_0^A(x) = \lambda_0^B(x)\},$$

et on suppose que Γ est soit un unique point, soit une sous-variété connexe propre et non-vide de Ω . Alors, on dit que $V_\delta(x)$ présente un **croisement évité** sur Γ .

En présence de croisements évités, des transitions non-négligeables entre les modes peuvent se produire, (phénomènes parfois nommés "transitions de Landau-Zener" ou "effet tunnel de Landau-Zener") d'où la non-validité de l'approximation adiabatique dans ces situations : une particule qui sera dans un niveau d'énergie donné aura une probabilité non-négligeable d'accéder à l'autre niveau d'énergie.

Il est possible de calculer explicitement cette probabilité de transition, à l'aide de la célèbre *formule de Landau-Zener*, qui apparaît dans [81], [105], dans les années 30 et dans lesquels Landau et Zener ont indépendamment étudié un système de transition proche du suivant :

$$i\partial_s u = \begin{pmatrix} s & \delta \\ \delta & -s \end{pmatrix} u \quad ; \quad u(0) = u_0,$$

avec $u \in \mathbf{C}^2$, et dont le potentiel présente un croisement évité lorsque $s = 0$. La formule est mathématiquement démontrée dans [59] et dans [75] avec des hypothèses plus larges. Des variantes de cette formule pour des systèmes de transition plus complexes existent (par exemple pour des systèmes de transitions non-linéaires, voir [14], [27]).

Les résultats liés aux croisements en général (évités ou exacts, pour lesquels il y a des questions supplémentaires sur la régularité) sont nombreux dans le cadre linéaire : on peut, par exemple, citer [65] et [34], [35] qui donnent, respectivement, une classification de résultats pour des croisements évités et des croisements exacts dans ces cadres plus généraux que ceux qui sont analysés dans cette thèse.

Il faut noter qu'il est possible d'obtenir des informations sur la transition, et plus généralement, sur la propagation d'une donnée assez générale, en regardant la *transformée de Wigner* de la fonction d'onde. Cette description consiste à utiliser des mesures semi-classiques et permet de comprendre comment la fonction d'onde se concentre dans l'espace des phases, par exemple, lorsqu'elle traverse une zone de croisement (voir [44], [46] par exemple). Ce point de vue ne sera pas traité dans ce manuscrit.

La version linéaire du système d'équations de Schrödinger couplées qui nous intéresse est la suivante

$$i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon = \mathcal{H}^\varepsilon\psi^\varepsilon \quad ; \quad \psi^\varepsilon(t_0, x) = \psi_0(x). \quad (1.2)$$

Travaillant dans un cadre semi-classique, on introduit pour chaque valeur propre $\lambda_j(x)$ du potentiel V , les quantités classiques (trajectoires et action classiques) suivantes, issues de la mécanique newtonienne

$$\begin{cases} \dot{x}_j(t) = \xi_j(t) \\ \dot{\xi}_j(t) = -\partial_x \lambda_j(x_j(t)) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} x_j(0) = x_j^0 \\ \xi_j(0) = \xi_j^0, \end{cases} \quad (1.3)$$

et

$$S_j(t) = \int_0^t \left(\frac{|\xi_j(s)|^2}{2} - \lambda_j(x_j(s)) \right) ds.$$

On s'intéresse à des données particulières, de type paquets d'onde, dont l'étude de la propagation permet de retrouver la structure initiale, concentrée autour des trajectoires classiques dans l'espace des phases, et ce, sans forcément utiliser des outils plus complexes. Elle permet aussi de modéliser plus facilement la propagation de la fonction d'onde en utilisant des paquets d'onde assez explicites. (voir [48], [83] par exemple).

Considérer ce type de données amène une question en plus de celle qui concerne la validité de l'approximation adiabatique : on part d'une donnée qui sera concentrée en un point de l'espace des phases (x_0, ξ_0) et qui vit dans un espace propre donné du potentiel V , associé à un niveau d'énergie $\lambda_j(x)$ ($j \leq n$):

$$\psi^\varepsilon(0, x) = \varepsilon^{-d/4} a \left(\frac{x - x_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon} \xi_0 \cdot (x - x_0) + \frac{i}{\varepsilon} S_0} \chi_j(x), \quad a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d), \quad (1.4)$$

où $\chi_j(x)$ est le vecteur propre associé à $\lambda_j(x)$, et où le terme S_0 est généralement choisi comme $S_0 = S_j(0)$, donc nul. On se demande alors si la fonction d'onde ψ^ε reste, à l'ordre dominant, un état cohérent qui garde la même forme, c'est-à-dire, si on peut construire une approximation du type :

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-d/4} u \left(\frac{x - x_j(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon} (S_j(t) + \xi_j(t) \cdot (x - x_j(t)))} \chi_j(x) + o(1), \quad \text{dans } L^2(\mathbf{R}^d)$$

où

$$\begin{cases} \dot{x}_j(t) = \xi_j(t) \\ \dot{\xi}_j(t) = -\partial_x \lambda_j(x_j(t)) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} x_j(0) = x_0 \\ \xi_j(0) = \xi_0, \end{cases}$$

et u est le profil, solution d'une équation d'enveloppe sans paramètre semi-classique cette fois.

Dans le cas linéaire, les travaux de Hagedorn et Joye, où les états cohérents propagés sont plus explicites, traitent des cas sans croisement dans [64] et avec croisement évités dans [61], [62] (les résultats pour des croisements exacts sont détaillés dans [60] par Hagedorn). C'est ce type de données qui est étudié dans les travaux présentés dans les chapitres suivants du manuscrit.

Tout ce qui a été énoncé jusqu'ici concerne le cas linéaire; en ajoutant un terme supplémentaire à (1.2), sous la forme d'un couplage non-linéaire on s'attend à hériter des questions et difficultés précédentes, mais aussi, à traiter d'éventuelles interactions entre les effets linéaires et ceux non-linéaires. Notons que la non-linéarité rajoute des complications d'ordre technique. L'ajout de ce terme, qui représente une interaction entre les particules, permet d'obtenir un système d'équations de Schrödinger non-linéaires, proche de l'équation de Gross-Pitaevskii, qui modélise les condensats de Bose-Einstein :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V + g|\psi|^2 \right) \psi,$$

où \hbar est la constante usuelle de la physique quantique, M est la masse des atomes qui composent le condensat, g un paramètre qui donne l'intensité de l'interaction entre les particules. Lorsque des bosons sont amenés à des températures proches de zéro, ils tendent à occuper le même état d'énergie : les états fondamentaux ou de plus basse énergie ("groundstate"). Ceux-ci ont alors tendance à acquérir, ensemble, des propriétés physiques "visibles" à échelle macroscopique et dont l'exploitation est une idée intéressante. De ce fait, pour étudier ces phénomènes, il est important de sélectionner et regarder ce niveau d'énergie précisément. La réalisation expérimentale de cet état de la matière en 1995 par Cornell,

Wieman et al. ([3]) a ouvert le champ des questions concernant les systèmes d'équations associés. Les travaux qui ont suivi, par exemple [66], [67], [68] présentent une étude de plusieurs espèces sous la forme de condensats de Bose-Einstein en interaction. Plus tard, les systèmes mathématiques en jeu dans ces phénomènes physiques ont commencé à être rigoureusement analysés. Parmi les résultats qui ont permis de mieux comprendre ces phénomènes, on peut citer [1], [2] plutôt axés sur l'étude de l'énergie associée à Gross-Pitaevskii et des vortex qui apparaissent dans les condensats en rotation, ou encore [29] et les références qui y sont citées, qui traitent le cas de gaz quantiques présentant un certain type d'interactions entre les particules. Il est important de noter que nombre de modélisations numériques ont été réalisées, notamment par Bao et al., (pour des systèmes couplés et/ou en rotation, qui présentent des phénomènes particuliers) dans [8], [12], [9], [13], [11], [10] et les références qui y sont indiquées. Des travaux liés aux problèmes avec états cohérents sont présentés dans [86], [85] ou encore [42].

Notons que les équations non-linéaire semi-classiques (de type Maxwell-Dirac par exemple) apparaissent aussi dans le domaine de l'Optique Quantique, où cette fois, le paramètre ε représente l'inverse de la vitesse de la lumière. Les avancées dans ce domaine, régulièrement mis en avant depuis quelques années, ont d'ailleurs permis la réalisation de Condensats de Bose-Einstein grâce aux "pièges à particules" créés à l'aide de lasers. Mentionnons que, depuis les travaux de Glauber, Mandel et Sundarshan dans les années 60, il est connu que les états cohérents ont une place primordiale dans la description des états de la lumière. Pour des résultats mathématiques rigoureux, le lecteur est invité à lire [21] et ses références pour une présentation détaillée des résultats dans le cadre d'une analyse type "WKB".

Concrètement, les systèmes qui vont être présentés dans la suite du manuscrit sont du type suivant :

$$i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon = \mathcal{H}^\varepsilon\psi^\varepsilon + \kappa\varepsilon^\alpha|\psi^\varepsilon|_{\mathbf{C}^N}^{2\sigma}\psi^\varepsilon \quad ; \quad \psi^\varepsilon(0, x) = \psi_0^\varepsilon(x), \quad (1.5)$$

avec $\varepsilon \ll 1$, $\kappa, \alpha, \sigma \geq 0$, et où \mathcal{H}^ε est donné par (1.1), $\psi_0^\varepsilon(x)$, par (1.4) et $|\cdot|_{\mathbf{C}^N}$ est la norme hermitienne dans \mathbf{C}^N .

Le but est principalement de répondre aux deux questions suivantes, pour certains potentiels V matriciels et en partant d'une donnée de type paquet d'onde (1.4) :

1. la solution reste-t-elle un état cohérent du même type ?
2. la solution reste-t-elle dans le même espace propre ?

Pour y répondre, on devra construire des approximations à l'ordre dominant, dont on pourra facilement extraire des informations et en déduire les réponses aux questions précédentes pour les fonctions d'onde. Toute la difficulté réside dans les preuves de leurs validités dans la limite semi-classique $\varepsilon \rightarrow 0$, qui seront détaillées dans la suite.

Dans la suite de ce chapitre d'introduction, nous exposerons un rapide historique de certains résultats antérieurs aux travaux de cette thèse, qui seront énoncés dans les chapitres suivants. Dans le cadre linéaire, le problème a été étudié sous divers angles et dans des situations plus générales. Nous nous cantonnerons aux cas et données de type états cohérents qui nous intéressent, pour appréhender les difficultés spécifiques aux problèmes étudiés dans cette thèse. Les résultats plus généraux ou établis dans des cadres différents ne seront pas énoncés explicitement.

1.2 Résultats connus

1.2.1 Propagation de paquets d'onde scalaires et théorèmes adiabatiques

Dans cette section, nous présentons des résultats sur la propagation d'états cohérents dans le cas scalaire et des théorèmes adiabatiques valides dans des situations sans croisement pour les systèmes du type (1.2)-(1.4), dans un premier temps, et (1.5)-(1.4) sous certaines hypothèses ensuite.

Le cas linéaire

Lorsque le problème étudié est scalaire, la deuxième question qui porte sur la notion de stabilité dans un espace propre n'a pas de sens; il s'agit donc uniquement de voir si, pour des données de type états cohérents (1.4), la solution reste localisée de la même manière dans l'espace des phases et surtout, jusqu'à quel temps il est possible d'approcher la fonction d'onde par une telle fonction à l'ordre dominant. La réponse rigoureuse à cette question est apportée par Combescure et Robert à partir des résultats présentés dans [37] jusqu'à des articles plus récents comme [38] ainsi que dans [39] qui détaillent ces différentes analyses et affirme que cette approximation semi-classique est valide jusqu'à des temps d'ordre $\log(\varepsilon^{-1})$, c'est-à-dire, jusqu'à des temps de l'ordre du temps d'*Ehrenfest*. Le terme d'erreur, ou reste, est alors de l'ordre de $\sqrt{\varepsilon}$ dans L^2 pour des temps finis et fixés indépendamment de ε (voir [7] et [6]). Sous certaines hypothèses sur les trajectoires classiques, il est possible d'aller jusqu'à des temps plus longs, toujours dépendants du paramètre ε ([39]).

Dans ces travaux et ceux reliés aux résultats qui y sont présentés, il est aussi question d'approximations semi-classiques de la fonction d'onde jusqu'à un ordre N arbitraire, c'est-à-dire, d'obtenir un développement de la forme suivante, pour des temps finis $|t| \leq T$, $T > 0$ fixé

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} \sum_{j=0}^N \varepsilon^{j/2} u_j \left(t, \frac{x - x(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S(t) + \xi(t) \cdot (x - x(t)))} + \mathcal{R}_N^\varepsilon(t, x),$$

où u_0 est le profil "usuel" de l'approximation à l'ordre dominant, avec $u_0|_{t=0} = a$ et $\mathcal{R}_N^\varepsilon$ le reste dont il faut connaître la taille dans un certain espace, en fonction du paramètre ε .

Plusieurs stratégies ont permis d'estimer ce reste, en permettant, dans un premier temps, d'obtenir un reste d'ordre $\varepsilon^{(N+1)/2}$ (voir [39] et les articles dont la référence est issue, ainsi que le résultat plus récent du Chapitre 11 de [87]) et quelques années plus tard, dans [63], [64] et [89], d'améliorer ce reste, et de le rendre exponentiellement petit dans L^2 , en le paramètre semi-classique ($\mathcal{O}(e^{-c/\varepsilon})$ ou $\mathcal{O}(e^{-c/\varepsilon^\theta})$, $0 < \theta < 1$ pour des temps longs) sous réserve d'hypothèses d'analyticité sur l'hamiltonien étudié.

Notons aussi que la question de la propagation d'états cohérents au temps d'Ehrenfest et au-delà est discutée dans des articles récents comme [94], où une analyse de type WKB est employée afin de montrer que la fonction d'onde ne reste plus localisée autour des trajectoires classiques considérées, mais s'étend.

Lorsque la fonction d'onde considérée est à valeurs vectorielles, en considérant un sous-ensemble du spectre de \mathcal{H}^ε assez isolé du reste, il est possible de montrer qu'il y a découplage adiabatique.

Dans le cas $\mathcal{H}^\varepsilon = -\frac{\Delta}{2} + V(x)$ où le potentiel qui entre en jeu est matriciel, hermitien et régulier, ses valeurs propres peuvent ou non se "croiser". Pour $V \in \mathcal{M}_N(\mathbf{C})$, on note ses valeurs propres $(\lambda_j)_{j \in J}$, $J \leq N$. On émet l'hypothèse de gap ou trou spectral suivant, sur le potentiel, bien qu'elle ne soit qu'une condition suffisante pour montrer qu'il y a découplage adiabatique :

$$\exists \delta_0 > 0, \forall j \neq k, \inf_{x \in \mathbf{R}^d} |\lambda_j(x) - \lambda_k(x)| \geq \delta_0 \quad (1.6)$$

et pour une donnée de type (1.4), on peut montrer des résultats analogues aux précédents, c'est-à-dire, que la solution associée reste de la même forme et dans le même niveau d'énergie jusqu'à des temps du même ordre, avec un terme d'erreur qui a connu plusieurs améliorations au cours du temps. Ces résultats et des discussions détaillées autour de cas plus généraux sont présentés dans [99] ainsi que [96] et [87].

Le cas non-linéaire

L'ajout d'une non-linéarité dans l'étude de la propagation des paquets d'onde induit une difficulté supplémentaire par rapport aux cas précédents, difficulté qui nécessite des techniques utilisant le caractère dispersif de l'équation.

La première étape de l'étude consiste d'abord à comprendre le rôle, et les régimes où les effets de la non-linéarité - si il y en a - peuvent apparaître dans un cas simple : le cas d'une équation scalaire. Réalisés dans [26], les travaux portent sur l'équation (1.5) avec $N = 1$ et où $d \geq 1$, $(t, x) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^d$, $\kappa \in \mathbf{R}$ et $\sigma \geq 0$, avec $\sigma < 2/(d-2)$, si $d \geq 3$ et $\alpha \geq 0$.

Le potentiel V , scalaire ici, et qui ne dépend pas du temps est régulier par rapport à la variable d'espace, à valeurs réelles et *au plus quadratique* :

Hypothèse 1.2.1 (Caractère “au plus quadratique”). *Un potentiel $V : \mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}$, régulier, est dit au plus quadratique si il satisfait les conditions suivantes :*

$$V \in C^\infty(\mathbf{R}^d, \mathbf{R}) \text{ et pour tout } \beta \text{ tel que } |\beta| \geq 2, \partial_x^\beta V \in L^\infty(\mathbf{R}^d).$$

Les trajectoires et actions classiques sont construites à partir de V . La donnée est de type paquet d'onde localisé dans l'espace des phases autour d'un point (x_0, ξ_0) (voir (1.4) sans vecteur propre). L'existence globale pour toutes données (x_0, ξ_0) et des estimations en temps longs sur les trajectoires classiques, sont déduites, en utilisant une simple inégalité différentielle :

$$\exists C_0, C_1 > 0, |x(t)| + |\xi(t)| \leq C_0 e^{C_1 t}, \quad \forall t \in \mathbf{R}. \quad (1.7)$$

La première question concerne l'existence de la solution, à ε fixé, résultat donné dans [22]. Pour cela, il est nécessaire d'introduire une notion de criticalité pour l'exposant σ : on dit que

- la non-linéarité est L^2 -sous-critique (ou sous-critique en masse) si $\sigma < 2/d$, L^2 -sur-critique sinon.
- la non-linéarité est dite H^1 -sous-critique (ou sous-critique en énergie) si $d < 3$ ou si pour $d \geq 3$, $\sigma < 2/(d-2)$.

Afin de prouver qu'une unique solution globale existe pour (1.5)-(1.4), il est nécessaire d'introduire les estimations de Strichartz. On définit d'abord ce qu'est une paire admissible :

Définition 1.2.2. *Un couple (p, q) est dit admissible si $2 \leq q \leq \frac{2d}{d-2}$ ($2 \leq q \leq \infty$ si $d = 1$, $2 \leq q < \infty$ si $d = 2$) et*

$$\frac{2}{p} = \delta(q) := d \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{q} \right).$$

Alors, [52], [51], [77] et [22] donnent les estimations de Strichartz suivantes, qui sont locales en temps :

Théorème 1.2.3. *Soient (p, q) , (p_1, q_1) , (p_2, q_2) des paires admissibles et I un intervalle de temps fini. On introduit*

$$u(t) = e^{it(-\frac{\Delta}{2} + V(x))} u_0 \quad \text{et} \quad v(t) = \int_{I \cap \{s \leq t\}} e^{i(t-\tau)(-\frac{\Delta}{2} + V(x))} f(\tau) d\tau.$$

– Il existe $C = C(q, |I|)$, tel que pour tout $u_0 \in L^2(\mathbf{R}^d)$, on ait pour tout $s \in I$

$$\|u\|_{L^p(I, L^q(\mathbf{R}^d))} \leq C \|u(s)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}. \quad (1.8)$$

– Il existe $C = C(q_1, q_2, |I|)$, tel que pour tout $f \in L^{p_2'}(I, L^{q_2'}(\mathbf{R}^d))$ on ait

$$\|v\|_{L^{p_1}(I, L^{q_1}(\mathbf{R}^d))} \leq C \|f\|_{L^{p_2'}(I, L^{q_2'}(\mathbf{R}^d))}. \quad (1.9)$$

Notons que des travaux liés aux estimations de Strichartz pour l'équation de Schrödinger, avec potentiels indépendants du temps et sur-quadratiques sont présentés dans [103] and [104], tandis que la notion de criticalité des potentiels quadratiques est discutée dans [102].

Théorème 1.2.4 (Existence globale de la solution, de [22]).

1. **Cas L^2 -sous-critique :**

Soit V un potentiel qui satisfait l'Hypothèse 1.2.1. Alors, à $\varepsilon > 0$ fixé, pour toute donnée $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$, le problème de Cauchy (1.5)-(1.4) admet une unique solution dans

$$C(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R}^d)) \cap L_{loc}^{(4\sigma+4)/d\sigma}(\mathbf{R}, L^{2\sigma+2}(\mathbf{R}^d)).$$

De plus, sa norme L^2 est conservée : $\forall t \in \mathbf{R}$, $\|\psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} = \|a\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}$.

2. **Cas H^1 –sous-critique :**

On suppose $\kappa \geq 0$, et que le potentiel V satisfait l’Hypothèse 1.2.1 qu’il est C^1 par rapport à la variable de temps et que $\partial_t V$ satisfait aussi l’Hypothèse 1.2.1. Alors, à $\varepsilon > 0$ fixé, pour toute donnée $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$, le problème de Cauchy (1.5)-(1.4) admet une unique solution dans

$$C(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R}^d)) \cap L_{loc}^{(4\sigma+4)/d\sigma}(\mathbf{R}, L^{2\sigma+2}(\mathbf{R}^d)).$$

De plus, la norme L^2 est conservée : $\forall t \in \mathbf{R}$, $\|\psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} = \|a\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}$.

La preuve se base sur un argument utilisant un théorème de point fixe dans un espace approprié, ainsi que des estimations de Strichartz locales en temps, du Théorème 1.2.3, qui permettent de montrer l’existence locale de la solution. L’existence globale est obtenue en utilisant la conservation de la masse dans le cas L^2 –sous-critique et la conservation de l’énergie, ainsi que l’indentité du viriel dans le cas H^1 –sous-critique.

Remarque 1.2.5.

1. En réalité, il suffit d’une donnée dans $L^2(\mathbf{R}^d)$ pour le cas sous-critique en masse, si l’on souhaite avoir une existence globale de la solution telle qu’on ait seulement

$$\psi^\varepsilon \in C(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R}^d)) \cap L_{loc}^{(4\sigma+4)/d\sigma}(\mathbf{R}, L^{2\sigma+2}(\mathbf{R}^d)).$$

(voir [101], ou encore [33], [98].)

2. Une donnée dans $H^1(\mathbf{R}^d)$ (à ε fixé) telle que $x\psi^\varepsilon \in L^2(\mathbf{R}^d)$ suffit pour le cas sous-critique en énergie si l’on veut obtenir l’existence globale de la solution dans les espaces indiqués.
3. L’hypothèse portant sur le caractère C^1 en temps du potentiel, dans le cas H^1 –sous-critique, est discutée dans [30], où les auteurs précisent que cette hypothèse n’est pas essentielle.

Remarque 1.2.6. Dans le cas où ψ^ε n’est pas scalaire mais vectorielle, avec un potentiel qui vérifie $V(x) = D(x) + W(x)$, avec D diagonale et dont les composantes vérifient l’Hypothèse 1.2.1, et W bornée à dérivées bornées, il est possible de montrer que l’on a existence globale sous les mêmes conditions en traitant simultanément chaque coordonnée de la fonction d’onde.

Pour étudier la propagation des états cohérents, les auteurs se placent dans les cas où l’on a existence globale de la solution. Le point important à souligner est que cette analyse permet d’exhiber un exposant critique $\alpha_c := 1 + d\sigma/2$ pour les états cohérents, indiquant le caractère critique de la “taille” de la non-linéarité d’un point de vue semi-classique : en effet, pour des exposants $\alpha > \alpha_c$, les effets non-linéaires ne sont pas visibles à l’ordre dominant et il est possible de construire une approximation de type paquet d’onde linéaire, c’est-à-dire, avec un profil solution d’une équation de Schrödinger linéaire.

Si $\alpha = \alpha_c$, alors les effets de la non-linéarité apparaissent à l’ordre dominant; ceux-ci se traduisent sur l’équation d’enveloppe, qui est, cette fois, une équation de Schrödinger non-linéaire sans paramètre semi-classique. Dans ce cas critique, il est important de bien connaître sa solution, lorsqu’elle existe, et notamment son comportement en temps longs. On introduit donc u , le profil, solution du problème de Cauchy suivant :

$$i\partial_t u + \frac{1}{2}\Delta u - \frac{1}{2}\langle y, \text{Hess } V(x(t)).y \rangle u = \kappa|u|^{2\sigma}u \quad ; \quad u(0, y) = a(y). \quad (1.10)$$

L’existence globale de la solution est montrée de la même manière que pour la fonction d’onde ψ^ε et sous l’hypothèse suivante, qui diffère légèrement de l’Hypothèse 1.2.1, le potentiel $\mathcal{V} := \frac{1}{2}\langle y, \text{Hess } V(x(t)).y \rangle$ étant dépendant du temps (voir [22]) :

Hypothèse 1.2.7. On considère $\mathcal{V} \in C^\infty(\mathbf{R} \times \mathbf{R}^d)$, un potentiel à valeurs réelles, régulier par rapport à la variable d’espace, c’est-à-dire : $\forall t \in \mathbf{R}$, $x \mapsto \mathcal{V}(t, x)$ est C^∞ . De plus, \mathcal{V} est au plus quadratique en espace, uniformément en la variable du temps :

$$\forall \alpha \in \mathbf{N}^d, |\alpha| \geq 2, \quad \partial_x^\alpha \mathcal{V} \in L^\infty(\mathbf{R} \times \mathbf{R}^d).$$

Par ailleurs, $t \mapsto \sup_{|x| \leq 1} |\mathcal{V}(t, x)|$ est dans $L^\infty(\mathbf{R})$.

Le théorème d'existence globale correspondant s'énonce de la façon suivante :

Théorème 1.2.8 (Existence globale du profil, de [22]).

1. *Cas L^2 –sous-critique :*

Soit \mathcal{V} un potentiel qui satisfait l'hypothèse 1.2.7. Alors, pour toute donnée $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$, le problème de Cauchy (1.10) admet une unique solution dans

$$C(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R}^d)) \cap L_{loc}^{(4\sigma+4)/d\sigma}(\mathbf{R}, L^{2\sigma+2}(\mathbf{R}^d)).$$

De plus, sa norme L^2 est conservée : $\forall t \in \mathbf{R}, \|u(t)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} = \|a\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}$.

2. *Cas H^1 –sous-critique :*

On suppose $\kappa \geq 0$, et que le potentiel \mathcal{V} satisfait l'hypothèse 1.2.7 qu'il est C^1 par rapport à la variable de temps et que $\partial_t \mathcal{V}$ satisfait aussi l'hypothèse 1.2.7. Alors, pour toute donnée $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$, le problème de Cauchy (1.10) admet une unique solution dans

$$C(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R}^d)) \cap L_{loc}^{(4\sigma+4)/d\sigma}(\mathbf{R}, L^{2\sigma+2}(\mathbf{R}^d)).$$

De plus, la norme L^2 est conservée : $\forall t \in \mathbf{R}, \|u(t)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} = \|a\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}$.

La preuve est similaire à celle du Théorème 1.2.4, utilisant des estimations de Strichartz en temps données par [52].

Il reste ensuite à connaître le comportement en temps longs du profil, chose possible sous certaines hypothèses sur le potentiel. On peut répertorier plusieurs cas où des bornes pour les normes des dérivées et des moments du profil ont été prouvées. Il est cependant possible d'imaginer qu'il existe plus de cas où des contrôles de ces normes sont vérifiés. Parmi les cas connus qui nous intéressent, on peut citer :

Théorème 1.2.9 (Contrôle du profil). *On considère u solution de (1.10). Alors les contrôles des normes de Sobolev et des moments de u sont vérifiés (au moins) dans les cas suivants :*

- (De [22]) Si $\kappa \geq 0$, $\sigma = 1$ si $d = 3$, et si les composantes de $\text{Hess } V(x(t))$ sont des fonctions continues et à support compact, alors le profil u vérifie : il existe $C > 0$, tel que pour toute paire admissible (p, q) , on ait

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, |\alpha| + |\beta| \leq k, \|x^\alpha \partial_x^\beta u\|_{L^p([0,t], L^q)} \lesssim t^C.$$

- (De [22]) Si $d = \sigma = 1$ (cas cubique unidimensionnel), alors le profil u vérifie : il existe $C > 0$, tel que pour toute paire admissible (p, q) , on ait

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, |\alpha| + |\beta| \leq k, \|x^\alpha \partial_x^\beta u\|_{L^p([0,t], L^q)} \lesssim e^{Ct}.$$

- (De [22]) Si $\sigma \geq 2/d$, et si $\text{Hess } V(x(t))$ est diagonale avec des valeurs propres négatives alors le profil u vérifie : il existe $C > 0$, tel que pour toute paire admissible (p, q) , on ait

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, |\alpha| + |\beta| \leq k, \|x^\alpha \partial_x^\beta u\|_{L^p([0,t], L^q)} \lesssim e^{Ct}.$$

- (De [30]) Si $d \leq 3$, $\sigma \in \mathbf{N}$, avec $\sigma = 1$ si $d = 3$, et en supposant que $\text{Hess } V(x(t))$ est diagonale de la forme $\Omega(t)I_d$ (isotrope) et que $|\text{Hess } V(x(t))| \leq C \langle t \rangle^{-\gamma}$, pour un certain $\gamma > 2$ alors il existe $C > 0$ tel que

$$\|u(t)\|_{H^k} \leq C, \quad \|\langle x \rangle^k u(t)\|_{L^2} \leq C \langle t \rangle^k.$$

Un autre cas de décroissance de la Hessienne du potentiel permet de montrer un contrôle des normes du profil et a été démontré dans [69] :

- (De [69]) Si $d = 2, 3$, $\kappa \geq 0$, $\sigma = 1$, et en supposant

$$|\text{Hess } V(x(t))| + (1 + |t|) \left| \frac{d}{dt} \text{Hess } V(x(t)) \right| \leq C(1 + |t|)^{-\kappa_0},$$

avec $C > 0$ et $\kappa_0 > 2$, alors le profil u vérifie : il existe $C > 0$, tel que pour toute paire admissible (p, q) , on ait

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, |\alpha| + |\beta| \leq k, \|x^\alpha \partial_x^\beta u\|_{L^p([0,t], L^q)} \lesssim e^{Ct}.$$

Ce résultat sera plus détaillé dans la présentation des travaux de thèse, Chapitre 2, Section 2.1.

Enfin, les résultats suivants ne sont pas restreints aux potentiels de la forme $\sum_j \Omega_j(t) x_j^2$ mais concernent des potentiels non autonomes plus généraux qui satisfont l'hypothèse 1.2.7.

On a alors le contrôle suivant (donné ici dans le cas d'une non-linéarité cubique bien que l'énoncé de [30] soit plus général) :

- De ([30]) Si $d \geq 1$ et si le potentiel

$$\mathcal{V}(t, x) = \frac{1}{2} \langle y, \text{Hess } V(x(t)) \cdot y \rangle$$

satisfait l'Hypothèse 1.2.7, alors la solution u est globale en temps et on a les contrôles suivants :

- (1) Il existe $C_0 > 0$ tel que

$$\|u(t)\|_{L^2} + \|\nabla u(t)\|_{L^2} + \|xu(t)\|_{L^2} \leq C_0 e^{C_0 t}, \quad \forall t \geq 0.$$

- (2) Soit $k \geq 2$, il existe $C > 0$ tel que

$$\sup_{2 \leq |\alpha| + |\beta| \leq k} \|x^\alpha \partial_x^\beta u(t)\|_{L^2} \leq C e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0.$$

Dans les cas où le profil satisfait le contrôle de type exponentiel sur un certain nombre de ses dérivées et moments, il est possible de montrer que la fonction d'onde reste, à l'ordre dominant, proche d'une solution type état cohérent construite avec le profil, pour des temps de type Ehrenfest non-linéaires : pour tout $|t| \leq c \log(\varepsilon^{-1})$,

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-d/4} u \left(t, \frac{x - x(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S(t) + \xi(t) \cdot (x - x(t)))} + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon} e^{Ct}),$$

dans $L^2(\mathbf{R}^d)$. La borne en "log log" est due au contrôle exponentiel des normes du profil qui apparaît dans les termes à contrôler en utilisant des estimations de Strichartz. Il est cependant utile de remarquer que dans le cas L^2 -sous-critique, l'utilisation de tels outils n'est pas nécessaire, il est donc possible d'améliorer les bornes et le reste dans le cas, par exemple, cubique unidimensionnel.

Il est par ailleurs important de noter que, même pour cet exposant critique, l'effet de la non-linéarité ne se traduit pas sur la façon dont l'état cohérent se concentre dans l'espace des phases, à l'ordre dominant. En effet, la mesure de Wigner de la solution ψ^ε reste identique à celle dans le cas linéaire ([84], [53] et [54]) :

$$w(t, x, \xi) = \|a\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} \delta_{(x(t), \xi(t))}.$$

Des résultats similaires ont été démontrés pour d'autres potentiels, par exemple, pour des potentiels périodiques, dans [31] ainsi que d'autres non-linéarités, de type Hartree, pour lesquels des cas sous-critiques ont été analysés pour des noyaux très réguliers (voir [4], [19]) ou encore pour des données différentes, de type WKB ([20], [28]).

L'étude des cas matriciels commence avec [25], où les auteurs se cantonnent au cas d'une non-linéarité cubique ($\sigma = 1$) et à l'exposant critique $\alpha_c = 1 + d/2$ afin de voir apparaître les effets non-linéaires. Le

cas unidimensionnel étant L^2 -sous-critique pour des non-linéarités cubiques, l'utilisation des estimations de Strichartz qui ne sont pas démontrées pour des potentiels matriciels comme ceux de [25], n'est pas nécessaire pour traiter la non-linéarité.

On en déduit aussi que le contrôle exponentiel des dérivées et moments du profil u , solution de (1.10) est vérifié (deuxième point du Théorème 1.2.9).

Les auteurs de [25] se heurtent à deux problèmes par rapport à ceux issus de l'étude du cas scalaire :

- pour $N > 2$, la multiplicité des vecteurs propres peut poser problème : la dérivée d'un vecteur propre complexe peut ne pas être orthogonal à lui-même. Il est donc nécessaire de construire une famille de vecteurs propres qui dépendent du temps et orthogonaux entre eux (dans l'esprit de [61]) afin de simplifier l'étude.
- les projecteurs spectraux ne commutent pas avec le Laplacien : des termes trop gros, dans la limite semi-classique, apparaissent. Il faut alors introduire des corrections pour éliminer ces termes.

Il est alors possible de montrer que pour une donnée de type (1.4), qui vit dans un espace propre donné j , la solution exacte vérifie

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} u \left(t, \frac{x - x_j(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S_j(t) + \xi_j(t) \cdot (x - x_j(t)))} \chi_j(t, x) + o(1),$$

pour tout temps t qui vérifie $|t| \leq c \log \log(\varepsilon^{-1})$ et où les quantités classiques sont construites à l'aide du j -ième mode.

Enfin, dans les deux précédents travaux, [26] et [25], des données de type perturbation d'états cohérents, ainsi que des superpositions de plusieurs états de ce type sont étudiés.

Il est alors possible de propager ces fonctions sous certaines conditions : on choisit comme donnée

$$\begin{aligned} \psi^\varepsilon(0, x) &= r^\varepsilon(x) \\ &+ \varepsilon^{-1/4} a_j \left(\frac{x - x_j(0)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon} \xi_j(0) \cdot (x - x_j(0))} \chi_j(0, x) + \varepsilon^{-1/4} a_k \left(\frac{x - x_k(0)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon} \xi_k(0) \cdot (x - x_k(0))} \chi_k(0, x), \end{aligned}$$

avec $\chi_{j,k} \in \text{Ker}(V - \lambda_{j,k})$ et on suppose pour le terme perturbatif

$$\|r^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R})} + \|\varepsilon \partial_x r^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R})} + \|x r^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R})} = \mathcal{O}(\varepsilon^\eta), \quad \eta > d/8, \text{ ou } \eta > 1/4 \text{ dans le cas unidimensionnel.}$$

On émet aussi l'hypothèse suivante sur les quantités classiques considérées :

$$(x_j(0), \xi_j(0), \lambda_j) \neq (x_k(0), \xi_k(0), \lambda_k), \quad \inf_{x \in \mathbf{R}} |\lambda_j(x) - \lambda_k(x) - E_j + E_k| > 0,$$

où $E_{j,k} = \xi_{j,k}^2/2 + \lambda_{j,k}(x_{j,k})$. La première hypothèse signifie qu'ou bien on choisit des données dans des espaces propres différents, ou bien elles sont dans le même espace propre et les points de départ dans l'espace de phase sont différents. Lorsque $\lambda_j = \lambda_k$, la seconde hypothèse revient à considérer des énergies différentes $E_j \neq E_k$ ([26]).

Alors, en notant

$$\varphi_{j,k}^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} u_{j,k} \left(t, \frac{x - x_{j,k}(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S_{j,k}(t) + \xi_{j,k}(t) \cdot (x - x_{j,k}(t)))},$$

avec

$$i \partial_t u_{j,k} + \frac{1}{2} \partial_y^2 u_{j,k} - \frac{1}{2} \langle y, \text{Hess } \lambda_{j,k}(x_{j,k}(t)) y \rangle u_{j,k} = \kappa |u_{j,k}|^2 u_{j,k}$$

on a dans un certain espace :

$$\psi^\varepsilon(t, x) \simeq \varphi_j^\varepsilon(t, x) \chi_j(t, x) + \varphi_k^\varepsilon(t, x) \chi_k(t, x).$$

Ce principe n'est pas toujours valable pour des temps longs et nécessite parfois des hypothèses supplémentaires sur le contrôle du profil et des trajectoires.

Il est intéressant de constater que le principe de superposition, vérifié pour des situations linéaires, peut encore être valide dans un cadre non-linéaire, modulo certaines hypothèses sur les quantités classiques introduites précédemment. En un sens, la non-linéarité agit principalement sur les approximations φ_j et φ_k , qui sont concentrés autour des trajectoires classiques dans l'espace des phases. Si ces trajectoires ne se "voient" pas beaucoup, la non-linéarité n'affectera pas l'interaction entre φ_j et φ_k à l'ordre dominant.

Enfin, il existe de nombreuses autres études sur la propagation non-linéaire de sommes de certaines données, pour des situations qui diffèrent de celles de [26] et [25]; notons par exemple le cas d'une non-linéarité de type Hartree dans [80] et les références qui y sont mentionnées, ou encore [19] et [23].

1.2.2 Transitions non-adiabatiques à travers des croisements évités dans les cas linéaires

Dans le cas linéaire, il est connu que la présence de croisement peut affecter le système considéré, en brisant l'approximation adiabatique et en entraînant des phénomènes de transition entre les niveaux d'énergie qui sont proches. On rappelle que la distance minimale entre les valeurs propres est donnée par le paramètre adiabatique δ . La probabilité que cette transition ait lieu est donnée par la formule de Landau-Zener, le coefficient étant de la forme $p = e^{-C \frac{\delta^2}{\varepsilon}}$. Selon la valeur de δ , on peut s'attendre à trois types de transitions :

- $\delta \ll \sqrt{\varepsilon}$: pour lequel la probabilité de transition est proche de 1.
- $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$: le régime critique, pour lequel $0 < p < 1$.
- $\delta \gg \sqrt{\varepsilon}$: la probabilité de transition est proche de 0.

On peut considérer δ et ε séparément, mais le cas où limite adiabatique (le paramètre δ tend vers zéro) et limite semi-classique (ε tend vers zéro) sont liées dans le régime critique $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$ est celui que nous traiterons dans le cadre non-linéaire. Notons que différents types de croisements sont répertoriés dans [65], de manière similaire aux croisements exacts, les plus simples (Γ , défini dans la Définition 1.1.1, est de codimension 1, avec des valeurs propres de multiplicité 1 ou 2) étant traités dans [61] - c'est ce cas qui va nous intéresser - et les autres (Γ est codimension 2, les valeurs propres de multiplicité 1 ou 2) dans [62]. Par ailleurs les cas où δ ne dépend pas de ε sont traités dans [91].

On se focalise sur le cas où les valeurs propres sont de multiplicité 1.

Après un travail conséquent sur l'hamiltonien de départ, les auteurs de [61] se ramènent à un système du type

$$i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta\psi^\varepsilon - \begin{pmatrix} x_1 & \delta \\ \delta & -x_1 \end{pmatrix}\psi^\varepsilon + \tilde{V}\psi^\varepsilon = 0 \quad (1.11)$$

où $(t, x) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^d$, $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$. On considère les quantités associées à la valeur propre $\lambda_\delta^+(x) = \sqrt{x_1^2 + \delta^2}$ et on note $\chi_\delta^+(x)$ le vecteur propre associé. Les données étudiées sont de type paquets d'onde d'Hagedorn construites avec les trajectoires classiques associées au mode +. Par commodité, on note cette donnée

$$\varphi_+^\varepsilon(x^+(-T), \xi^+(-T), x) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S^+(-T) + \xi^+(-T) \cdot (x - x^+(-T)))} \chi_\delta^+(x),$$

sans donner sa forme explicite qui est détaillée dans [61].

On suppose que Γ contient le point 0. Le croisement est supposé *transverse*, c'est-à-dire

$$\xi(0) = (\xi_1(0), \dots, \xi_d(0)) \text{ avec } \xi_1(0) \neq 0,$$

la vitesse en ce point de la zone de croisement est non nulle dans cette direction. Suite à l'utilisation d'asymptotiques précises sur ces quantités classiques, autour du point 0, les auteurs de [61] arrivent à construire des approximations dans diverses zones, soit éloignées, soit proches de Γ où le croisement a lieu. Dans les zones assez éloignées, l'approximation usuelle, utilisant des paquets d'ondes similaires, est valide tandis que dans une région qui contient Γ , une autre approximation est construite et recollée

avec les précédentes. Cette dernière contient les informations liées à la transition entre les modes, et notamment le coefficient de transition donné par la formule de Landau-Zener.

Partant d'un paquet d'onde d'Hagedorn en $-T$ colinéaire à χ_δ^+ , la solution est approchée, à l'ordre dominant, en T par une somme de deux paquets d'ondes d'Hagedorn vivant chacun sur un mode, et pondérés par des coefficients, de la forme

$$\begin{aligned} \psi_{app}^\varepsilon(T, x) = & (1 - p) \left[\varphi_+^\varepsilon(x^+(T), \xi^+(T), x) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S^+(T) + \xi^+(T) \cdot (x - x^+(T)))} \right] \chi_\delta^+(x) \\ & + p \left[\varphi_-^\varepsilon(x^-(T), \xi^-(T), x) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S^-(T) + \xi^-(T) \cdot (x - x^-(T)))} \right] \chi_\delta^-(x), \end{aligned}$$

où p est le coefficient de transition de Landau-Zener et où les φ_\pm^ε sont des paquets d'onde d'Hagedorn. Le reste est d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^\gamma)$, $0 < \gamma < 1/6$.

Par ailleurs, il est important de remarquer l'existence de nombreux travaux sur les systèmes et formules de Landau-Zener, véritables "boîtes noires" qui permettent d'obtenir des informations sur ce phénomène de transition après passage dans une zone de croisement, sans connaître en détail ce qui s'y passe. Les travaux les plus récents traitent des systèmes non-linéaires (voir par exemple [27], [14], [78] ou encore [93]), mais nous verrons que seule la formule linéaire est nécessaire dans les résultats présentés dans le Chapitre 2.

Chapitre 2

Présentation des travaux de thèse

2.1 Partie I : Un théorème adiabatique pour des états cohérents dans le cadre non-linéaire

La première partie du présent travail de thèse porte sur un système analogue à celui étudié dans [25], et qui concerne des équations de Schrödinger couplées uniquement par une non-linéarité cubique en dimension 1, dont le “poids” semi-classique est critique, c’est-à-dire, avec $\alpha = \alpha_c$. Contrairement au travail initié par les auteurs de [25], qui présentent un cas L^2 -sous-critique, la non-linéarité dans [69], qui traite les cas $d = 2, 3$ n’est “que” H^1 -sous-critique. Il en résulte des difficultés, techniques notamment, qui vont nous amener à considérer des potentiels différents et moins généraux : des potentiels de type *longue portée*. Nous étudierons aussi le cas $d = 1$ pour ces potentiels et nous verrons qu’il est possible d’améliorer le temps de validité de l’approximation adiabatique. Par ailleurs, nous introduirons un autre cas - qui nécessite des hypothèses de décroissance sur le potentiel associé à l’équation du profil (la Hessienne) - où il est possible de montrer un contrôle des dérivées et des moments de celui-ci en temps long.

2.1.1 Le problème

On considère le système d’équations suivant dans la limite semi-classique $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta\psi^\varepsilon - V(x)\psi^\varepsilon = \kappa\varepsilon^\alpha|\psi^\varepsilon|_{\mathbf{C}^2}^2\psi^\varepsilon \quad ; \quad \psi|_{t=0} = \psi_0^\varepsilon, \quad (2.1)$$

où $\kappa \geq 0$, $d \in \{2, 3\}$, la solution et la donnée sont des vecteurs de \mathbf{C}^2 et V est une matrice de taille 2×2 , auto-adjointe, régulière en $x \in \mathbf{R}^d$.

Contrairement au cas étudié dans [25], nous sommes ici en présence d’une non-linéarité L^2 -sur-critique, mais H^1 -sous-critique. De ce fait, la condition $\kappa \geq 0$ est cruciale pour avoir l’existence globale de la solution à ε fixé. Par ailleurs, comme nous allons le voir dans la suite, cela implique des problèmes d’ordre technique pour prouver les résultats usuels : en effet les lois de conservation seules ne suffisent pas à prouver les résultats, il faut faire usage des estimations de Strichartz afin de traiter la non-linéarité.

On choisit un potentiel qui vérifie l’hypothèse suivante, qui diffère de l’Hypothèse 1.2.1, en étant plus restrictive : on écrit V

$$V(x) = \rho_0(x) \text{Id} + \begin{pmatrix} \rho(x) & \omega(x) \\ \omega(x) & -\rho(x) \end{pmatrix}$$

où ρ_0, ρ et ω sont régulières et on suppose

Hypothèse 2.1.1. (i) V est de type longue portée : il existe une matrice V_∞ et $p > 0$ tels que pour $x \in \mathbf{R}^d$,

$$\begin{aligned} \exists C > 0, \quad \|V(x) - V_\infty\| &\leq C \langle x \rangle^{-p}, \\ \forall \alpha \in \mathbf{N}^d, \quad |\alpha| \geq 1, \quad \exists C_\alpha > 0, \quad \|\partial_x^\alpha V(x)\| &\leq C_\alpha \langle x \rangle^{-p-|\alpha|}, \end{aligned}$$

Les valeurs propres du potentiel sont données par

$$\lambda_{\pm}(x) = \rho_0(x) \pm \sqrt{\rho^2(x) + \omega^2(x)},$$

et on suppose qu'elles vérifient une hypothèse de "gap" :

$$(ii) \exists \delta_0 > 0, \quad \omega^2(x) + \rho^2(x) > \delta_0, \quad \forall x \in \mathbf{R}^d.$$

(iii) $\exists K \subset \mathbf{R}^d$, K un sous-espace compact de \mathbf{R}^d tel que

$$\forall x \notin K, \quad V(x) = \begin{pmatrix} \lambda_+(x) & 0 \\ 0 & \lambda_-(x) \end{pmatrix}.$$

Notons d'abord que des potentiels de ce type existent bel et bien, par exemple, en prenant $\theta \in C_0^\infty(\mathbf{R}^d)$ et

$$V(x) = \begin{pmatrix} \cos \theta(x) & \sin \theta(x) \\ \sin \theta(x) & -\cos \theta(x) \end{pmatrix}.$$

Grâce au point (ii), on peut alors définir des vecteurs propres $\chi^\pm(x)$ réguliers et de norme 1, associés à $\lambda_\pm(x)$. Par ailleurs, le point (i) de l'hypothèse précédente, ainsi que la condition $\kappa \geq 0$ permettent de déduire l'existence globale de la solution à ε fixé : en effet, puisque un potentiel qui vérifie les Hypothèses 2.1.1 satisfait aussi l'Hypothèse 1.2.1, on peut, grâce au Théorème 1.2.4 déduire l'existence globale (la preuve est donnée dans le Chapitre 3, Section 3.8 et est basée sur la remarque qui suit le Théorème 1.2.4 pour traiter le cas matriciel).

La motivation essentielle pour utiliser ce type de potentiels moins généraux que ceux au plus quadratiques, vient du fait que nous sommes ici dans un cas L^2 -critique ou sur-critique. De ce fait, les estimations standard L^2 ne sont plus utilisables; nous nous plaçons donc dans un cadre où des estimations de Strichartz pour des potentiels matriciels sont démontrées, dans [50]. Ce sont notamment les points (i), l'hypothèse longue portée, et (iii) qui permettent de définir des projecteurs spectraux constants pour de grands x . En effet, le point (iii) revient à écrire que les projections $\Pi_\pm^\varepsilon \psi^\varepsilon$ sont diagonales en dehors d'un compact. Leurs dérivées sont donc à support compact, ce qui entraîne que $\left[-\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta, \Pi_\pm^\varepsilon\right]$ est à support compact et permet donc d'obtenir les estimations de Strichartz voulues, sans *cut-off*.

Par ailleurs, le point (i) garantit que les valeurs propres ne vont pas se croiser et donc, d'être dans une situation où l'adiabaticité peut être prouvée, tandis que le point (ii) nous permet d'avoir des valeurs propres et des vecteurs propres réguliers, qui vérifient

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, \exists C > 0, \forall x \in \mathbf{R}^d, |\partial_x^\alpha \lambda_\pm(x)| + |\partial_x^\beta \chi^\pm(x)| \leq C. \quad (2.2)$$

La donnée ψ_0^ε est un paquet d'onde (ou une perturbation ou une superposition de deux paquets d'onde) :

$$\psi_0^\varepsilon(x) = \varepsilon^{-d/4} e^{i\xi_0^+ \cdot (x-x_0^+)/\varepsilon} a \left(\frac{x-x_0^+}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \chi^+(x), \quad (2.3)$$

où $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$.

Quantités classiques

On ré-introduit ici les quantités classiques qui ont été données dans un cadre plus général par (1.3) :

$$\dot{x}^\pm(t) = \xi^\pm(t), \quad \dot{\xi}^\pm(t) = -\nabla \lambda_\pm(x^\pm(t)), \quad x^\pm(0) = x_0^\pm, \quad \xi^\pm(0) = \xi_0^\pm.$$

Par ailleurs, sous le point (i) de l'Hypothèse 2.1.1, le système précédent admet une solution globale et unique et vérifie

$$\exists C_0, C_1 > 0, \quad |x^\pm(t)| \leq C_0 \langle t \rangle, \quad |\xi^\pm(t)| \leq C_1, \quad \forall t \in \mathbf{R}, \quad (2.4)$$

qui présente de meilleures bornes que celles de (1.7), en raison du potentiel plus restrictif ici.

On note S^\pm l'action classique associée à $(x^\pm(t), \xi^\pm(t))$

$$S^\pm(t) = \int_0^t \left(\frac{1}{2} |\xi^\pm(s)|^2 - \lambda_\pm(x^\pm(s)) \right) ds.$$

Les énergies correspondantes $E^\pm(t)$ sont données par :

$$E^\pm(t) = \frac{|\xi^\pm(t)|^2}{2} + \lambda_\pm(x^\pm(t)).$$

Ces énergies sont constantes le long des trajectoires :

$$E^\pm(t) = E^\pm(0) = \frac{|\xi_0^\pm|^2}{2} + \lambda_\pm(x_0^\pm), \quad \forall t \in \mathbf{R}.$$

On choisit un mode, le mode +, afin de définir la notion d'énergie *non-captante* : on définit

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \lambda_+(x) = \lambda_\infty,$$

si $E(0) > \lambda_\infty$ et si toutes les trajectoires associées au mode + d'énergie $E(0)$ vérifient

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |x^+(t)| = +\infty,$$

alors l'énergie $E(0)$ est *non-captante* pour le mode +; on parlera alors de trajectoires *non-captées*.

L'Ansatz

Pour la suite de l'étude, on considère les trajectoires classiques associées à $\lambda_+(x)$ et on note

$$Q^+(t) = \text{Hess } \lambda_+(x^+(t)).$$

On définit alors u , le profil, comme étant la solution de

$$i\partial_t u + \frac{1}{2} \Delta u = \frac{1}{2} \langle Q^+(t)y; y \rangle u + \kappa |u|^2 u \quad ; \quad u(0, y) = a(y),$$

et φ^ε la fonction suivante :

$$\varphi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-d/4} u \left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{i(S^+(t) + \xi^+(t)(x - x^+(t)))/\varepsilon}. \quad (2.5)$$

D'après (2.2), le potentiel satisfait l'Hypothèse 1.2.7, on peut, grâce au Théorème 1.2.8 déduire l'existence globale du profil, et son contrôle sur des intervalles de temps finis, par [22] :

Proposition 2.1.2. *Soient $T > 0$ et $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$. Alors, pour tout $k \in \mathbf{N}$, il existe une constante $C = C(T, k)$ telle que*

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, |\alpha| + |\beta| \leq k, \|x^\alpha \partial_x^\beta u(t)\|_{L^2} \leq C, \quad \forall t \in [0, T].$$

2.1.2 A propos des estimations de Strichartz

Avant d'énoncer les résultats principaux de [69], on introduit les outils essentiels pour les prouver, et qui sont issus de [50].

Deux difficultés nous incitent à utiliser ces outils :

- Etant en présence d'un potentiel matriciel, et donc de plusieurs modes, il n'est pas possible d'utiliser la méthode de [26].
- Dans le cas unidimensionnel qui est L^2 -sous-critique, étudié dans [25], des méthodes d'énergie sont utilisées. Nous ne pouvons nous cantonner à ces méthodes, étant dans des cas sur-critiques ($d = 2, 3$).

Rappelons que dans le cas d'équations de Schrödinger scalaires, ce type d'estimations est valable pour des potentiels beaucoup moins restrictifs (au plus quadratiques, de [51], [52] et [22] qui permettent d'obtenir les estimations (1.8) et (1.9) du Théorème 1.2.3)

Dans le cas matriciel, les potentiels au plus quadratiques généraux, considérés dans un cadre semi-classique, n'ont pas d'estimations de Strichartz associées qui soient démontrées. On se restreint donc à une classe plus restrictive de potentiels, qui satisfont l'Hypothèse 2.1.1 et pour lesquels les auteurs de [50] ont démontré la validité d'estimations de Strichartz :

Théorème 2.1.3 (De [50]). *Soient (p, q) , (p_1, q_1) , (p_2, q_2) des paires admissibles telles que*

$$q, q_1, q_2 \neq 2d/(d-2), \quad (q, q_1, q_2 < \infty \text{ si } d = 2).$$

Soit I un intervalle de temps fini et $P(\varepsilon) = -\varepsilon^2\Delta/2 + V(x)$. On considère

$$u^\varepsilon(t) = e^{i\frac{t}{\varepsilon}P(\varepsilon)}u_0 \quad \text{et} \quad v^\varepsilon(t) = \int_{I \cap \{s \leq t\}} e^{i\frac{t-s}{\varepsilon}P(\varepsilon)} f^\varepsilon(\tau) d\tau.$$

– *Il existe $C = C(q, |I|)$, indépendant de ε tel que pour tout $u_0 \in L^2(\mathbf{R}^d)$, on ait pour tout $s \in I$*

$$\|u^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q(\mathbf{R}^d))} \leq C\varepsilon^{-1/p} \|u^\varepsilon(s)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}.$$

– *Il existe $C = C(q_1, q_2, |I|)$, indépendant de ε tel que pour tout $f^\varepsilon \in L^{p'_2}(I, L^{q'_2}(\mathbf{R}^d))$ on ait*

$$\|v^\varepsilon\|_{L^{p_1}(I, L^{q_1}(\mathbf{R}^d))} \leq C\varepsilon^{-1/p_1-1/p_2} \|f^\varepsilon\|_{L^{p'_2}(I, L^{q'_2}(\mathbf{R}^d))}.$$

Remarquons rapidement que le point extrême $(2, 2d/(d-2))$ ($(2, \infty)$ si $d = 2$) est exclu du théorème, car les estimations ne sont pas démontrées pour cette paire dans [50]. Par ailleurs, les estimations sont normalement obtenues avec une fonction *cut-off*; or, comme mentionné dans l'introduction de cette section, l'Hypothèse 2.1.1, et plus particulièrement le point (iii) permet de définir des projecteurs spectraux constants en dehors d'un compact, satisfaisant ainsi la condition nécessaire pour enlever la localisation. Notons aussi que les auteurs de [50] envisagent une situation plus générale où la présence de points de croisement peut affaiblir ces estimations. Etant dans un cas sans croisement, nous obtenons des estimations de Strichartz comme dans le cas scalaire. Enfin, les estimations du théorème qui précède sont écrites pour des paires précises dans [50] et il faut utiliser les arguments usuels (Théorème de Christ-Kiselev, inégalité duale) pour obtenir celles-ci pour n'importe quelle paire admissible, hormis la paire extrême (voir le Chapitre 3, Section 3.7).

2.1.3 Théorème adiabatique et idées de preuve

Cette section est consacrée aux théorèmes adiabatiques et aux idées et outils nécessaires pour prouver ces résultats. Nous analyserons d'abord le problème en temps finis, puis nous donnerons une version des résultats pour des temps longs, qui n'est valable que dans le cas où un contrôle en temps long du profil est prouvé, par exemple, si nous sommes dans le cadre d'application du Théorème 1.2.9.

Théorème 2.1.4 (Théorème adiabatique en temps finis). *Soient $T > 0$ et $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$. Sous l'Hypothèse 2.1.1, on considère ψ^ε , la solution exacte du problème de Cauchy (2.1) - (2.3), et φ^ε , l'approximation donnée par (2.5). On note w^ε la différence $w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x)\chi^+(x)$; alors w^ε satisfait*

$$\sup_{t \in [0, T]} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Certains potentiels nous permettent de déduire des estimations en temps longs pour le profil (voir le Théorème 1.2.9 pour quelques exemples où le comportement en temps longs du profil est connu). On peut alors prouver le théorème suivant :

Théorème 2.1.5 (Théorème adiabatique en temps longs). *Soit $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$. On suppose que pour tout $k \leq 6$,*

$$\exists C > 0, \quad \sup_{|\alpha|+|\beta| \leq k} \|x^\alpha \partial_x^\beta u(t)\|_{L^2} \leq C e^{C|t|}, \quad \forall t \in \mathbf{R}.$$

Alors si $w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x)\chi^+(x)$, on a pour un certain $\tilde{C} > 0$ indépendant de ε

$$\sup_{t \leq \tilde{C} \log \log(\frac{1}{\varepsilon})} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Stratégie de preuves

Pour prouver ces résultats, on adapte les idées de [25] à notre situation. Nous présenterons les estimations préliminaires nécessaires dans le cas où nous avons le contrôle nécessaire sur le profil pour avoir la validité de l'approximation adiabatique jusqu'à des temps d'"Ehrenfest non-linéaire"; les estimations pour le cas des temps finis sont analogues, avec des constantes bornées qui dépendent de T au lieu des bornes exponentielles.

On voit que le reste w^ε satisfait l'équation suivante

$$i\varepsilon \partial_t w^\varepsilon(t, x) + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta w^\varepsilon(t, x) - V(x)w^\varepsilon(t, x) = \varepsilon \widetilde{NL}^\varepsilon(t, x) + \varepsilon \widetilde{L}^\varepsilon(t, x), \quad ; \quad w^\varepsilon(0, x) = 0$$

où

$$\begin{aligned} \widetilde{NL}^\varepsilon &= \kappa \varepsilon^{d/2} (|\psi^\varepsilon|_{\mathbf{C}^2}^2 \psi^\varepsilon - |\varphi^\varepsilon|^2 \varphi^\varepsilon \chi^+), \\ \widetilde{L}^\varepsilon &= \varepsilon^{-1} \mathcal{R}(t, x) \varphi^\varepsilon \chi^+(x) - \frac{\varepsilon}{2} \varphi^\varepsilon \Delta \chi^+ - d\chi^+ \varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon, \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(t, x) &= \lambda^+(x) - \lambda^+(x^+(t)) - \nabla \lambda^+(x^+(t))(x - x^+(t)) \\ &\quad - \frac{1}{2} \langle \text{Hess } \lambda^+(x^+(t)) (x - x^+(t)); (x - x^+(t)) \rangle. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Le but est de montrer que ce terme d'erreur est petit dans un certain espace, or, à l'aide de (2.2) et (2.4), un rapide calcul nous permet de voir

$$\begin{aligned} d\chi^+ \varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon &= d\chi^+(i\xi^+(t)\varphi^\varepsilon + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct})) \\ &= \mathcal{O}(1) + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct}) \text{ dans } L^2(\mathbf{R}^d) \end{aligned}$$

et nous empêche donc de prouver la petitesse de ce terme dans la limite semi-classique. Puisque la "mauvaise" contribution est orthogonale au vecteur propre considéré, on introduit le terme correctif, noté g^ε , solution de l'équation de Schrödinger suivante

$$i\varepsilon \partial_t g^\varepsilon(t, x) + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta g^\varepsilon(t, x) - \lambda_-(x)g^\varepsilon(t, x) = r(t, x)\varphi^\varepsilon(t, x) \quad ; \quad g^\varepsilon(0, x) = 0,$$

avec

$$r(t, x) = -i \langle d\chi^+(x)\xi^+(t), \chi^-(x) \rangle_{\mathbf{C}^2},$$

qui est borné indépendamment du temps, tout comme ses dérivées en temps et espace, grâce au contrôle des vecteurs propres (2.2) et des trajectoires (2.4).

La suite des calculs sera effectuée sur un reste corrigé $\theta^\varepsilon(t, x) = w^\varepsilon(t, x) + \varepsilon g^\varepsilon(t, x)\chi^-(x)$, solution de

$$i\varepsilon\partial_t\theta^\varepsilon(t, x) + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta\theta^\varepsilon(t, x) - V(x)\theta^\varepsilon(t, x) = \varepsilon NL^\varepsilon(t, x) + \varepsilon L^\varepsilon(t, x), \quad \theta^\varepsilon(0, x) = 0,$$

avec

$$NL^\varepsilon = \Lambda\varepsilon^{d/2} (|\varphi^\varepsilon\chi^+ + \theta^\varepsilon - \varepsilon g^\varepsilon\chi^-|_{\mathcal{C}^2}^2(\varphi^\varepsilon\chi^+ + \theta^\varepsilon - \varepsilon g^\varepsilon\chi^-) - |\varphi^\varepsilon|^2\varphi^\varepsilon\chi^+) \\ L^\varepsilon = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct}) + \varepsilon^2 d\chi^-\nabla g^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}g^\varepsilon\Delta\chi^-,$$

où la contribution est dans L^2 . La formule de Duhamel, suivie des estimations de Strichartz du Théorème 2.1.3 et de l'inégalité de Hölder nous donnent, pour θ^ε , sur un intervalle $I = [t, t + \tau]$:

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \varepsilon^{-1/p}\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} \lesssim \varepsilon^{-1/p}\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \varepsilon^{-1/p}\|L^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \varepsilon^{\alpha_c-1-2/p}\|NL^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})} \\ \lesssim \varepsilon^{-1/p}\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \varepsilon^{-1/p}\|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{d/2-2/p} \left(\|\varphi^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 \right. \\ \left. + \|\theta^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 + \varepsilon^2\|g^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 \right) (\|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \varepsilon\|g^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)})$$

$$\text{où } p = \frac{8}{d} \quad ; \quad q = 4 \quad ; \quad \sigma = \frac{8}{4-d} \quad \text{qui vérifient} \quad \frac{1}{p'} = \frac{2}{\sigma} + \frac{1}{p} \quad ; \quad \frac{1}{q'} = \frac{3}{4} = \frac{2}{q} + \frac{1}{q}.$$

Pour prouver les théorèmes adiabatiques, il faut donc d'abord estimer le terme de correction et ses dérivées : afin de traiter la non-linéarité, nous avons besoin de contrôler les normes L^2 et L^4 de $g^\varepsilon(t)$. Pour ce faire, une étude précise des propagateurs $U_\pm^\varepsilon(t) = e^{i\frac{t}{\varepsilon}p_\pm(\varepsilon)}$ associés à

$$p_\pm(\varepsilon) := -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta + \lambda_\pm(x)$$

est nécessaire. En effet, si on note

$$f^\varepsilon = \kappa\varepsilon^{d/2}|\varphi^\varepsilon|^2 r\varphi^\varepsilon + i(\partial_t r)\varphi^\varepsilon + \frac{\varepsilon}{2}[\Delta, r]\varphi^\varepsilon - \varepsilon^{-1}\mathcal{R}r\varphi^\varepsilon$$

où \mathcal{R} est donné par (2.6), on a

$$g^\varepsilon(t) = \frac{1}{i\varepsilon} \int_0^t U_-^\varepsilon(t-s)U_+^\varepsilon(s)\widetilde{\varphi^\varepsilon}(0)ds - \int_0^t \frac{1}{\varepsilon}U_-^\varepsilon(t-\tau) \int_\tau^t U_-^\varepsilon(\tau-s)U_+^\varepsilon(s-\tau)f^\varepsilon(\tau)dsd\tau,$$

où on a écrit $U_-^\varepsilon(t-s) = U_-^\varepsilon(t-\tau)U_-^\varepsilon(\tau-s)$. Il est donc nécessaire de contrôler les termes de ce type. Une borne exponentielle est prouvée :

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall p \in \mathbf{N}, \quad \left\| \frac{1}{i\varepsilon} \int_0^t U_+^\varepsilon(-s)U_-^\varepsilon(s)ds \right\|_{\mathcal{L}(H_\varepsilon^{p+1}, H_\varepsilon^p)} \leq Ce^{Ct}.$$

(Lemme 3.3.1 du Chapitre 3), mais nécessite de contrôler un grand nombre de dérivées pour traiter la non-linéarité (d'où le $k \leq 6$).

La non-linéarité se traite ensuite en utilisant les estimations sur les fonctions connues (φ^ε , obtenues grâce à u , et g^ε), et l'hypothèse de bootstrap suivante qui en découle naturellement

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} \leq \varepsilon^{-d/8}.$$

Il faut ensuite soigneusement compter le nombre d'intervalles de cette taille, contenus dans l'intervalle total.

Pour des temps finis, on arrive à montrer pour tout $t \in [0, T]$

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_1(T)\varepsilon^{1/2} \text{ et } \|\varepsilon\nabla\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_2(T)\varepsilon^{1/2}.$$

L'inégalité de Gagliardo-Nirenberg nous permet alors d'obtenir

$$\begin{aligned}\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{d/4}, \\ &\lesssim \varepsilon^{-d/4+1/2} \lesssim \varepsilon^{-d/8} \varepsilon^{1/2-d/8},\end{aligned}$$

où $1/2 - d/8 > 0$ car $d \leq 3$. On en déduit que l'hypothèse de bootstrap est valide pour des temps finis, et donc, que le Théorème 2.1.4 est valide en utilisant $\theta^\varepsilon = w^\varepsilon + \varepsilon g^\varepsilon \chi^-$ et les estimations sur g^ε .

La preuve en temps longs s'effectue de la même manière mais nécessite de traiter soigneusement toutes les bornes exponentielles qui apparaissent à cause des normes du profil et du terme de correction. On cherche à montrer la validité de l'approximation sur un intervalle du type $[0, T^\varepsilon]$, où T^ε est spécifié à la fin de l'analyse. On émet l'hypothèse de bootstrap suivante, qui prend en compte le comportement en temps longs des fonctions qui apparaissent

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4(\mathbf{R}^d)} \leq \varepsilon^{-d/8} e^{Ct}.$$

On se restreint à des intervalles de taille d'ordre $(c/\log(\varepsilon^{-1}))^C$ pour absorber la non-linéarité et il est nécessaire de vérifier que le nombre d'intervalles de cette taille dans notre intervalle "total" ne pose pas problème et est compensé. Une fois ces difficultés réglées, on obtient des estimations sur le reste

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2-\delta_0} \text{ et } \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2-3\delta_0}, \text{ pour un certain } 0 < \delta_0 < 1/6,$$

qui nous permettent, via l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg de vérifier la validité de l'hypothèse de bootstrap pour des temps $t \leq c \log \log(\varepsilon^{-1})$.

Les détails des calculs sont donnés dans la Section 3.3.

Etats cohérents perturbés

Dans le cas où la donnée est de la forme

$$\psi^\varepsilon(0, x) = r^\varepsilon(x) + \varepsilon^{-1/4} a \left(\frac{x - x_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i}{\varepsilon} \xi_0 \cdot (x - x_0)} \chi^+(t, x),$$

il est possible de la propager sous certaines conditions sur la taille du terme perturbatif r^ε . On suppose

$$\|r^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} + \|\varepsilon \nabla r^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} \leq C \varepsilon^{\gamma_0},$$

où $\gamma_0 > 0$. Les conditions plus restrictives sur γ_0 sont données en imitant la preuve des Théorèmes 2.1.4 et 2.1.5 : on obtient pour des temps finis

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0,t], L^2)} \leq C(T) \left(\varepsilon^{1/2} + \varepsilon^{\gamma_0} \right) \text{ et } \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C(T) \left(\varepsilon^{1/2} + \varepsilon^{\gamma_0} \right)$$

et l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg donne

$$\begin{aligned}\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^q} &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{d/4} \\ &\lesssim \varepsilon^{-d/8} \varepsilon^{1/2-d/8} + \varepsilon^{\gamma_0-d/8},\end{aligned}$$

avec $1/2 - d/8 > 0$ car $d \leq 3$ et où $\gamma_0 > d/8$ est nécessaire pour obtenir la validité de l'hypothèse de bootstrap. La preuve pour des temps longs est similaire et détaillée dans la Section 3.3 du Chapitre 3.

2.1.4 Superposition non-linéaire en temps fini

Tout comme dans le cas scalaire et le cas unidimensionnel, on s'intéresse à l'évolution de solutions associées à des données qui sont une superposition de deux paquets d'onde. Deux cas de figures sont alors possibles : soit les deux paquets d'ondes sont colinéaires au même vecteur propre, soit chacun vit dans

un espace propre différent. La séparation de ces deux cas dans la présentation des résultats et l'analyse est due à une différence technique dans les hypothèses. Nous ne verrons qu'une étude en temps fini du problème, l'argument pour des temps longs utilisé dans [26], [25] n'étant pas valable dans notre cas. Nous fixons donc un temps $T > 0$ pour la suite.

Dans le premier cas, on regarde une donnée de la forme

$$\psi_0^\varepsilon(x) = \varphi_+^\varepsilon(0, x)\chi^+(x) + \varphi_-^\varepsilon(0, x)\chi^-(x),$$

où les φ_+^ε et φ_-^ε sont respectivement associées aux modes $+$ et $-$ et ont une forme similaire à (2.5), et (x_0^+, ξ_0^+) , (x_0^-, ξ_0^-) sont des points donnés dans l'espace des phases. On associe à ces derniers des trajectoires et actions classiques construits avec les valeurs propres correspondantes. On émet l'hypothèse suivante sur les quantités classiques

$$\Gamma = \inf_{s \in \mathbf{R}} |E_+ - E_- - (\lambda_+(x^+(s)) - \lambda_-(x^-(s)))| > 0.$$

Alors, si

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi_+^\varepsilon(t, x)\chi^+(x) - \varphi_-^\varepsilon(t, x)\chi^-(x),$$

il est possible de prouver que

$$\sup_{t \in [0, T]} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Ce résultat constitue le Théorème 3.1.13 du Chapitre 3.

Lorsque l'on choisit de superposer deux états cohérents sur le même mode, on regarde la propagation de données du type

$$\psi_0^\varepsilon(x) = (\varphi_1^\varepsilon(0, x) + \varphi_2^\varepsilon(0, x)) \chi_j(x), \quad j \in \{\pm\}$$

où φ_1^ε et φ_2^ε ont la forme (2.5), et $(x_1^j(0), \xi_1^j(0))$, $(x_2^j(0), \xi_2^j(0))$ sont des points donnés de l'espace des phases tels que

$$(x_1^j(0), \xi_1^j(0)) \neq (x_2^j(0), \xi_2^j(0)).$$

Si cette dernière hypothèse n'est pas vérifiée, on se place en fait dans le cadre des Théorèmes 2.1.4, 2.1.5

$$\varphi^\varepsilon(0, x) = \varphi_1^\varepsilon(0, x) + \varphi_2^\varepsilon(0, x).$$

On note $(x_1^j(t), \xi_1^j(t))$, $(x_2^j(t), \xi_2^j(t))$, et $S_1^j(t)$, $S_2^j(t)$, les quantités classiques associées à $\lambda_j(x)$. Alors, si

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - (\varphi_1^\varepsilon(t, x) + \varphi_2^\varepsilon(t, x)) \chi_j(x)$$

on a

$$\sup_{t \in [0, T]} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0;$$

c'est le Théorème 3.1.14 du Chapitre 3.

Pour montrer ces deux théorèmes, l'idée, issue de [26], est de décomposer le terme non-linéaire en deux parties : une qui sera traitée comme dans la preuve des Théorèmes 2.1.4 et 2.1.5, qui sera notée N_S^ε et une autre qui représente l'interaction entre les deux paquets d'ondes, notée N_I^ε . Les calculs usuels sur le reste w^ε nous permettent d'obtenir

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \|w^\varepsilon(0)\|_{L^2} + \int_0^t \|L^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds + \int_0^t \|N_I^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds + \|N_S^\varepsilon\|_{L^{p'}([0, t], L^{q'})}.$$

C'est l'estimation du terme N_I^ε qui nécessite un travail supplémentaire, afin d'obtenir le lemme suivant

Lemme 2.1.6. Soient $T > 0$, $0 < \gamma < 1/2$ et

$$I^\varepsilon(T) = \{t \in [0, T], |x^+(t) - x^-(t)| \leq \varepsilon^\gamma\}.$$

Alors, pour tout entier k qui vérifie $k > d/2$, il existe $C = C(k)$ tel que

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^T \|N_I^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} dt \leq C(M_{k+2}(T))^3 \left(T\varepsilon^{k(1/2-\gamma)} + |I^\varepsilon(T)| \right),$$

où $M_k(T) = \max(M_k^+(T), M_k^-(T))$, avec

$$M_k^\pm(T) = \sup \left\{ \|\langle x \rangle^\alpha \partial_x^\beta u_\pm\|_{(L^\infty[0, T]; L^2(\mathbf{R}^d))}; \quad |\alpha| + |\beta| \leq k \right\}.$$

Le traitement du terme $|I^\varepsilon(T)|$ nécessite des hypothèses sur les trajectoires et leurs énergies, pour montrer que ce terme tend vers zéro dans la limite semi-classique; cette preuve est présentée dans le Chapitre 3, Section 3.6.

2.1.5 Résultat annexe 1 : Amélioration du cas unidimensionnel pour des potentiels de type longue portée

Dans le cas unidimensionnel étudié dans [25], les potentiels considérés sont plus généraux que ceux que nous regardons et qui vérifient l'Hypothèse 2.1.1 : ils sont au plus quadratiques. Le fait que la non-linéarité soit L^2 -sous-critique permet de se passer des estimations de Strichartz - qui ne sont pas disponibles pour ce type de potentiels - et de traiter le problème avec des inégalités standard. L'approximation adiabatique usuelle est alors valide jusqu'à des temps $|t| \leq c \log \log(\varepsilon^{-1})$:

Théorème 2.1.7 (de [25]). Soient $d = 1$ et $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$. On considère ψ^ε la solution du problème au Cauchy (2.1)-(2.3), avec V qui satisfait l'Hypothèse 1.2.1. On note w^ε la différence suivante :

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x)\chi^+(x).$$

Alors, il existe $C > 0$ indépendant de ε tel que,

$$\sup_{|t| \leq C \log \log(\frac{1}{\varepsilon})} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|xw^\varepsilon(t)\|_{L^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Cependant, l'utilisation des potentiels longue portée, qui vérifient les Hypothèses 2.1.1, permet d'améliorer le temps de validité de l'approximation pour $d = 1$, puisque celle-ci est alors valide pour $|t| \leq c \log(\varepsilon^{-1})$:

Théorème 2.1.8. Soient $d = 1$ et $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$. On considère ψ^ε la solution au problème de Cauchy (2.1)-(2.3), avec V qui satisfait l'Hypothèse 2.1.1. On note w^ε la différence suivante :

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x)\chi^+(x).$$

Alors, il existe $C > 0$ indépendant de ε tel que,

$$\sup_{|t| \leq C \log(\frac{1}{\varepsilon})} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

2.1.6 Résultat annexe 2 : Décroissance de la Hessienne et bornes en temps longs pour les dérivées et moments du profil

Dans cette section, on rajoute un cas au Théorème 1.2.9, où le comportement du profil en temps long est démontré :

Proposition 2.1.9. *Soit $d = 2$ or 3 . On suppose $\kappa \geq 0$ et*

$$|Q^+(t)| + (1 + |t|) \left| \frac{d}{dt} Q^+(t) \right| \leq \frac{C}{(1 + |t|)^{\kappa_0}}, \quad (2.7)$$

avec $C > 0$, $\kappa_0 > 2$. On considère u , la solution au problème de Cauchy (3.7). Alors, pour tout $k \in \mathbf{N}$, la proposition suivante est vérifiée : il existe $C > 0$ tel que pour toute paire admissible (p, q) , on ait

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, |\alpha| + |\beta| \leq k, \quad \|x^\alpha \partial_x^\beta u\|_{L^p([0,t], L^q)} \leq C e^{C|t|}, \quad \forall t \in \mathbf{R}.$$

Notons d'abord que des potentiels Q qui vérifient l'hypothèse de décroissance énoncée existent. En effet, si on considère un potentiel V qui satisfait l'Hypothèse 2.1.1, et que l'on note E_0 l'énergie associée aux trajectoires sur le mode $+$ que l'on étudie, on peut définir l'objet λ_∞ , comme étant

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \lambda_+(x) = \lambda_\infty.$$

Si E_0 est choisi tel que $E_0 > \lambda_\infty$, et que la trajectoire soit *non-captée*, c'est-à-dire :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |x^+(t)| = +\infty,$$

alors $Q^+(t)$ satisfait la propriété de décroissance (2.7).

On remarque aussi que l'hypothèse de non-captance implique que $E_0 \geq \lambda_\infty$, de sorte que l'hypothèse $E_0 > \lambda_\infty$ requise n'est pas si forte en présence de trajectoires non-captées.

Ainsi, en reprenant le potentiel donné en exemple, à savoir

$$V(x) = \begin{pmatrix} \cos \theta(x) & \sin \theta(x) \\ \sin \theta(x) & -\cos \theta(x) \end{pmatrix},$$

on voit aisément que $Q^+(t) = 0$, pour $|t|$ assez grand et donc que la proposition précédente est satisfaite.

Pour prouver cette proposition, nous procédons par récurrence et nous supposons d'abord que

$$\sup_{t \in \mathbf{R}} |Q^+(t)| < +\infty,$$

ainsi, les estimations de Strichartz pour potentiels au plus quadratiques, données par le Théorème 1.2.3 sont valides ici.

On peut alors travailler avec des arguments de type "énergie". On définit l'Energie et le Viriel de façon suivante

$$E(t) = \frac{1}{2} \|\nabla u(t)\|_{L^2}^2 + \frac{\Lambda}{4} \|u(t)\|_{L^4}^4 + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^d} \langle Q^+(t)x, x \rangle |u(t, x)|^2 dx,$$

$$V(t) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^d} |x|^2 |u(t, x)|^2 dx,$$

que l'on dérive afin de montrer les estimations suivantes à l'aide d'inégalités différentielles sur ces quantités :

$$\|\nabla u(t)\|_{L^2} \leq C_1, \quad \|xu(t)\|_{L^2} \leq C_2(1 + |t|)^{\gamma+1},$$

et donc

$$\|\nabla u\|_{L^p([0,t], L^q)} + \|xu\|_{L^p([0,t], L^q)} \lesssim (1 + |t|)^{\gamma+2},$$

qui constituent la première étape de la preuve par récurrence. Le reste de la preuve est déduite en utilisant les estimations de Strichartz et les inégalités usuelles pour traiter la non-linéarité sur des intervalles de temps assez petits, dans l'esprit de [22].

2.2 Partie II : Propagation d'états cohérents à travers un croisement évité

Dans cette section, nous présentons des résultats prouvés dans [70], qui constitue la deuxième partie du travail de thèse présenté dans ce manuscrit, et qui traite une version non-linéaire du cas étudié dans [61] : il s'agit ici d'une situation où le potentiel présente un croisement évité en un point (dont la définition est donnée par 1.1.1), et où l'on s'attend à ce que l'approximation adiabatique ne soit plus valide et à voir apparaître des transitions entre les niveaux d'énergie. La non-linéarité choisie est critique d'un point de vue semi-classique : on choisit $\alpha = \alpha_c$ qui est l'exposant pour lequel les effets non-linéaires se traduisent principalement sur l'équation d'enveloppe dans le cas sans croisement. La question est de savoir si la non-linéarité choisie critique dans un régime adiabatique aura une incidence sur ces éventuelles transitions.

Nous verrons d'abord que, loin du croisement, dans la région dite, adiabatique, la fonction d'onde peut être approchée, à l'ordre dominant, par un état cohérent au profil non-linéaire, comme dans le cas sans croisement étudié dans [25],[69]. Ensuite, dans une zone proche du point de croisement, l'étude nous montrera que des transitions non-adiabatiques ont lieu, et peuvent être données par la formule de Landau-Zener linéaire. Ainsi, à l'ordre dominant, la non-linéarité qui est critique loin du croisement devient négligeable lorsque l'on se rapproche suffisamment de celui-ci et n'influence pas le phénomène de transition.

Les détails des preuves sont données dans le Chapitre 4.

2.2.1 Présentation du problème

Le système d'équations de Schrödinger couplées que l'on étudie est le suivant :

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2\psi^\varepsilon - \begin{pmatrix} x & \delta \\ \delta & -x \end{pmatrix}\psi^\varepsilon = \kappa\varepsilon^{3/2}|\psi^\varepsilon|^2\psi^\varepsilon; \\ \psi^\varepsilon(-T, \cdot) \in \mathcal{S}(\mathbf{R}), \end{cases} \quad (2.8)$$

où $\kappa \in \mathbf{R}$, et où l'exposant devant la non-linéarité est critique. Un croisement évité se produit en $x = 0$: en effet, les valeurs propres $\lambda_\delta^\pm = \pm\sqrt{x^2 + \delta^2}$ sont égales pour $(x, \delta) = (0, 0)$. Les vecteurs propres notés $\chi_\delta^\pm = {}^t(\Theta_1^\pm(x), \Theta_2^\pm(x))$ sont donnés par

$$\begin{cases} \Theta_1^+(x) = -\Theta_2^-(x) = \frac{\delta}{(2\sqrt{x^2 + \delta^2}(\sqrt{x^2 + \delta^2} - x))^{1/2}}, \\ \Theta_2^+(x) = \Theta_1^-(x) = \frac{\sqrt{x^2 + \delta^2} - x}{(2\sqrt{x^2 + \delta^2}(\sqrt{x^2 + \delta^2} - x))^{1/2}}. \end{cases}$$

Puisque $\delta > 0$, les vecteurs propres sont \mathcal{C}^∞ et on déduit les estimations suivantes sur leurs dérivées

$$|\partial_x^\alpha \chi_\delta^\pm(x)| \lesssim \delta^{-\alpha}, \quad \forall \alpha \in \mathbf{N}.$$

Il est cependant possible d'écrire les coordonnées sous forme trigonométrique et d'affiner ces estimations pour les dérivées dont nous aurons besoin:

$$|\partial_x \chi_\delta^\pm(x)| \lesssim \frac{1}{\delta} \frac{1}{\left(\frac{x}{\delta}\right)^2 + 1} \quad ; \quad |\partial_x^2 \chi_\delta^\pm(x)| \lesssim \frac{1}{\delta^2} \frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\delta}\right)^2 + 1\right)^{3/2}}. \quad (2.9)$$

On rappelle que les quantités classiques définies dans l'introduction sont données par :

Trajectoires classiques.

Soient $(x^\pm(t), \xi^\pm(t))$ les solutions du système suivant :

$$\begin{cases} \dot{x}^\pm(t) = \xi^\pm(t) \\ \dot{\xi}^\pm(t) = -\partial_x \lambda_\delta^\pm(x^\pm(t)) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} x^\pm(0) = x_0^\pm \\ \xi^\pm(0) = \xi_0^\pm \end{cases}$$

Remarque 2.2.1. On remarque premièrement que ces solutions sont uniques, globales et régulières à $\delta > 0$ fixé, et donc dépendantes du paramètre adiabatique, mais un contrôle uniforme en δ utilisant [26] est prouvé : pour tout $T > 0$,

$$\exists C > 0, \exists \delta_0 > 0, \forall t \in [-T, 0], \forall \delta \in]0, \delta_0], |\xi^\pm(t)| + |x^\pm(t)| \leq C.$$

Par souci de simplicité d'écriture, nous n'indiquerons pas la dépendance en δ des trajectoires classiques. Par ailleurs, ces trajectoires admettent une limite, bien définie (voir par exemple [46]) lorsque δ tend vers zéro :

$$\begin{cases} \dot{x}^\pm(t) = \xi^\pm(t) \\ \dot{\xi}^\pm(t) = \frac{\mp x^\pm(t)}{|x^\pm(t)|}, \end{cases}$$

celles-ci ne seront, cependant, pas utilisées dans l'étude du problème.

Action classique.

On rappelle que l'action classique usuelle est définie par

$$S^\pm(t) = \int_0^t \frac{|\xi^\pm(s)|^2}{2} - \lambda_\delta^\pm(x^\pm(s)) ds.$$

Choix du temps de démarrage et choix de la donnée.

La donnée sera construite avec les quantités classiques associées à la valeur propre $\lambda_\delta^+(x)$, avec pour valeurs initiales $x_0 = 0$ et $\xi_0 > 0$, au temps $t = 0$, choisi comme étant le temps pour lequel la distance minimale entre les valeurs propres est atteinte au point $x = 0$.

On choisit un temps T fixé indépendamment de ε et δ tel que pour $t \in [-T, 0]$, $x^+(t)$ soit croissante jusqu'à atteindre zéro au temps $t = 0$. Il est utile de faire cette restriction sur le temps de démarrage de la propagation pour n'étudier qu'un seul passage du paquet d'onde par le croisement. En effet, $x^+(t)$ n'étant pas monotone, le paquet d'onde peut traverser plusieurs fois la zone de croisement sur un intervalle de temps assez grand.

On définit alors $\psi^\varepsilon(-T, x)$ comme étant un paquet d'onde localisé dans l'espace des phases autour du point $(x^+(-T), \xi^+(-T))$ et vivant dans l'espace propre "+", de la façon suivante :

$$\psi^\varepsilon(-T, x) = \varepsilon^{-1/4} a \left(\frac{x - x^+(-T)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{i \frac{S^+(-T)}{\varepsilon} + i \frac{\xi^+(-T) \cdot (x - x^+(-T))}{\varepsilon}} \chi_\delta^+(x), \quad (2.10)$$

où a est une fonction dans $\mathcal{S}(\mathbf{R})$.

2.2.2 Approximations et résultat principal

L'idée, inspirée par la démarche de [61], est la suivante :

Loin du point de croisement, on prétend que la fonction d'onde reste, à l'ordre dominant, de la même forme - un état cohérent construit avec un profil non-linéaire comme dans le cas adiabatique - et dans le même espace propre. Le point important est de savoir jusqu'où on peut aller avec une approximation de ce type, c'est-à-dire, jusqu'à quel temps, proche du temps auquel le croisement a lieu, on peut approcher la solution exacte avec l'approximation adiabatique usuelle. On divise donc l'analyse de la propagation selon trois "régions" d'étude avec des échelles différentes, échelles parfois qualifiées de "macroscopique" ou "slow" (pour laquelle on utilisera la variable t) et "microscopique" ou "fast" (pour laquelle on utilisera s avec $s = t/\sqrt{\varepsilon}$).

1. La région que l'on appellera "région adiabatique", où $x^+(t) \ll 0$, qui part de $-T$ jusqu'à un temps maximal de validité de cette approximation, temps noté $-t^\varepsilon$,
2. La zone de croisement de $-t^\varepsilon$ à t^ε où la transition sera visible, transition qui, nous le verrons, sera linéaire,
3. L'intervalle de temps après le croisement $[t^\varepsilon, T]$. On ne discutera pas de cette région de temps dans cette section, mais elle apparaîtra dans la Section 2.3.

Le but est de construire une approximation dans chaque région, de montrer qu'elles sont valides dans la limite semi-classique, et, en les étudiant, d'en tirer des informations sur la fonction d'onde elle-même.

Approximation dans la région adiabatique

On considère la fonction $u_\delta = u_\delta(t, y)$, solution de l'équation suivante

$$i\partial_t u_\delta + \frac{1}{2}\partial_y^2 u_\delta - \frac{1}{2}\lambda_\delta^{+(2)}(x^+(t))y^2 u_\delta = \kappa|u_\delta|^2 u_\delta \quad ; \quad u_\delta(-T, y) = a(y), \quad (2.11)$$

où $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$, et $\lambda_\delta^{+(2)}(x) = \delta^2 (x^2 + \delta^2)^{-3/2}$.

Approximation dans la zone de croisement

On introduit la fonction à valeurs vectorielles solution de l'équation suivante, et que l'on note f

$$i\partial_s f - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} f = 0; \quad (2.12)$$

avec la donnée suivante

$$f(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) = u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \quad (2.13)$$

où $s, y \in \mathbf{R}$, $\gamma \in]0, 1/6[$, et $\phi^\varepsilon(y)$ est une phase réelle qui ne sera pas explicitée dans l'immédiat.

On a alors le théorème suivant :

Théorème 2.2.2. *Soit $\psi^\varepsilon(t, x)$ la solution exacte du problème de Cauchy (2.8)-(2.10), et $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$, où $c > 0$. Alors, si $c_0 > 0$ est indépendant du paramètre ε , et si $\gamma \in]0, 1/6[$:*

- (1) Pour $-T \leq t \leq -c_0\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma}$, dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ on a

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} u_\delta \left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{iS^+(t)}{\varepsilon} + \frac{i\xi^+(t) \cdot (x - x^+(t))}{\varepsilon}} \chi_\delta^+(x) + \mathcal{O}(\varepsilon^\gamma), \text{ dans } L^2(\mathbf{R}),$$

où u_δ est le profil solution de l'équation d'enveloppe (2.11).

- (2) Pour $-c_0\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma} \leq t \leq c_0\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma}$, dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ on a

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} f \left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i\xi_0^2 t}{2\varepsilon} + \frac{i\xi_0 \cdot (x - t\xi_0)}{\varepsilon}} + \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma/2}), \text{ dans } L^2(\mathbf{R})$$

où f est la solution de (2.12) - (2.13).

Remarquons que pour chacune de ces approximations, la présence du terme non-linéaire à traiter nous force en réalité à estimer le reste dans un espace fonctionnel de type Sobolev à poids $H_\varepsilon^1(\mathbf{R})$.

Il est important de noter que la fonction f exhibe des transitions, c'est-à-dire qu'une fois "rescalée", et sous les bonnes variables, au temps de sortie de la zone de croisement, chacune de ses composantes sur chaque mode est non-négligeable dans la limite semi-classique. Notons deux informations sur les effets de non-linéarité :

1. Dans la région adiabatique, la non-linéarité se fait sentir de la même manière que dans le cas sans croisement, c'est-à-dire, en affectant l'équation du profil uniquement (la question de validité pour des temps longs n'a pas lieu d'être ici étant donné que nous travaillons sur des intervalles de temps finis).
2. L'approximation f est linéaire et analogue à celle introduite dans [61]. Le phénomène de transition n'est donc pas touché par la non-linéarité pour cet exposant critique α_c . On s'attend donc à avoir le même coefficient de transition entre les modes.

On en déduit le résultat suivant

Corollaire 2.2.3 (Transition entre les modes). *Soit*

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \psi_+^\varepsilon(t, x)\chi_\delta^+(x) + \psi_-^\varepsilon(t, x)\chi_\delta^-(x)$$

la solution de (2.8) - (2.10), et $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$ où $c > 0$. On considère $c_0 > 0$, $\gamma \in]0, 1/6[$, et $t^\varepsilon = c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}$. Lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \forall t \in [-T, -t^\varepsilon], \quad \|\psi_+^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 &= \|a\|_{L^2}^2 + o(1) \\ \|\psi_-^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 &= o(1). \end{aligned}$$

et pour $p = e^{-\frac{\pi c^2}{\xi_0}}$, le coefficient de transition de Landau-Zener

$$\begin{aligned} \|\psi_+^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 &= (1-p)\|a\|_{L^2}^2 + o(1) \\ \|\psi_-^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 &= p\|a\|_{L^2}^2 + o(1). \end{aligned}$$

Notons que p est le même que dans le cas linéaire étudié dans [61].

Il faut dans un premier temps bien étudier chacun de ces profils - existence, contrôle des dérivées et/ou moments indépendant des paramètres adiabatiques et semi-classiques - et ensuite, prouver leurs validités, sachant que la présence de la non-linéarité induit des difficultés. Et, puisqu'il y a différentes approximations, il est nécessaire de vérifier qu'au temps "frontière" $-t^\varepsilon$, celles-ci soient proches dans la limite semi-classique.

2.2.3 Contrôle du profil et validité de l'approximation dans la région adiabatique

Le but de cette sous-section est de présenter les résultats liés à la région adiabatique et à l'approximation donnée par le point (1) du Théorème 2.2.2. On écrit

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varepsilon^{-1/4}u_\delta \left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{iS^+(t)}{\varepsilon} + \frac{i\xi^+(t) \cdot (x - x^+(t))}{\varepsilon}} \chi_\delta^+(x), \quad (2.14)$$

et on cherche à estimer ce terme dans $L^2(\mathbf{R})$. L'équation vérifiée par w^ε laisse apparaître des termes de nature linéaire, que l'on notera L^ε (déjà présents dans le cas étudié par les auteurs de [61]) et des termes, notés NL^ε issus de la non-linéarité, qui seront explicités plus tard.

On divise cette sous-section en deux étapes : d'abord l'étude du profil u_δ et notamment de ses dérivées et moments, ensuite le traitement des termes linéaires, qui sont présents en estimant les pertes en δ , ε et le terme non-linéaire.

Etude du profil

On s'attelle d'abord à l'étude du profil u_δ , pour lequel, l'existence globale à δ fixé est donnée par le Théorème 1.2.8, notamment par le point traitant le cas L^2 -sous-critique, issu de [22]. Comme on le voit dans les travaux précédents, qui concernent le cas non-linéaire - à savoir [26], [25] et [69] - lorsque l'on souhaite estimer le terme d'erreur entre ψ^ε et l'approximation, les termes sources à traiter contiennent des dérivées et moments du profil. Il est donc nécessaire de connaître ces quantités. Lorsque le profil ne dépend pas des petits paramètres δ, ε , ce contrôle est connu, notamment dans le cas unidimensionnel où nous nous plaçons, par le Théorème 1.2.9. Etant dans le cas d'un intervalle de temps fini, il est facile d'en déduire

Proposition 2.2.4 (Contrôle du profil loin de $t = 0$). *Pour tout $T_0 \in]0, T[$, il existe $C > 0$, tel que*

$$\forall t \in [-T, -T_0], \forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}, \alpha + \beta \leq k, \quad \|y^\alpha \partial_y^\beta u_\delta(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} \leq C.$$

Pour le prouver, il suffit de voir que

$$\left| \lambda^{+(2)}(x(t)) \right| = \frac{\delta^2}{(x^+(t)^2 + \delta^2)^{3/2}} \leq \frac{C\delta^2}{\left| \inf_{[-T, -T_0]} x^+(t) \right|^3} \leq \tilde{C}\delta^2,$$

pour $t \in [-T, -T_0]$, car $|x^+(t)|$ est borné inférieurement par une constante positive qui est indépendante de ε lorsque l'on se place loin de $t = 0$ (on rappelle que T est choisi pour que la trajectoire, de signe négatif, soit croissante sur $[-T, 0]$). Il suffit alors d'utiliser le deuxième point du Théorème 1.2.9 donné par [22] pour obtenir une borne indépendante de δ et ε .

Etant donné que l'on souhaite se rapprocher du point de croisement, il est en fait nécessaire de connaître le comportement du profil sur l'intervalle $[-T, 0]$, pour lequel l'argument précédent n'est plus valable. La difficulté réside dans le fait que le profil est dépendant de δ et donc l'obtention d'une borne indépendante de ce paramètre n'est pas une tâche aisée. En effet, cela nécessiterait, par exemple, l'utilisation d'estimations de Strichartz que nous n'avons pas pour notre potentiel $\delta^2 (x(t)^2 + \delta^2)^{-3/2} y^2$ et qui dépend du paramètre semi-classique à cause de δ .

Pour ce faire, la stratégie est d'éliminer celui-ci en utilisant la *Transformée de lentille*, présentée dans [22], qui permet de passer de u_δ à une fonction v solution d'une équation de Schrödinger libre sur un intervalle de temps donné. Pour donner une idée simple mais non rigoureuse dans un premier temps, il s'agit de passer d'une fonction v solution d'une équation du type

$$i\partial_s v + \frac{1}{2}\partial_x^2 v = \mathcal{H}_\delta(s)|v|^2 v \quad ; \quad v(0, x) = u_\delta(-T_0, x),$$

pour un certain T_0 , à u_δ , solution de

$$i\partial_t u + \frac{1}{2}\partial_x^2 u - \frac{1}{2}\lambda_\delta^{(2)}(x(t))x^2 u = \kappa|u|^2 u \quad ; \quad u(-T, x) = a(x), \quad t \in [0, T_0]$$

où u_δ est construite de la façon suivante

$$u_\delta(t - T_0, x) = \frac{1}{\sqrt{\nu_\delta u(t)}} v \left(\frac{\mu_\delta(t)}{\nu_\delta(t)}, \frac{x}{\nu_\delta(t)} \right) e^{\frac{i\nu_\delta(t)}{\nu_\delta(t)} \cdot \frac{x^2}{2}}, \quad \forall t \in [-T, 0],$$

et où \mathcal{H}_δ est une nouvelle non-linéarité construite à partir de celle présente dans (2.11) et où les quantités $\mu_\delta, \nu_\delta, \mathcal{H}_\delta$ dépendent du potentiel $\delta^2 (x(t)^2 + \delta^2)^{-3/2} y^2$.

Le lien entre les dérivées et moments d'ordre k de u_δ et v est donné par

$$\begin{aligned} \|x^k u_\delta(t - T_0)\|_{L^2}^2 &= \nu(t)^{2k} \left\| y^k v \left(\frac{\mu(t)}{\nu(t)} \right) \right\|_{L^2}^2 \leq C \\ \|\partial_x^k u_\delta(t - T_0)\|_{L^2}^2 &\leq \int \frac{1}{\nu(t)} \sum_{\alpha \leq k} \left| \nu(t)^{-\alpha} \partial_y^\alpha v \left(\frac{\mu(t)}{\nu(t)} \right) \right|^2 \times \left(\partial_y^{k-\alpha} e^{\frac{i\nu(t)}{\nu(t)} \cdot \frac{x^2}{2}} \right)^2 dx \end{aligned}$$

Deux problèmes se posent alors :

- Puisque μ_δ , ν_δ et $\dot{\nu}_\delta$ vont entrer en jeu dans le contrôle de v et donc de u_δ , il est nécessaire de bien les connaître. Or une dépendance en δ , due au potentiel, est présente et donc, une perte est possible quand on estime les dérivées et moments.
- Il faudra trouver un contrôle de v solution d'une équation sans profil, mais, toujours non-linéaire, cette non-linéarité pouvant dépendre de δ .

On introduit d'abord les fonctions μ_δ et ν_δ , solutions de

$$\begin{cases} \ddot{\mu}_\delta + \lambda_\delta^{+(2)}(x(t))\mu_\delta = 0; & \mu_\delta(0) = 0; & \dot{\mu}_\delta(0) = 1, \\ \ddot{\nu}_\delta + \lambda_\delta^{+(2)}(x(t))\nu_\delta = 0; & \nu_\delta(0) = 1; & \dot{\nu}_\delta(0) = 0. \end{cases} \quad (2.15)$$

A $\delta > 0$ fixé, il existe un unique couple de solutions (μ_δ, ν_δ) qui satisfait (2.15) sur un certain intervalle $[0, T_\delta[$ qui est le temps maximal d'existence.

Afin de contrôler les quantités μ_δ , ν_δ et $\dot{\nu}_\delta$, on écrit grâce à (2.15) pour un certain $T_0 > 0$

$$\begin{pmatrix} \nu_\delta(t) \\ \dot{\nu}_\delta(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \int_0^t \begin{pmatrix} \dot{\nu}_\delta(s) \\ -\lambda_\delta^{+(2)}(x(s))\nu_\delta(s) \end{pmatrix} ds,$$

et donc

$$\begin{aligned} \left| \int_0^t \dot{\nu}_\delta(s) ds \right| &\leq |\dot{\nu}_\delta|_\infty |t|, \\ \left| \int_0^t -\lambda_\delta^{+(2)}(x(s))\nu_\delta(s) ds \right| &\leq |\nu_\delta|_\infty \int_0^{T_0} |\lambda_\delta^{+(2)}(x(s))| ds, \end{aligned}$$

où $|A|_\infty = \sup_{s \in [0, T_0]} |A(s)|$. On voit donc aisément que pour trouver un contrôle des μ_δ, ν_δ , il est nécessaire de majorer

$$\int_0^{T_0} |\lambda_\delta^{+(2)}(x(s))| ds,$$

quantité explicite qui est facile à manipuler et qui donne le lemme suivant, issu de [61] :

Lemme 2.2.5 (Proposition 2.2 de [61]). *Soit $T > 0$. Alors il existe $\sigma > 0$, tel que*

$$\exists \delta_0 > 0, \forall \delta \in]0, \delta_0], \int_0^t |\lambda_\delta^{(2)}(x(s))| ds \leq \sigma(1 + T), \quad \forall 0 < t \leq T.$$

On montre alors un contrôle uniforme en δ des termes μ_δ , ν_δ et $\dot{\nu}_\delta$:

Proposition 2.2.6. *Soient μ_δ, ν_δ les solutions de (2.15). Il existe $T_0 > 0$ tel que $T_0 < T_\delta$, indépendamment de δ , et $C > 0$ tels que*

$$\forall \delta \in]0, \delta_0], \forall t \in [0, T_0], |\mu_\delta(t)| + |\nu_\delta(t)| + |\dot{\nu}_\delta(t)| + \left| \frac{1}{\nu_\delta(t)} \right| \leq C.$$

De plus, $t \mapsto \frac{\mu_\delta(t)}{\nu_\delta(t)}$ est une fonction croissante sur $[0, T_0]$.

Ceci nous permet d'introduire proprement la Transformée de lentille, et donc, la fonction "libre" v :

Proposition 2.2.7 (De [22]). *Soient $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$ and $T_0 > 0$, μ_δ, ν_δ donnés par (2.15) tels que la Proposition 2.2.6 soit vérifiée. On définit*

$$s = \frac{\mu_\delta(t)}{\nu_\delta(t)}, \quad t \in [0, T_0],$$

et

$$\mathcal{H}_\delta(s) = \nu \left(\left(\frac{\mu_\delta}{\nu_\delta} \right)^{-1} (s) \right) \kappa, \quad s \in \left[0, \frac{\mu_\delta(T_0)}{\nu_\delta(T_0)} \right].$$

Soient v la solution de :

$$i\partial_s v + \frac{1}{2}\partial_x^2 v = \mathcal{H}_\delta(s)|v|^2 v \quad ; \quad v(0, x) = u_\delta(-T_0, x), \quad (2.16)$$

et

$$u_\delta(t - T_0, x) = \frac{1}{\sqrt{\nu_\delta(t)}} v\left(\frac{\mu_\delta(t)}{\nu_\delta(t)}, \frac{x}{\nu_\delta(t)}\right) e^{\frac{i\nu_\delta(t)}{\nu_\delta(t)} \cdot \frac{x^2}{2}}, \quad \forall t \in [0, T_0].$$

Alors u_δ est la solution de (2.11) :

$$i\partial_t u + \frac{1}{2}\partial_x^2 u - \frac{1}{2}\lambda_\delta^{(2)}(x(t))x^2 u = \kappa|u|^2 u \quad ; \quad u(-T, x) = a(x).$$

Remarque 2.2.8. Plusieurs remarques sont à faire :

- L'énoncé original de [22] est donné dans un cadre plus général : Il n'y a pas de restriction sur la dimension, du moment que l'exposant σ de la non-linéarité vérifie $\sigma < 2/(d-2)$ si $d \geq 3$. Notons aussi que des non-linéarités plus générales, avec un coefficient qui dépend du temps pour u dans la proposition précédente, sont permises, sous certaines conditions qui ne seront pas détaillées ici (voir [22] pour plus de détails).

Par ailleurs, la transformée est valable pour des potentiels de la forme $\langle \Omega(t)x|x \rangle$, avec $\Omega \in \mathcal{C}(\mathbf{R}, \mathbf{R})$ et isotrope. Notre potentiel ne vérifie cette hypothèse qu'en dimension 1, d'où une première justification de cette restriction au cas unidimensionnel.

- La Proposition 2.2.6 nous permet aisément de déduire que $\frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)}$ est borné indépendamment de δ .
De la même manière, $\mathcal{H}_\delta(s)$ est borné sur $\left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)}\right]$, et ce, indépendamment de δ .
- L'existence de la solution v pour $t \in \left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)}\right]$, à δ fixé est facile à déduire de la conservation de la norme L^2 de u_δ et de la Proposition (2.2.6).

Pour étudier les dérivées et moments de v , on utilise des *estimations de Strichartz libres*, de [55], [95] and [97], qui donnent les mêmes estimations (1.8) et (1.9), que celles du Théorème 1.2.3, ce qui nous permet de montrer que ces quantités sont bornées par des constantes indépendantes de δ . On déduit alors le Théorème suivant, qui, avec la Proposition 2.2.4 nous donne le contrôle uniforme en δ des dérivées et moments du profil sur l'intervalle $[-T, 0]$:

Théorème 2.2.9 (Contrôle du profil jusqu'à $t = 0$). *Soit $\kappa \in \mathbf{R}$, et $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$. On considère u_δ la solution de (2.11), et $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$ où $c > 0$. Alors, il existe $T_0 > 0$ tel que pour tout $k \in \mathbf{N}$, la proposition suivante soit vérifiée*

Il existe $C > 0$, tel que

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}, \alpha + \beta \leq k, \quad \|y^\alpha \partial_y^\beta u_\delta(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} \leq C, \quad \forall t \in [-T_0, 0]$$

Validité de l'approximation

On écrit

$$\varphi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} u_\delta\left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{iS^+(t)}{\varepsilon} + \frac{i\xi^+(t) \cdot (x - x^+(t))}{\varepsilon}}.$$

Le théorème qui donne la validité de l'approximation $\varphi^\varepsilon \chi_\delta^+$ s'énonce de manière suivante

Théorème 2.2.10 (Validité de l'approximation dans la région adiabatique). *Soient $T > 0$, $\gamma \in [0, 1/6]$, $c_0 > 0$ et $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$. On considère ψ^ε , la solution exacte au problème de Cauchy (2.8) - (2.10), et φ^ε , l'approximation définie ci-dessus. Alors, la différence*

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x) \chi_\delta^+(x),$$

satisfait : $\exists C > 0, \exists \varepsilon_0 > 0, \forall \varepsilon \in]0, \varepsilon_0]$

$$\sup_{t \in [-T, -t^\varepsilon]} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} + \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} \leq C\varepsilon^\gamma,$$

où $t^\varepsilon = c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}$.

Dans cette sous-section, nous donnerons un rapide aperçu des idées de preuve de ce théorème.

Notons d'abord que φ^ε vérifie l'équation suivante

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t \varphi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \partial_x^2 \varphi^\varepsilon - \lambda_\delta(x) \varphi^\varepsilon = \kappa \varepsilon^{3/2} |\varphi^\varepsilon|^2 \varphi^\varepsilon - \mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x) \varphi^\varepsilon; \\ \varphi^\varepsilon(-T, x) = \varepsilon^{-1/4} a\left(t, \frac{x - x^+(-T)}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{i s^+(-T) + \frac{i \xi^+(-T) \cdot (x - x^+(-T))}{\varepsilon}} \end{cases}$$

où

$$\mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x) = \frac{\lambda^{(3)}(g(t, x))}{6} (x - x^+(t))^3, \quad \text{avec } g(t, x) = \tau x + (1 - \tau)x^+(t), \quad \tau \in]0, 1[.$$

Le terme d'erreur w^ε entre la fonction d'onde ψ^ε et l'approximation $\varphi^\varepsilon \chi_\delta^+$ vérifie

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t w^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \partial_x^2 w^\varepsilon - V_\delta(x) w^\varepsilon = \varepsilon N L^\varepsilon + \varepsilon L^\varepsilon; \\ w^\varepsilon(-T, x) = 0 \end{cases}$$

où

$$\begin{aligned} N L^\varepsilon &= \kappa \varepsilon^{1/2} (|\psi^\varepsilon|^2 \psi^\varepsilon - |\varphi^\varepsilon|^2 \varphi^\varepsilon \chi_\delta^+) \\ L^\varepsilon &= \varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x) \varphi^\varepsilon \chi_\delta^+ + \varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta^+ + \frac{\varepsilon}{2} \varphi^\varepsilon d^2 \chi_\delta^+. \end{aligned}$$

En utilisant la formule de Duhamel et les estimations L^2 usuelles, on obtient

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq \|w^\varepsilon(-T)\|_{L^2} + \int_{-T}^t \|N L^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds + \int_{-T}^t \|L^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds.$$

On se heurte à deux difficultés lorsque l'on veut grossièrement majorer certains termes de L^ε :

- Des termes présentent des contributions trop importantes de l'ordre de $\varepsilon^{-\beta}$, $\beta \geq 0$, qui ne sont pas compensées : par exemple, le dernier terme de L^ε peut être grossièrement majoré de la façon suivante :

$$\left\| \frac{\varepsilon}{2} \varphi^\varepsilon \cdot d^2 \chi_\delta(t) \right\|_{L^2} \lesssim \varepsilon |d^2 \chi_\delta|_\infty \|\varphi^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \frac{\varepsilon}{\delta^2} \lesssim 1,$$

ce qui ne permet pas de montrer que le reste est petit dans la limite semi-classique.

- Tout comme dans le cas sans croisement, le terme $\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta^+$ présente une contribution non-négligeable, en $\mathcal{O}(1)$ dans $L^2(\mathbf{R})$. La stratégie utilisée consistait à introduire des termes de correction pour éliminer ce terme. Ici, ces termes vont dépendre de ε et éventuellement induire des pertes trop importantes.

Pour passer outre ces difficultés, on écrit les coordonnées des vecteurs propres de façon trigonométrique, ce qui permet de trouver des bornes plus fines, données par (2.9). Ensuite, il est possible de "gagner" des puissances de ε en intégrant en temps. En prenant comme exemple le terme ci-dessus, on peut déduire

$$\|\varepsilon \varphi^\varepsilon \cdot d^2 \chi_\delta(s)\|_{L^1([-T; t], L^2)} \lesssim \int_{-T}^t \left[\int_{|x| \geq \theta|s|} \dots + \int_{|x| \leq \theta|s|} \dots \right]^{1/2} ds \lesssim \int_{-T}^t \left[\frac{\varepsilon^2 \delta^2}{|s|^6} \right]^{1/2} + \left[\frac{\varepsilon^2 \sqrt{\varepsilon}^{2M}}{\delta^4 |s|^{2M}} \right]^{1/2} ds,$$

où on a utilisé le contrôle du profil ainsi que

- Pour la première intégrale : $|x| \geq \theta|s|$, et donc $\left|\frac{x}{\delta}\right|^{-1} \leq \frac{\delta}{\theta|s|}$,
- Pour la deuxième, on a utilisé le fait que tous les moments du profil sont bornés, (Théorème 2.2.9) en multipliant et divisant par $\frac{\sqrt{\varepsilon}^{2M}}{|x-x(s)|^{2M}}$ pour M arbitrairement grand.

On en déduit alors

$$\|\varepsilon \varphi^\varepsilon \cdot d^2 \chi_\delta(s)\|_{L^1([-T;t], L^2)} \lesssim \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon}}{t^2}$$

De même, on obtient des bornes pour tous les autres termes, ce qui donne l'estimation suivante sur le terme linéaire :

Lemme 2.2.11. *Soient $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$ et $\Lambda > 0$ une constante fixée. Alors il existe $C_L > 0$ indépendant de ε , tel que pour tout $t \in [-T, -\Lambda\sqrt{\varepsilon}]$, on a*

$$\|L^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|\varepsilon \partial_x L^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}.$$

Il reste à regarder le terme non-linéaire sans les estimations de Strichartz qui ne sont pas connues pour notre système. On peut écrire

$$\|NL^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R})} \lesssim \kappa \sqrt{\varepsilon} (\|w^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|\varphi^\varepsilon\|_{L^\infty}^2) \|w^\varepsilon\|_{L^2},$$

et donc, en utilisant le Lemme 2.2.11

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + C(\kappa) \sqrt{\varepsilon} \int_{-T}^t (\|w^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|\varphi^\varepsilon\|_{L^\infty}^2) \|w^\varepsilon\|_{L^2} ds.$$

Afin de traiter la norme L^∞ de w^ε , un argument de type bootstrap est nécessaire, ainsi qu'une estimation de la dérivée de w^ε pour vérifier cette hypothèse :

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} \leq \frac{M}{|t|}, \quad M > 0.$$

Ceci permet de déduire, pour $t \in [-T, -\Lambda\sqrt{\varepsilon}]$ des majorations de type

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq \sqrt{\varepsilon} \frac{C_1 C_L}{|t|} \left[1 + e^{C_2 \frac{M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{\Lambda} \right], \quad (2.17)$$

où les constantes C_1, C_2 dépendent uniquement de κ, T . Notons qu'en prenant $-T \leq t \leq c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}$ pour $0 < \gamma < 1/2$ et $c_0 > 0$, le terme d'erreur tend vers zéro dans la limite semi-classique.

Il reste à vérifier l'hypothèse de bootstrap, en utilisant l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg suivante pour w^ε :

$$\begin{aligned} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} &\leq C_{GN} \varepsilon^{-1/2} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1/2} \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1/2} \\ &\leq C_{GN} \frac{C_1 C_L}{|t|} \left[1 + e^{C_2 \frac{M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{\Lambda} \right], \end{aligned}$$

et en vérifiant si l'inégalité suivante est valide

$$C_{GN} \frac{C_1 C_L}{|t|} \left[1 + e^{C_2 \frac{M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{\Lambda} \right] \leq \frac{M}{|t|}.$$

En choisissant proprement Λ et M , c'est le cas et on en déduit donc la validité de l'hypothèse de bootstrap utilisée.

Remarquons que l'utilisation de "simples" estimations L^2 , possibles car nous sommes dans un cas L^2 -sous-critique, ainsi que l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg donnant la norme L^∞ par rapport aux normes L^2 et H^1 nous restreint, techniquement, au cas unidimensionnel.

2.2.4 Approximation dans la zone de croisement

Lorsque l'on se rapproche du croisement, les quantités classiques associées au mode $+$ ne sont plus adaptées pour construire une approximation, puisque, tout comme dans le cas linéaire de [61], à l'ordre dominant, la solution ne va pas rester localisée autour de $(x^+(t), \xi^+(t))$ dans l'espace des phases. Les trajectoires vérifient

$$x^\pm(t) = \xi_0 t + \mathcal{O}(t^2) \quad ; \quad \xi^\pm(t) = \xi_0 + \mathcal{O}(t),$$

On utilise donc de nouvelles trajectoires libres qui sont une approximation des précédentes et sont proches des deux trajectoires $+$ et $-$ pour des temps t petits :

$$\tilde{x}(t) = \xi_0 t \quad ; \quad \tilde{\xi}(t) = \xi_0 > 0.$$

Par ailleurs, pour étudier la fonction d'onde dans cette petite zone, on effectue un changement d'échelle en temps : $t = s\sqrt{\varepsilon}$, et on va regarder le problème dans la variable de temps s , qui représente une échelle "rapide" où les mouvements des particules seront visibles sur le petit intervalle de temps $[-t^\varepsilon, t^\varepsilon]$.

On introduit les variables suivantes :

$$\begin{cases} y = (x - t\xi_0) / \sqrt{\varepsilon} \\ s = t / \sqrt{\varepsilon}, \end{cases}$$

et la version rescalée de ψ^ε , que l'on note v^ε :

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} v^\varepsilon \left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i\xi_0^2 t}{2\varepsilon} + \frac{i\xi_0(x - t\xi_0)}{\varepsilon}} \quad (2.18)$$

avec $v^\varepsilon(s, y) \in \mathbf{C}^2$, solution de l'équation suivante

$$\begin{cases} i\partial_s v^\varepsilon + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_x^2 v^\varepsilon - V_{\delta/\sqrt{\varepsilon}}(y + s\xi_0) v^\varepsilon = \kappa \sqrt{\varepsilon} |v^\varepsilon|^2 v^\varepsilon, \\ v^\varepsilon(-c_0 \varepsilon^{-\gamma}, y) = v_{init.}^\varepsilon(y) \end{cases} \quad (2.19)$$

où

$$V_{\delta/\sqrt{\varepsilon}}(y + s\xi_0) = \begin{pmatrix} (y + s\xi_0) & \delta/\sqrt{\varepsilon} \\ \delta/\sqrt{\varepsilon} & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix}.$$

La donnée $v_{init.}^\varepsilon(y)$ est choisie de sorte que (2.18) soit vérifiée au temps d'arrivée dans la zone de croisement $t = -c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}$.

L'approximation que l'on souhaite utiliser est analogue à celle introduite dans le cas linéaire. En effet, on souhaite décomposer une éventuelle fonction approchée de la façon suivante :

$$v_{app}^\varepsilon(s, y) \simeq \sum_{j=0}^{\infty} c_j \varepsilon^{j/2} f_j(s, y),$$

où c_j et f_j sont à valeurs vectorielles. Il est facile de voir que les termes de plus petit degré, pour $j = 0$, satisfont l'EDO

$$i\partial_s f_0 - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} f_0 = 0,$$

c'est-à-dire l'équation de f , (2.12), tandis que la solution exacte satisfait

$$i\partial_s v^\varepsilon - \begin{pmatrix} (y + s\xi_0) & \delta/\sqrt{\varepsilon} \\ \delta/\sqrt{\varepsilon} & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} v^\varepsilon = \sqrt{\varepsilon} \left(-\frac{1}{2} \partial_x^2 + \kappa |v^\varepsilon|^2 \right) v^\varepsilon.$$

Comme la non-linéarité est précédée de $\sqrt{\varepsilon}$, qui a donc un poids semi-classique plus petit que ces termes, on prétend que l'évolution, à l'ordre dominant, ne sera pas affectée par des effets non-linéaires, entraînant

une propagation similaire à [61] dans la région considérée.

On note $r^\varepsilon(s, y) = v^\varepsilon(s, y) - f(s, y)$ le terme d'erreur que l'on souhaite contrôler et qui vérifie

$$\begin{cases} i\partial_s r^\varepsilon + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}\partial_y^2 r^\varepsilon - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} r^\varepsilon = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}\partial_y^2 f + \kappa\sqrt{\varepsilon}|r^\varepsilon + f|^2(r^\varepsilon + f), \\ r^\varepsilon(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) = v_{\text{initi.}}^\varepsilon(y) - u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)}. \end{cases}$$

Il est donc primordial d'estimer le terme au temps initial, et de connaître des bornes sur les dérivées de f avant de traiter le terme non-linéaire.

Dans la suite, nous effectuerons d'abord une analyse des fonctions au temps d'arrivée dans la zone de croisement. Celle-ci nécessite un "recollement" et donc, un calcul assez fastidieux, utilisant des développements asymptotiques des quantités classiques, dont nous ne donnerons pas les détails. Nous introduirons ensuite l'approximation (2.12) et discuterons de ses propriétés plus en détails; enfin, nous terminerons cette sous-section par l'énoncé et une idée de preuve du théorème qui donne la validité de cette approximation et l'information que l'on en tire sur la transition entre les modes.

Recollement des données

On sait qu'au temps $-t^\varepsilon = -c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}$, la fonction d'onde peut être écrite sous deux formes :

$$\psi^\varepsilon(-t^\varepsilon, x) = \varepsilon^{-1/4}u_\delta\left(-t^\varepsilon, \frac{x - x^+(-t^\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{i}{\varepsilon}(S^+(-t^\varepsilon) + \xi^+(-t^\varepsilon) \cdot (x - x^+(-t^\varepsilon)))} \chi_\delta(x) + w^\varepsilon(-t^\varepsilon, x),$$

issue de l'approximation adiabatique, et, après le changement de fonction inconnue :

$$\psi^\varepsilon(-t^\varepsilon, x) = \varepsilon^{-1/4}v^\varepsilon\left(\frac{-t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x + t^\varepsilon\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\xi_0^2(-t^\varepsilon)/2 + \xi_0(x + t^\varepsilon\xi_0)}.$$

On souhaite donc recoller ces deux expressions en $s = -s^\varepsilon = -c_0\varepsilon^{-\gamma}$, en exprimant la donnée de façon suivante :

$$v_{\text{initi.}}^\varepsilon(y) = u_\delta\left(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y\right) e^{\frac{i\phi^\varepsilon(y)}{\varepsilon}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + W^\varepsilon(y),$$

où la phase est donnée par

$$\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y) = \frac{i}{\varepsilon}\left(S(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}\xi_0^2s^\varepsilon\right) + \frac{i}{\varepsilon}\left[\xi(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) \cdot (\sqrt{\varepsilon}y - \sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon\xi_0 - x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})) - \xi_0\sqrt{\varepsilon}y\right],$$

et où W^ε est assez petit dans $L^2(\mathbf{R})$, pour que la différence au temps initial $s = -c_0\varepsilon^{-\gamma}$ entre v^ε et f , dont la donnée est (2.13), puisse tendre vers zéro dans la limite semi-classique. Ce terme W^ε est constitué de :

$$\begin{aligned} W^\varepsilon(y) &= \omega^\varepsilon(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) \\ &+ \theta(\varepsilon) \left(\int_0^1 \partial_y u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, \zeta\theta(\varepsilon) + y) d\zeta \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \chi_\delta^+(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma})) \\ &+ u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \left[\chi_\delta^+(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right], \end{aligned}$$

où $\theta(\varepsilon) = -s^\varepsilon\xi_0 - \frac{x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})}{\sqrt{\varepsilon}} = \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}-2\gamma})$, que l'on déduit grâce à des asymptotiques pour des temps $s\sqrt{\varepsilon}$ petits. En procédant de même pour trouver des estimations asymptotiques sur les vecteurs propres, et en utilisant l'information sur le terme d'erreur w^ε , on en déduit que

$$\|W^\varepsilon\|_{L^2} + \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y W^\varepsilon\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^\gamma.$$

Etude de la fonction f

L'étape suivante consiste à bien étudier l'approximation f , et notamment comment elle se répartit sur chacun des modes. Il est possible de résoudre l'EDO et de trouver une expression explicite faisant usage de fonctions spéciales : les *Fonctions Paraboliques Cylindriques*, dont il est possible de calculer les asymptotiques pour des temps $|s|$ grands. C'est la méthode choisie dans [61] (voir [57] pour les formules concernant les Fonctions Paraboliques Cylindriques).

Dans les travaux présentés dans ce manuscrit, c'est plutôt un théorème de type *scattering* qui est utilisé pour déduire le comportement asymptotique de f . En effet, le système dont f est solution est de type *Landau-Zener*. Il est donc possible d'appliquer le théorème qui suit, issu de [44] modulo de bons changements de variables pour se ramener au système de l'énoncé :

Théorème 2.2.12 (Résultat de scattering, Appendice 9, [44]). *On considère le système suivant*

$$-i\partial_s u = \begin{pmatrix} s & \eta \\ \eta & -s \end{pmatrix} u.$$

Alors, il existe (g_1^{s-}, g_2^{s-}) et (g_1^{s+}, g_2^{s+}) deux bases de solutions orthonormales, telles que, localement et uniformément en η , les asymptotiques suivantes soient vérifiées :

$$\begin{aligned} \text{pour } s \rightarrow -\infty, & \quad \begin{cases} g_1^{s-}(s, \eta) = e^{i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + o(1) \\ g_2^{s-}(s, \eta) = e^{-i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + o(1) \end{cases} \\ \text{pour } s \rightarrow +\infty, & \quad \begin{cases} g_1^{s+}(s, \eta) = e^{i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + o(1) \\ g_2^{s+}(s, \eta) = e^{-i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + o(1) \end{cases} \end{aligned}$$

où

$$\Lambda(s, \eta) = \frac{s^2}{2} + \frac{\eta^2}{2} \log |s|,$$

et où le passage entre les coordonnées (α_1, α_2) dans la base (g_1^{s-}, g_2^{s-}) à (β_1, β_2) dans (g_1^{s+}, g_2^{s+}) se fait de la façon suivante :

$$\begin{pmatrix} \beta_1(\eta) \\ \beta_2(\eta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(\eta) & -\bar{B}(\eta) \\ B(\eta) & A(\eta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1(\eta) \\ \alpha_2(\eta) \end{pmatrix}$$

où

$$A(\eta) = e^{-\pi\eta^2/2}, \quad B(\eta) = \frac{2i}{\sqrt{\pi}\eta} 2^{-i\eta^2/2} e^{-\pi\eta^2/4} \Gamma\left(1 + \frac{i\eta^2}{2}\right) \sinh\left(\frac{\pi\eta^2}{2}\right),$$

et $|A(\eta)|^2 + |B(\eta)|^2 = 1$.

Pour appliquer ce théorème, il faut passer de l'équation

$$i\partial_s f - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} f = 0;$$

à

$$-i\partial_{\tilde{s}} u - \begin{pmatrix} \tilde{s} & \eta \\ \eta & -\tilde{s} \end{pmatrix} u = 0,$$

ce qui est possible en effectuant le changement suivant : $\tilde{s} = (s\xi_0 + y)/\sqrt{\xi_0}$ et $\tilde{f}(\tilde{s}, y) = f(s, y)$ puis

$$\begin{cases} \tilde{f}_1 = u_2 \\ \tilde{f}_2 = u_1 \end{cases}, \quad \text{avec } \eta = -c/\sqrt{\xi_0}.$$

Notons que dans notre cas, la phase Λ va dépendre de s et de y mais qu'en terme de norme L^2 , nous ne verrons pas son effet.

On en déduit alors le comportement suivant de f :

Corollaire 2.2.13. Soit $\gamma \in]0, 1/6[$. On considère $f = (f_1, f_2)$ la solution du problème (2.12)-(2.13) sur l'intervalle de temps $[-c_0\varepsilon^{-\gamma}, c_0\varepsilon^{-\gamma}]$. Alors,

$$\|f_1(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 = 0 \quad \text{et} \quad \|f_2(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 = \|a\|_{L^2}^2 + o(1),$$

et

$$\begin{aligned} \|f_1(c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 &= (1 - e^{-\frac{\pi c^2}{\xi_0}}) \|a\|_{L^2}^2 + o(1) \\ \|f_2(c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 &= e^{-\frac{\pi c^2}{\xi_0}} \|a\|_{L^2}^2 + o(1). \end{aligned}$$

Comme la fonction f dépend du paramètre ε par sa donnée - et notamment la phase qui peut, à chaque dérivée, faire apparaître une puissance négative de ε - il est nécessaire d'estimer ces pertes éventuelles dans $L^2(\mathbf{R})$. Pour cela, on procède par récurrence sur l'ordre des dérivées pour montrer

Lemme 2.2.14. Soient $\gamma \in]0, 1/6[$ et f solution de (2.12)-(2.13). Alors, si $s \in [-c_0\varepsilon^{-\gamma}, c_0\varepsilon^{-\gamma}]$, on a :

$$\forall k \in \mathbf{N}, \exists C_k > 0, \quad \|\partial_y^k f(s)\|_{L^2} \leq C_k \varepsilon^{-k\gamma}.$$

Validité de l'approximation et transition entre les modes

Pour montrer la validité de l'approximation, on rappelle que le terme d'erreur vérifie

$$i\partial_s r^\varepsilon + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 r^\varepsilon - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} r^\varepsilon = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 f + \kappa \sqrt{\varepsilon} |r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f),$$

ce qui nous permet d'écrire

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2}^2 &= 2 \operatorname{Im} \left\langle r^\varepsilon \left| -\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 r^\varepsilon + V_\delta(s\xi_0 + y) r^\varepsilon \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 f + \kappa \sqrt{\varepsilon} |r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f) \right\rangle \\ &\leq C [\sqrt{\varepsilon} \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \|\partial_y^2 f\|_{L^2} + |\kappa| \sqrt{\varepsilon} (\|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|f\|_{L^\infty}^2) \|f\|_{L^2} \|r^\varepsilon\|_{L^2}]. \end{aligned}$$

L'inégalité de Gagliardo-Nirenberg appliquée à f donne

$$\|f\|_{L^\infty} \lesssim \|f\|_{L^2}^{1/2} \|\partial_y f\|_{L^2}^{1/2} \lesssim \varepsilon^{-\gamma/2},$$

et pour traiter $\|r^\varepsilon\|_{L^\infty}$ on utilise un argument de type bootstrap comme dans la région adiabatique :

$$\|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 \leq \varepsilon^{-\alpha},$$

avec $\alpha = (1 - 3\gamma)/2$. En utilisant ces majorations pour r^ε et pour $\sqrt{\varepsilon} \partial_y r^\varepsilon$, dont la norme L^2 vérifie une inégalité similaire à celle de r^ε , on obtient

$$\|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \leq C_1 |\kappa| \varepsilon^{\gamma/2}, \quad \|\sqrt{\varepsilon} \partial_y r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \leq C_2 \varepsilon^\gamma,$$

Pour vérifier l'hypothèse de bootstrap, on écrit, grâce à l'inégalité de Gagliardo Nirenberg

$$\begin{aligned} \|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 &\leq C_{GN}^2 \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \|\partial_y r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \\ &\leq \tilde{C} |\kappa| \varepsilon^{\gamma/2} \varepsilon^{\gamma-1/2} \leq \tilde{C} |\kappa| \varepsilon^{\frac{3\gamma-1}{2}}, \end{aligned}$$

et tant que

$$\tilde{C} |\kappa| \varepsilon^{\frac{3\gamma-1}{2}} \leq \varepsilon^{\frac{3\gamma-1}{2}} \Leftrightarrow \tilde{C} |\kappa| \leq 1,$$

c'est-à-dire, tant que $|\kappa| < 1/\tilde{C}$, les inégalités sur r^ε sont vraies; ce qui montre la validité de l'approximation f pour de petits κ .

Il reste à déduire le Corollaire 2.2.3 pour ψ^ε en repassant aux bonnes variables et en calculant la masse répartie sur chaque mode, c'est-à-dire, la norme L^2 des quantités suivantes :

$$\begin{aligned}\psi_+^\varepsilon(t^\varepsilon, x) &= \psi_1^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \cos\left(\Phi\left(\frac{x}{\delta}\right)\right) + \psi_2^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \sin\left(\Phi\left(\frac{x}{\delta}\right)\right) \\ \psi_-^\varepsilon(t^\varepsilon, x) &= \psi_1^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \sin\left(\Phi\left(\frac{x}{\delta}\right)\right) - \psi_2^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \cos\left(\Phi\left(\frac{x}{\delta}\right)\right),\end{aligned}$$

où

$$\begin{pmatrix} \psi_1^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \\ \psi_2^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \end{pmatrix} = \varepsilon^{-1/4} \begin{pmatrix} f_1\left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}}\right) \\ f_2\left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}}\right) \end{pmatrix} e^{i\frac{\xi_0^2 t^\varepsilon}{2\varepsilon} + i\frac{\xi_0(x - t^\varepsilon \xi_0)}{\varepsilon}} + \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma/2}).$$

Le calcul des intégrales se fait assez aisément, en prenant soin de traiter les coordonnées des vecteurs propres, exprimées sous forme trigonométrique avec des asymptotiques, comme au temps $-t^\varepsilon$.

2.3 Propagation au-delà du croisement et perspectives

Propagation jusqu'à des temps d'ordre 1 : aspects numériques.

Les auteurs de [61] propagent leur donnée jusqu'à des temps d'ordre 1. Dans le cas non-linéaire, l'approximation construite n'est valable que jusqu'à des temps d'ordre $\varepsilon^{1/2-\gamma}$, où $0 < \gamma < 1/6$. La question de la propagation jusqu'à des temps d'ordre 1 n'est pas démontrée d'un point de vue théorique. Nous avons donc étudié numériquement la propagation dans la région au delà du croisement pour voir si la solution exacte pouvait être approchée, comme dans le cas linéaire [61], par une somme d'états cohérents, chacun étant dans un espace propre différent et chacun se propageant suivant les trajectoires classiques associées.

Cette approche numérique du problème, pour tester la conjecture, a été initiée dans un travail en collaboration avec Johannes Keller du Technische Universität München.

On rappelle que les trajectoires vérifient (1.3), c'est-à-dire

$$\begin{cases} \dot{x}^\pm(t) = \xi^\pm(t) \\ \dot{\xi}^\pm(t) = -\partial_x \lambda^\pm(x^\pm(t)) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} x^\pm(0) = 0 \\ \xi^+(0) = \xi_0, \xi^-(0) = \xi_0 + \frac{2}{\xi_0} \delta, \end{cases}$$

où la trajectoire associée au mode $-$ a une vitesse initiale légèrement modifiée - *drift* - (et donc une énergie cinétique modifiée) afin de préserver, asymptotiquement jusqu'à ordre $\mathcal{O}(\varepsilon)$, l'énergie des particules qui subissent une transition entre les modes. En effet, si on note $\delta\omega$ ce drift, on souhaite avoir au temps $t = 0$

$$\frac{(\xi_0 + \delta\omega)^2}{2} - \delta = \frac{\xi_0^2}{2} + \delta + \mathcal{O}(\varepsilon).$$

En développant et identifiant les termes on trouve aisément qu'il faut avoir $\omega = \frac{2}{\xi_0}$. Ce drift est déjà introduit et justifié dans [61].

Du point de vue théorique, deux questions se posent lorsque l'on souhaite étudier la propagation jusqu'à des temps d'ordre 1. La première concerne les deux états cohérents qui vivent sur chacun des modes après la transition et qu'il faut superposer de façon non-linéaire.

L'hypothèse suivante, introduite dans [26], [25] et [69] sur les trajectoires est nécessaire pour utiliser les techniques qui permettent de traiter les interactions dues à la non-linéarité :

$$|\xi^+(t) - \xi^-(t)| > 0, \quad \forall t \in [t^\varepsilon, T].$$

En un sens, on suppose que les trajectoires ont des vitesses assez différentes pour ne pas se "voir" trop longtemps. Or, un calcul rapide permet de voir que cette quantité est minorée par un terme qui dépend de δ et qui devient donc très petit.

La deuxième difficulté survient à cause de la différence entre la solution exacte et l'approximation. En effet, ce terme perturbatif est trop gros, de l'ordre de $\varepsilon^{\gamma/2}$, or, dans le cas $d = 1$, on sait propager des états cohérents perturbés si le terme de perturbation est de l'ordre de ε^α avec $\alpha > 1/4$. On ne peut donc espérer utiliser les résultats connus sur la stabilité des états cohérents qui sont perturbés.

La méthode que l'on a en tête pour calculer la *solution de référence* et les approximations de type paquets d'onde est celle de *Strang splitting*. On calcule ensuite la différence entre ces deux fonctions pour estimer le terme d'erreur. La convergence de cette méthode est démontrée dans certains cas mais pas encore dans le notre, nous l'avons néanmoins utilisée car elle est connue pour donner de très bonnes approximations et avons reporté à un travail ultérieur la preuve de la convergence.

La méthode de *Strang splitting* consiste à procéder de manière suivante sur un intervalle de type $[0, T]$ avec un pas de temps noté τ et un demi pas de temps $\tau/2$:

1. Dans un premier temps, on résout sur un intervalle de taille $\tau/2$, $[0, \tau/2]$

$$i\varepsilon\partial_t\psi_1^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta\psi_1^\varepsilon = 0,$$

de manière explicite à l'aide de la transformée de Fourier. On note pour $t \geq 0$

$$\phi_{1,t}^\varepsilon : \psi_1^\varepsilon(0, \cdot) \longmapsto \psi_1^\varepsilon(t, \cdot).$$

2. La solution obtenue à l'étape précédente est ensuite utilisée comme donnée pour résoudre sur un intervalle de taille τ : $[\tau/2, 3\tau/2]$

$$i\varepsilon\partial_t\psi_2^\varepsilon = V(x)\psi_2^\varepsilon + \kappa\varepsilon^{3/2}|\psi_2^\varepsilon|^2\psi_2^\varepsilon,$$

où on remarque que dans la deuxième étape, $|\psi_2^\varepsilon(t)|^2$ est conservé, de sorte que la quantité issue de la non-linéarité dans l'exponentielle ne dépend pas du temps et donc

$$\psi_2^\varepsilon(3\tau/2) = \exp\left(\frac{-i\tau}{\varepsilon}\left(V(x) + \kappa\varepsilon^{3/2}|\psi_1^\varepsilon(\tau/2)|^2\right)\right)\psi_1^\varepsilon(\tau/2).$$

On note ici pour $t \geq 0$

$$\phi_{2,t}^\varepsilon : \psi_2^\varepsilon(0, \cdot) \longmapsto \psi_2^\varepsilon(t, \cdot).$$

3. puis on reproduit l'étape 1. sur un intervalle de taille $\tau/2$ de type $[3\tau/2, 2\tau]$.
4. Les étapes 1., 2. et 3. sont répétées respectivement sur des intervalles de tailles $\tau/2, \tau$ et $\tau/2$, de type

$$[j\tau, j\tau + \tau/2], [j\tau + \tau/2, j\tau + 3\tau/2] \text{ et } [j\tau + 2\tau] \quad \text{avec } j \in \left\{0, \dots, \left\lfloor \frac{T}{\tau} \right\rfloor + 1\right\}$$

jusqu'à couvrir l'intervalle $[0, T]$.

Si on note

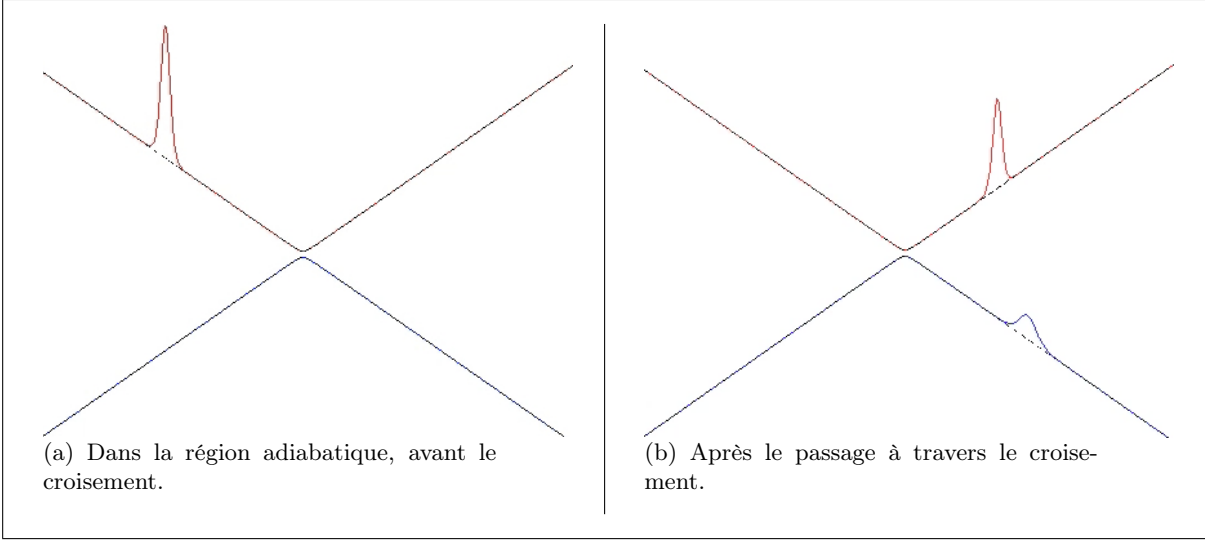
$$\phi_i^\varepsilon : \psi^\varepsilon(0, \cdot) \longmapsto \psi^\varepsilon(t, \cdot),$$

on a

$$\phi_t^\varepsilon = \phi_{1,t/2}^\varepsilon \circ \phi_{2,t}^\varepsilon \circ \phi_{1,t/2}^\varepsilon.$$

Un essai préliminaire, sans régler les questions sur la validité de l'approche numérique, nous permet d'avoir une idée sur la propagation au delà-du croisement, et de tester la conjecture sur la superposition des états cohérents au-delà de la zone du croisement.

La Figure 2.1 donne à penser que la décomposition de la solution en deux paquets d'onde est vraie :

Figure 2.1: Solution de référence [$\varepsilon = 10^{-2} = \delta^2$, $\kappa = -1$, $x(t_{initial}) = -4$, $\xi(t_{initial}) = 0$]

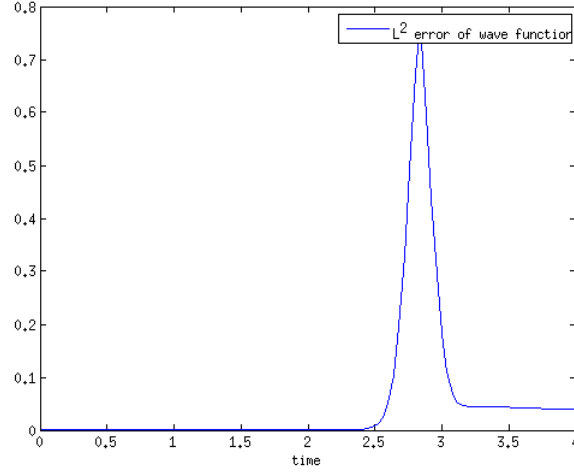
L'étape suivante consiste à comparer la solution de référence avec les approximations de type états cohérents se propageant le long des trajectoires classiques. Pour calculer ces approximations $\varphi_{\pm}^{\varepsilon} \chi_{\delta}^{\pm}$, solutions de

$$i\varepsilon \partial_t \varphi_{\pm}^{\varepsilon} + \frac{\varepsilon^2}{2} \partial_x^2 \varphi_{\pm}^{\varepsilon} - \lambda_{\delta}^{\pm}(x) \varphi_{\pm}^{\varepsilon} = \kappa \varepsilon^{3/2} |\varphi_{\pm}^{\varepsilon}|^2 \varphi_{\pm}^{\varepsilon} - \left(\lambda_{\delta}^{\pm}(x) - \lambda_{\delta}^{\pm}(x^{\pm}(t)) - \nabla \lambda_{\delta}^{\pm}(x^{\pm}(t))(x - x^{\pm}(t)) - \frac{1}{2} \lambda_{\delta}^{\pm(2)}(x^{\pm}(t))(x - x^{\pm}(t))^2 \right) \varphi_{\pm}^{\varepsilon},$$

avec des données issues de l'étude de la zone de croisement, on procède de la même manière que pour la solution de référence.

Ensuite, si on calcule ψ^{ε} et sa projection ψ_{+}^{ε} sur le mode + ainsi que l'approximation sur ce mode, données par $\varphi^{\varepsilon} \chi_{\delta}^{+}$ jusqu'au croisement, et pondérée par le coefficient de transition de Landau-Zener $e^{-\frac{\pi \varepsilon^2}{\varepsilon_0}}$ au-delà, il est possible de modéliser la taille de l'erreur dans L^2 , donnée par la Figure 2.2.

On voit alors que l'approximation n'est pas bonne dans une région proche du croisement, mais qu'au-delà, elle semble valide jusqu'à des temps d'ordre 1. On peut par ailleurs espérer que, dans la région adiabatique avant le croisement, le terme d'erreur soit en réalité plus petit que ce que la théorie nous permet d'obtenir.

Figure 2.2: Taille de l'erreur dans $L^2(\mathbf{R})$.

Rappelons qu'il y a des difficultés d'un point de vue numérique : la convergence de cette méthode pour notre cadre de travail n'est pas démontrée. En effet, il s'agit ici d'un système d'équations non-linéaires, avec un potentiel - qui présente, de surcroît, un croisement évité et donc une dépendance en ε - et l'équation de $\varphi_{\pm}^{\varepsilon}$ contient un potentiel non-autonome (voir [40] et [24] pour des résultats sur des équations scalaires non-linéaires avec des potentiels indépendants du temps et sous certaines hypothèses d'une part, et des non-linéarités plus générales d'autre part).

D'autres difficultés d'ordre technique apparaissent, mais ne sont pas spécifiquement liées au cadre non-linéaire : il faut implémenter les vecteurs propres et donc gérer le changement de coordonnées lors du passage par le croisement lorsque l'on souhaite étudier la validité de l'approximation sur chaque mode. Ces deux difficultés, déjà présentes dans le cas linéaire ont été traitées par Hagedorn-Joye dans [61] et Fermanian Kammerer - Lasser pour les aspects numériques, dans [49] et des travaux plus récents des mêmes auteurs.

Il est important de mentionner que, suite aux observations sur la Figure 2.2, on peut imaginer que c'est probablement à cause de restrictions techniques que le reste au temps d'arrivée dans la zone de croisement, estimé dans le Théorème 2.2.10, est si gros :

$$\sup_{t \in [-T, -t^{\varepsilon}]} \|w^{\varepsilon}(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} + \|\varepsilon \partial_x w^{\varepsilon}(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} \leq C\varepsilon^{\gamma}, \quad \text{où } t^{\varepsilon} = c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}.$$

Or c'est ce terme qui entraîne que le reste r^{ε} entre la solution exacte et l'approximation f donnée par (2.12) est d'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma/2})$ dans L^2 , avec $0 < \gamma < 1/6$. Un rapide calcul permet de voir que si le reste au temps $-t^{\varepsilon}$ était très petit ("presque" d'ordre $\sqrt{\varepsilon}$), alors le terme d'erreur au temps t^{ε} serait assez petit pour que l'on puisse utiliser les résultats sur la propagation d'états cohérents perturbés.

Dans l'hypothèse où ce terme perturbatif serait assez petit, il resterait à prouver que la superposition d'états cohérents pour notre situation est possible. Dans le cas sans croisement, cette analyse est pratiquée en supposant que les trajectoires ξ^+ et ξ^- sont séparées par une distance fixe, ce qui permet de déduire que

$$|I^{\varepsilon}(T)| = |\{t \in [0, T], |x^+(t) - x^-(t)| \leq \varepsilon^{\alpha}\}| = o(1), \quad 0 < \alpha < 1/2.$$

Ici, on peut espérer que

- lorsque $|x^+(t) - x^-(t)| \geq \varepsilon^{\alpha}$, la localisation des paquets d'onde près de $x^+(t)$ pour l'un, et $x^-(t)$ pour l'autre, permettra de montrer que l'interaction entre les deux est négligeable.

- lorsque ces deux trajectoires sont proches, la différence entre les moments pourra être estimée à l'aide des asymptotiques et grâce au drift, pour donner $|\xi^+(t) - \xi^-(t)| = \mathcal{O}(\delta)$. Avec ces estimations, on pourra tout de même obtenir que $|I^\varepsilon(T)| = o(1)$.

Autres directions de recherche.

Une autre direction de recherche serait de regarder des non-linéarités différentes, de type Hartree :

$$i\varepsilon \partial_t \psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta \psi^\varepsilon - V(x) \psi^\varepsilon = \kappa \varepsilon^\beta (K(x) * |\psi^\varepsilon|_{\mathbb{C}^N}^2) \psi^\varepsilon,$$

où la fonction d'onde ψ^ε est à valeurs vectorielles.

L'idée qui la motive est que, si le noyau K est une masse de Dirac, donc un noyau très singulier, cela revient à étudier notre problème précédent de type Schrödinger non-linéaire cubique. Si le noyau est plus régulier, l'étape du passage à travers le croisement, ainsi que la validité de l'approximation jusqu'à des temps d'ordre 1 sont peut-être plus faciles à traiter. On imagine deux types de noyaux à étudier :

- $K(x) = \frac{C}{|x|^\gamma}$, un noyau "moins" singulier, et qui contient le cas de l'équation de Schrödinger-Poisson (dans l'esprit de [19] pour le cas scalaire).
- Le cas où K est très régulier ($K \in C^\infty$ avec, éventuellement, d'autres hypothèses de régularité sur les dérivées et les valeurs en certains points), comme cela a été étudié dans [4] et [19] pour des situations scalaires.
Dans cette situation, on peut, en plus de la question de superposition sur des temps d'ordre 1, regarder le cas sur-critique $\beta = 0$, (la superposition dans le cas scalaire est analysée dans [23]).

Notons que ces problèmes se rapprochent de celui du *graphène*, qui présente des liens avec les questions de croisements de valeurs propres.

Un modèle pour le transport des électrons dans ces "strates" de graphènes a été étudié dans [88], où l'existence de solutions est montrée pour le problème suivant :

$$i\partial_t \Psi_j = -i(\sigma_1 \partial_{x_1} + \sigma_2 \partial_{x_2}) \Psi_j + \frac{1}{4\pi} \left(K(x) * \sum_{k \in \mathbf{N}} \lambda_k |\Psi_k|^2 \right) \Psi_j, \quad ; \quad \Psi_j|_{t=0} \in L^2, \|\Psi_j\|_{L^2} = 1, \quad (2.20)$$

où le noyau $K(x) = |x|^{-1}$ et $j \in \mathbf{N}$, $\sum_k |\lambda_k| < +\infty$, $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$.

Dans (2.20), les constantes de la Physique ont été prises égales à 1. Après adimensionnement, on peut se ramener à une équation de la forme

$$-i\varepsilon \partial_t \psi_j^\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon D_1 & \varepsilon D_2 \\ \varepsilon D_2 & -\varepsilon D_1 \end{pmatrix} \psi_j^\varepsilon + \frac{1}{4\pi} \left(K(x) * \sum_{k \in \mathbf{N}} \lambda_k |\psi_k^\varepsilon|^2 \right) \psi_j^\varepsilon \quad ; \quad \psi_j^\varepsilon|_{t=0} \in L^2, \|\psi_j^\varepsilon\|_{L^2} = 1,$$

où $(t, x) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^2$, $j \in \mathbf{N}$, $\sum_k |\lambda_k| < +\infty$ et où $\varepsilon \ll 1$.

Une question naturelle concerne la propagation dans le cas où les données sont des états cohérents. Dans un premier temps, on pourra regarder des états purs : $\lambda_1 = 1$ et $\lambda_j = 0$, pour tout $j \neq 1$, et $\psi_j^\varepsilon|_{t=0} = 0$, pour tout $j \neq 1$. Puis on pourra considérer la propagation d'une collection de ces états, couplés par la non-linéarité donnée ci-dessus.

Le problème se rapproche de ceux présentés dans ce manuscrit car le symbole de la partie linéaire du modèle (2.20) présente un croisement exact en $\xi = 0$. Cependant, l'opérateur d'évolution n'est plus un Laplacien mais un opérateur de Dirac, et la non-linéarité est de type Hartree. Des difficultés nouvelles peuvent par ailleurs survenir du fait que nous sommes en dimension 2 pour la variable d'espace.

Chapitre 3

Coherent States for Systems of L^2 –Supercritical Nonlinear Schrödinger Equations

Ce chapitre a fait l'objet d'une publication dans la revue "*Communications in Partial Differential Equations*" en 2013 ([69]).

We consider the propagation of wave packets for a nonlinear Schrödinger equation, with a matrix-valued potential, in the semi-classical limit. For a matrix-valued potential, Strichartz estimates are available under long range assumptions. Under these assumptions, for an initial coherent state polarized along an eigenvector, we prove that the wave function remains in the same eigenspace, in a scaling such that nonlinear effects cannot be neglected. We also prove a nonlinear superposition principle for these nonlinear wave packets.

Keywords : Matrix-valued Schrödinger operator, Nonlinear propagation, Semiclassical limit

Mathematics Subject Classification : 35Q40, 35Q55, 81Q05, 81Q20

3.1 Introduction

We consider the semi-classical limit $\varepsilon \rightarrow 0$ for the nonlinear Schrödinger equation

$$i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon - P(\varepsilon)\psi^\varepsilon = \Lambda\varepsilon^\beta|\psi^\varepsilon|_{\mathbf{C}^2}^2\psi^\varepsilon \quad ; \quad \psi|_{t=0} = \psi_0^\varepsilon, \quad (3.1)$$

where $\Lambda \geq 0$, $d \in \{2, 3\}$. The data ψ_0^ε and the solution $\psi^\varepsilon(t)$ are vectors of \mathbf{C}^2 . The quantity $|\psi^\varepsilon|_{\mathbf{C}^2}^2$ denotes the square of the Hermitian norm in \mathbf{C}^2 of the vector ψ^ε , $P(\varepsilon)$ is a matrix-valued Schrödinger operator acting on $L^2(\mathbf{R}^d, \mathbf{C}^2)$,

$$P(\varepsilon) = -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta \text{Id} + V(x),$$

where V is a self-adjoint smooth 2×2 matrix depending on the parameter $x \in \mathbf{R}^d$ and the semiclassical parameter $\varepsilon > 0$ is small.

The data ψ_0^ε is a wave packet (or can be a perturbation or a sum of two wave packets) :

$$\psi_0^\varepsilon(x) = \varepsilon^{-d/4} e^{i\xi_0^+ \cdot (x-x_0^+)/\varepsilon} a\left(\frac{x-x_0^+}{\sqrt{\varepsilon}}\right) \chi^+(x). \quad (3.2)$$

The profile a belongs to the Schwartz class, $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$, and the initial datum is polarized along the eigenvector associated with $\lambda_+(x)$, $\chi^+(x) \in \mathcal{C}^\infty(\mathbf{R}^d, \mathbf{C}^2)$:

$$V(x)\chi^+(x) = \lambda_+(x)\chi^+(x), \quad \text{with } |\chi^+(x)|_{\mathbf{C}^2} = 1.$$

We consider two exponents, playing two different roles. The first one is β , and we choose the critical exponent $\beta = \beta_c := 1 + d/2$: in the scalar case, the approximation of ψ^ε is a wave packet whose envelope satisfies a nonlinear equation, nonlinear effects can not be neglected (see [26]). The other one, momentarily denoted as in [26] by 2σ , is the exponent of the nonlinearity $|\psi^\varepsilon|^{2\sigma}\psi^\varepsilon$ (here, $\sigma = 1$). We recall that :

- The nonlinearity is L^2 -subcritical if $\sigma < 2/d$, L^2 -supercritical otherwise.
- For $d \geq 3$, the nonlinearity is H^1 -subcritical if $\sigma < 2/(d-2)$.

Let us notice that, in our situation, contrary to the case $d = 1$, studied in [25], the nonlinearity is not L^2 -subcritical, it is only H^1 -subcritical. So the condition $\Lambda \geq 0$ is crucial here to avoid finite time blow-up (see [22] and [56]).

The aim of the paper is to prove that the solutions of (3.1) with initial data which are of the form (3.2) keep the same form and remain in the same eigenspace, at leading order, when the potential satisfies assumptions that we are now going to explain. Note that the scalar case is studied in [26] and that matrix case, with $d = 1$ is analysed by the authors of [25].

We write V as

$$V(x) = \rho_0(x) \text{Id} + \begin{pmatrix} \rho(x) & \omega(x) \\ \omega(x) & -\rho(x) \end{pmatrix}$$

where the functions ρ_0, ρ and ω are smooth, and we make the following assumptions on V :

Hypothèse 3.1.1. (i) V is long range : there exist a matrix V_∞ and $p \in \mathbf{R}^+ \setminus \{0\}$ such that for $x \in \mathbf{R}^d$,

$$\begin{aligned} \exists C > 0, \quad \|V(x) - V_\infty\| &\leq C \langle x \rangle^{-p}, \\ \forall \alpha \in \mathbf{N}^d, \quad |\alpha| \geq 1, \quad \exists C_\alpha > 0, \quad \|\partial_x^\alpha V(x)\| &\leq C_\alpha \langle x \rangle^{-p-|\alpha|}, \end{aligned}$$

where $\langle x \rangle = (1 + |x|^2)^{1/2}$ and the norm $\|\cdot\|$ denotes the operator norm on $\mathbf{C}^{2,2}$.

The eigenvalues of V are given by :

$$\lambda_\pm(x) = \rho_0(x) \pm \sqrt{\rho^2(x) + \omega^2(x)}. \quad (3.3)$$

We assume :

(ii) $\exists \delta_0 > 0, \quad \omega^2(x) + \rho^2(x) > \delta_0, \quad \forall x \in \mathbf{R}^d$.

This point guarantees that there exist smooth and normalized eigenvectors, $\chi^\pm(x)$ associated to $\lambda_\pm(x)$.

(iii) $\exists K \subset \mathbf{R}^d, K$ a compact subset of \mathbf{R}^d such that

$$V(x) = \begin{pmatrix} \lambda_+(x) & 0 \\ 0 & \lambda_-(x) \end{pmatrix},$$

for all $x \notin K$.

Assumption (i) contains $V \in L^\infty(\mathbf{R}^d)$: this is enough to prove global existence of the solution, which holds for at most quadratic potentials (see Appendix 3.8 for details).

We first give an example of such a potential then we comment on points (i), (ii) and (iii) of Assumption 3.1.1.

Example 3.1.2. Potential satisfying Assumption 3.1.1 can easily be found. For example, if we consider $\theta \in C_0^\infty(\mathbf{R}^d)$ and the potential

$$V(x) = \begin{pmatrix} \cos \theta(x) & \sin \theta(x) \\ \sin \theta(x) & -\cos \theta(x) \end{pmatrix}.$$

Then V satisfies all points of Assumption 3.1.1.

It is important to notice that (i) and (ii) of Assumption 3.1.1 ensure that ρ_0 , ρ and ω are bounded with bounded derivatives and that the eigenvalues $\lambda_+(x)$ and $\lambda_-(x)$ do not cross each other, which allows us to guarantee global smooth eigenvalues and eigenvectors, satisfying

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, \exists C > 0, \forall x \in \mathbf{R}^d, |\partial_x^\alpha \lambda_\pm(x)| + |\partial_x^\beta \chi^\pm(x)| \leq C. \quad (3.4)$$

This point is essential to obtain the main theorem of the paper, which is an *adiabatic* result. In fact, it is known that in the linear regime, without this gap assumption, there can be exchanges of energies between different modes and the solution does not remain in the same eigenspace as the datum (See the work of [60], [62], and [45], [47] on crossing phenomena).

Assumptions (i) and (iii) are here for technical purposes: they are useful to obtain Strichartz estimates, which will be crucial tools in the analysis. The eigenprojectors (or spectral projectors) associated with $V(x)$:

$$\Pi^\pm(x) = \frac{1}{2} Id \pm \frac{1}{2\sqrt{\rho^2(x) + \omega^2(x)}} \begin{pmatrix} \rho(x) & \omega(x) \\ \omega(x) & -\rho(x) \end{pmatrix},$$

are constant outside a compact subset of \mathbf{R}^d . This point and the long range assumption (i) are required in [50], to obtain Strichartz estimates without any localization (for a deeper discussion about them, we refer to Section 3.2.1).

Besides, let us notice that there are many results concerning global pseudodifferential diagonalisation of systems, with constant multiplicity (See the earlier work of [41] for WKB states, [18], and [96], [99] and [87]). We have decided to make Assumption 3.1.1, point (iii), to avoid difficulties brought by modified projectors, since they destroy the nice form of the nonlinearity. This will allow us to introduce other tools, presented in Section 3.2.1.

We introduce the following notation :

For two positive numbers a^ε and b^ε , the notation $a^\varepsilon \lesssim b^\varepsilon$ means that there exists a constant $C > 0$, independent of ε , such that for all $\varepsilon \in]0, 1]$, $a^\varepsilon \leq C b^\varepsilon$.

3.1.1 Classical trajectories

We consider the classical trajectories $(x^\pm(t), \xi^\pm(t))$ solutions to

$$\dot{x}^\pm(t) = \xi^\pm(t), \quad \dot{\xi}^\pm(t) = -\nabla \lambda_\pm(x^\pm(t)), \quad x^\pm(0) = x_0^\pm, \quad \xi^\pm(0) = \xi_0^\pm. \quad (3.5)$$

We have the following result :

Lemma 3.1.3. *Let $(x_0^\pm, \xi_0^\pm) \in \mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d$.*

Under point (i) of Assumption 3.1.1, for each + and - trajectory, (3.5) has a unique global, smooth solution $(x^\pm, \xi^\pm) \in C^\infty(\mathbf{R}, \mathbf{R}^d)^2$.

Moreover, the following estimate is satisfied :

$$\exists C_0, C_1 > 0, |x^\pm(t)| \leq C_0 \langle t \rangle, \quad |\xi^\pm(t)| \leq C_1, \quad \forall t \in \mathbf{R}. \quad (3.6)$$

The proof of this lemma is based on easy differential inequality arguments and is left to the reader.

We denote by S^\pm the action associated with $(x^\pm(t), \xi^\pm(t))$

$$S^\pm(t) = \int_0^t \left(\frac{1}{2} |\xi^\pm(s)|^2 - \lambda_\pm(x^\pm(s)) \right) ds.$$

The corresponding energies $E^\pm(t)$ are given by :

$$E^\pm(t) = \frac{|\xi^\pm(t)|^2}{2} + \lambda_\pm(x^\pm(t)).$$

These energies are constant along the trajectories :

$$E^\pm(t) = E^\pm(0) = \frac{|\xi_0^\pm|^2}{2} + \lambda_\pm(x_0^\pm), \quad \forall t \in \mathbf{R}.$$

3.1.2 The ansatz

We consider the classical trajectories and the action associated with $\lambda_+(x)$ and denote by

$$Q^+(t) = \text{Hess } \lambda_+(x^+(t)).$$

We consider the function $u = u(t, y)$ solution to

$$i\partial_t u + \frac{1}{2}\Delta u = \frac{1}{2}\langle Q^+(t)y; y \rangle u + \Lambda|u|^2 u \quad ; \quad u(0, y) = a(y), \quad (3.7)$$

and we denote by φ^ε the function associated with u, x^+, ξ^+, S^+ by:

$$\varphi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-d/4} u\left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{i(S^+(t) + \xi^+(t)(x - x^+(t)))/\varepsilon}. \quad (3.8)$$

Global existence, conservation of the L^2 -norm of u , and control of its derivatives are proved in [22]. By Corollary 1.11 of [22], we actually have

Proposition 3.1.4. *Let $T > 0$, and $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$. Then, for all $k \in \mathbf{N}$, there exists $C = C(T, k)$ such that*

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, |\alpha| + |\beta| \leq k, \|x^\alpha \partial_x^\beta u(t)\|_{L^2} \leq C, \quad \forall t \in [0, T].$$

We will use the following notations:

For $p \in \mathbf{N}$, we define the functional spaces H_ε^p by

$$H_\varepsilon^p = \left\{ f \in L^2(\mathbf{R}^d), \quad \sum_{|\alpha| \leq p} \|\varepsilon^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f\|_{L^2}^2 < +\infty \right\}$$

For all $f \in H_\varepsilon^p$, we write the associated norm :

$$\|f\|_{H_\varepsilon^p} = \left(\sum_{|\alpha| \leq p} \|\varepsilon^{|\alpha|} \partial_x^\alpha f\|_{L^2}^2 \right)^{1/2}$$

We now state the main result of the paper. Of course, if we consider initial data polarized along the other eigenvector, a similar result is available, with a corresponding ansatz.

Théorème 3.1.5. *Let $T > 0$ and $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$. Under assumption 3.1.1, consider ψ^ε , the exact solution to the Cauchy problem (3.1) - (3.2), and φ^ε , the approximation given by (3.8). If we denote by w^ε the difference*

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x)\chi^+(x),$$

then w^ε satisfies

$$\sup_{t \in [0, T]} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Remarque 3.1.6. If we consider initial data which are perturbations of wave packets :

$$\psi_0^\varepsilon(x) = \varepsilon^{-d/4} e^{i\xi_0^+ \cdot (x - x_0^+)/\varepsilon} a\left(\frac{x - x_0^+}{\sqrt{\varepsilon}}\right) \chi^+(x) + \eta^\varepsilon(x),$$

where η^ε satisfies

$$\|\eta^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} + \|\varepsilon \nabla \eta^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} \leq C\varepsilon^{\gamma_0},$$

with $\gamma_0 > d/8$, then the approximation of Theorem 3.1.5 is still valid (See Remark 3.3.2 for details).

Let us finally notice that we choose to study a 2×2 system to simplify notations, but this result can be generalized for a $N \times N$ system, without any crossing point. In this case, it is necessary to take time-dependent eigenvectors, to deal with high multiplicities, as it is done in [25], for the case $d = 1$ (see [25] and [60] for details about the procedure).

3.1.3 Long time behaviour

By adding some conditions on the profile, it is possible to obtain the same result up to a nonlinear analogue of the Ehrenfest time, of order $\log \log(\varepsilon^{-1})$.

We recall that u is the solution to (3.7) :

$$i\partial_t u + \frac{1}{2}\Delta u = \frac{1}{2} \langle Q^+(t)y; y \rangle u + \Lambda |u|^2 u \quad ; \quad u(0, y) = a(y),$$

and we assume that for all $k \leq 6$, we have

$$\exists C > 0, \quad \sup_{|\alpha|+|\beta| \leq k} \|x^\alpha \partial_x^\beta u(t)\|_{L^2} \leq C e^{C|t|}, \quad \forall t \in \mathbf{R}, \quad (3.9)$$

then the following result holds

Théorème 3.1.7. *Let $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$. If for all $k \leq 6$, the estimate (3.9) is satisfied, then*

$$\sup_{t \leq C \log \log(\frac{1}{\varepsilon})} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Besides, a similar result can be proven for initial data given by Remark 3.1.6, These points will be discussed after the proof of Theorem 3.1.5.

The behaviour of $u(t)$ for large time is an open question in general. However, there are situations where an exponential control of these momenta and derivatives, as in (3.9) is proved :

- when $d = 1$.
- when $d \geq 1$ and $Q^+(t)$ is isotropic with negative eigenvalues (See Proposition 1.12 of [22]).

We give here another situation where (3.9) is satisfied.

Let us first define Strichartz admissible pairs :

Définition 3.1.8. *A pair (p, q) is admissible if $2 \leq q \leq \frac{2d}{d-2}$ ($2 \leq q < \infty$ if $d = 2$) and*

$$\frac{2}{p} = \delta(q) := d \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{q} \right).$$

We have the following proposition :

Proposition 3.1.9. *Let $d = 2$ or 3 . Assume $\Lambda \geq 0$ and :*

$$|Q^+(t)| + (1 + |t|) \left| \frac{d}{dt} Q^+(t) \right| \leq C(1 + |t|)^{-\kappa_0} \quad (3.10)$$

with $C > 0$ and $\kappa_0 > 2$. We consider u , the solution to the Cauchy problem (3.7). Then, for all $k \in \mathbf{N}$, the following property is satisfied : there exists $C > 0$ such that for all admissible pair (p, q) , we have

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}^d, \quad |\alpha| + |\beta| \leq k, \quad \|x^\alpha \partial_x^\beta u\|_{L^p([0,t], L^q)} \leq C e^{C|t|}, \quad \forall t \in \mathbf{R}.$$

Note that with $p = \infty$ and $q = 2$, we obtain the property (3.9).

Remarque 3.1.10. Let V satisfy Assumption 3.1.1. We denote by E_0 the energy associated with the trajectories and we introduce λ_∞ as the following limit (which exists, thanks to Assumption 3.1.1) :

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \lambda_+(x) = \lambda_\infty.$$

If E_0 is such that $E_0 > \lambda_\infty$, and the trajectory is *nontrapping*, i.e. :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |x^+(t)| = +\infty, \quad (3.11)$$

then $Q^+(t)$ satisfies (3.10). The proof of this statement will be sketched in Section 3.4.

Note that (3.11) implies that $E_0 \geq \lambda_\infty$, so that the assumption $E_0 > \lambda_\infty$ is not a very strong one if (3.11) is satisfied.

Exemple 3.1.11. If we consider the potential V introduced in Example 3.1.2 and if we build trajectories associated with an eigenvalue of V , then it is easy to check that the Hessian Q^+ satisfies : $Q^+(t) = 0$, for $|t|$ large enough, and so that the above proposition is verified in that case. Actually, one can obtain a better control of the profile, than an exponential one : all Strichartz norms of its derivatives are bounded and one obtains a polynomial bound for the momenta (see the Appendix of [22] for details).

We momentarily consider the case $d = 1$. This case is considered in [25] with weaker assumptions on the potential and a similar approximation in large time is proved (at least for $|t| \leq C \log \log(\varepsilon^{-1})$, with a suitable $C > 0$).

However, with a matrix-valued potential under Assumption 3.1.1, one can obtain it up to a better time $t^\varepsilon = C \log(\varepsilon^{-1})$, at same order as the *Ehrenfest time*. Note that in the linear case, this kind of approximation is also valid up to Ehrenfest time (See [17] for details).

Théorème 3.1.12. *Let $d = 1$ and $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$. We denote by w^ε the following quantity:*

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x)\chi^+(x).$$

Then, there exists $C > 0$ independent of ε such that,

$$\sup_{t \leq C \log(\frac{1}{\varepsilon})} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

3.1.4 Nonlinear superposition

In this part, we will study the evolution of solutions associated with initial data corresponding to the superposition of two wave packets. There are several cases to analyse, depending on whether we choose wave packets polarized along same or different eigenvectors (there is actually a technical difference between these cases).

First, we consider two different modes. Let us introduce

$$\psi_0^\varepsilon(x) = \varphi_+^\varepsilon(0, x)\chi^+(x) + \varphi_-^\varepsilon(0, x)\chi^-(x),$$

where φ_+^ε and φ_-^ε are respectively associated with the modes $+$ and $-$ and have the form (3.8), and (x_0^+, ξ_0^+) , (x_0^-, ξ_0^-) are phase space points. We associate with the phase space points (x_0^\pm, ξ_0^\pm) , the classical trajectories $(x^\pm(t), \xi^\pm(t))$, and the action $S^\pm(t)$ associated with $\lambda_\pm(x)$ such that

$$V(x)\chi^\pm(x) = \lambda_\pm(x)\chi^\pm(x).$$

For finite time, we have:

Théorème 3.1.13. *Let $a_\pm \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$ and $\varphi_\pm^\varepsilon(0, x)$ as above. We assume*

$$\Gamma = \inf_{s \in \mathbf{R}} |E_+ - E_- - (\lambda_+(x^+(s)) - \lambda_-(x^-(s)))| > 0.$$

For all $T > 0$ (independent of ε), the function

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi_+^\varepsilon(t, x)\chi^+(x) - \varphi_-^\varepsilon(t, x)\chi^-(x)$$

satisfies

$$\sup_{t \in [0, T]} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

We now choose to superpose two wave packets polarized along the same eigenvector, $\chi^+(x)$: Let

$$\psi_0^\varepsilon(x) = (\varphi_1^\varepsilon(0, x) + \varphi_2^\varepsilon(0, x))\chi^+(x),$$

where φ_1^ε and φ_2^ε have the form (3.8), and $(x_1^+(0), \xi_1^+(0))$, $(x_2^+(0), \xi_2^+(0))$ are phase space points. We assume

$$(x_1^+(0), \xi_1^+(0)) \neq (x_2^+(0), \xi_2^+(0)).$$

Note that without this assumption, we are in the setting of Theorem 3.1.5, with

$$\varphi^\varepsilon(0, x) = \varphi_1^\varepsilon(0, x) + \varphi_2^\varepsilon(0, x).$$

We associate with the phase space points, the classical trajectories

$$(x_1^+(t), \xi_1^+(t)), (x_2^+(t), \xi_2^+(t)),$$

and the actions $S_1^+(t), S_2^+(t)$, associated with $\lambda_+(x)$.

For finite time, we have

Théorème 3.1.14. *Let $a_j \in \mathcal{S}(\mathbf{R}^d)$ and $\varphi_j^\varepsilon(0, x)$ as above, for $j = 1, 2$, and $T > 0$, independent of ε . Then, the function*

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - (\varphi_1^\varepsilon(t, x) + \varphi_2^\varepsilon(t, x)) \chi^+(x)$$

satisfies

$$\sup_{t \in [0, T]} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

For both cases, infinite time poses a problem that will be discussed in Section 3.6. Note that superposition for $d = 1$ in large time case is proved in [25], but the arguments are not valid for $d = 2$ or 3 (see Remark 3.6.5).

We first present the ideas of the proofs of main results, with preliminary discussions. Then, the proofs of main results are given in Section 3.3. Afterwards, the behaviour of the profile u , important for large time case, is discussed in Section 3.4 and the analysis of the one dimensional case is done in Section 3.5. Finally, Section 3.6 is devoted to the proof of superposition results (Theorems 3.1.13 and 3.1.14).

3.2 Preliminaries

3.2.1 About Strichartz estimates

Before beginning the proof, it is crucial to comment the main tool of the proof, the Strichartz estimates. There are two difficulties :

First, because of the presence of two modes, it is impossible to apply the method of the scalar case, used in [26].

Besides, since $d = 2$ or 3, we cannot use energy methods, as it is done in [25], for the one dimensional case.

Thus, we use Strichartz estimates. In the case of a scalar Schrödinger equation, the estimates are available for a scalar external potential, with less restrictive conditions (the potential can be at most quadratic, see [51] and [52] and the discussion in [22]).

In the matrix case, for a potential which is at most quadratic, there is no demonstrated Strichartz estimate for this kind of matrix-valued Schrödinger operator. We choose a weaker potential, satisfying point (i) of Assumption 3.1.1, and for which Strichartz estimates are available.

Notation. For $1 \leq p \leq +\infty$, we denote by p' , the dual exponent :

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1.$$

We infer the following result from [50]:

Théorème 3.2.1. *Let $(p, q), (p_1, q_1), (p_2, q_2)$ be admissible pairs, such that*

$$q, q_1, q_2 \neq 2d/(d-2), \quad (q, q_1, q_2 < \infty \text{ if } d = 2).$$

Let I be a finite time interval. Let us introduce

$$u^\varepsilon(t) = e^{i\frac{t}{\varepsilon}P(\varepsilon)}u_0 \quad \text{and} \quad v^\varepsilon(t) = \int_{I \cap \{s \leq t\}} e^{i\frac{t-\tau}{\varepsilon}P(\varepsilon)} f^\varepsilon(\tau) d\tau.$$

– There exists $C = C(q, |I|)$, independent of ε such that for all $u_0 \in L^2(\mathbf{R}^d)$, we have for all $s \in I$

$$\|u^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q(\mathbf{R}^d))} \leq C\varepsilon^{-1/p} \|u^\varepsilon(s)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}. \quad (3.12)$$

– There exists $C = C(q_1, q_2, |I|)$, independent of ε such that for all $f^\varepsilon \in L^{p'_2}(I, L^{q'_2}(\mathbf{R}^d))$ we have

$$\|v^\varepsilon\|_{L^{p_1}(I, L^{q_1}(\mathbf{R}^d))} \leq C\varepsilon^{-1/p_1 - 1/p_2} \|f^\varepsilon\|_{L^{p'_2}(I, L^{q'_2}(\mathbf{R}^d))}. \quad (3.13)$$

Remarque 3.2.2. Let us first remark that the endpoint $(2, 2d/(d-2))$ ($(2, \infty)$ if $d = 2$) is excluded, as Strichartz estimates in [50] are not demonstrated for this pair. Besides, in [50], the authors actually obtain the estimates with a localization. In view of point (iii), the eigenprojectors are constant for x large enough, and for this reason, we can drop the localization. This point is more explicitly discussed in Remarks 4 and 6 of [50]. Finally, let us emphasize that, thanks to the absence of crossing points, we obtain the same Strichartz estimates as in the scalar case, without any further loss. The estimates in the general case of [50], where the eigenvalues might cross, are weaker. The procedure to obtain (3.12) and (3.13) is sketched in the Appendix 3.7.

3.2.2 Strategy of the proofs of main results

The proofs of Theorems 3.1.5, 3.1.7, 3.1.12, 3.1.13 and 3.1.14 follow the same strategy, that we explain here for Theorem 3.1.5 and Theorem 3.1.7. We will adapt ideas of [25] to our situation.

We study the problem for large time, assuming (3.9).

We first observe that the function φ^ε satisfies the following equation :

$$i\varepsilon\partial_t\varphi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta\varphi^\varepsilon - \lambda^+(x)\varphi^\varepsilon = \Lambda\varepsilon^{1+d/2}|\varphi^\varepsilon|^2\varphi^\varepsilon - \mathcal{R}(t, x)\varphi^\varepsilon, \quad (3.14)$$

with $\varphi_0^\varepsilon(x) = \varepsilon^{-d/4}e^{i\xi_0^+ \cdot (x-x_0^+)/\varepsilon} a\left(\frac{x-x_0^+}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$, for all $x \in \mathbf{R}^d$, and where

$$\mathcal{R}(t, x) = \lambda^+(x) - \lambda^+(x^+(t)) - \nabla\lambda^+(x^+(t))(x - x^+(t)) - \frac{1}{2}\langle Q^+(t)(x - x^+(t)); (x - x^+(t)) \rangle.$$

We denote by w^ε the difference between the exact solution and the approximation,

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x)\chi^+(x),$$

which satisfies $w^\varepsilon|_{t=0} = 0$ (or $w^\varepsilon|_{t=0} = \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma_0})$ in the framework of Remark 3.1.6) and

$$i\varepsilon\partial_t w^\varepsilon(t, x) + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta w^\varepsilon(t, x) - V(x)w^\varepsilon(t, x) = \varepsilon\widetilde{NL}^\varepsilon(t, x) + \varepsilon\widetilde{L}^\varepsilon(t, x),$$

where

$$\begin{aligned} \widetilde{NL}^\varepsilon &= \Lambda\varepsilon^{d/2} (|\psi^\varepsilon|_{\mathbf{G}^2}^2\psi^\varepsilon - |\varphi^\varepsilon|^2\varphi^\varepsilon\chi^+), \\ \widetilde{L}^\varepsilon &= \varepsilon^{-1}\mathcal{R}(t, x)\varphi^\varepsilon\chi^+(x) - \frac{\varepsilon}{2}\varphi^\varepsilon\Delta\chi^+ - d\chi^+\varepsilon\nabla\varphi^\varepsilon. \end{aligned}$$

The aim is to prove that w^ε is small (when ε tends to zero) in H_ε^1 . The source term $\widetilde{L}^\varepsilon$ presents a difficulty as it brings a non-negligible contribution to w^ε . Using (3.9) and (3.4), we can treat the first and the second terms of $\widetilde{L}^\varepsilon$ which give:

$$\varepsilon^{-1}\mathcal{R}\varphi^\varepsilon = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct}), \quad \text{in } L^2(\mathbf{R}^d)$$

and

$$\varepsilon\varphi^\varepsilon\Delta\chi^+ = \mathcal{O}(\varepsilon e^{Ct}), \quad \text{in } L^2(\mathbf{R}^d).$$

Observing that the last term satisfies the following equality:

$$\varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon = i\xi^+(t)\varphi^\varepsilon + \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct}), \quad \text{in } L^2(\mathbf{R}^d).$$

and using (3.6), we infer that the last term of \tilde{L}^ε a priori presents an $\mathcal{O}(1)$ contribution. This is an obstruction to prove that w^ε is small when ε tends to zero. Therefore, in order to get rid of this difficulty, we introduce a correction term which will compensate for it.

We denote by g^ε , the function solving the Schrödinger equation

$$i\varepsilon \partial_t g^\varepsilon(t, x) + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta g^\varepsilon(t, x) - \lambda_-(x)g^\varepsilon(t, x) = r(t, x)\varphi^\varepsilon(t, x) \quad ; \quad g^\varepsilon(0, x) = 0,$$

where

$$r(t, x) = -i \langle d\chi^+(x)\xi^+(t), \chi^-(x) \rangle_{\mathbb{C}^2}. \quad (3.15)$$

Let us remark that the above-mentioned quantity is bounded with bounded derivatives, thanks to (3.4) and (3.6):

$$\forall p \in \mathbf{N}, \forall \alpha \in \mathbf{N}^d, \exists C > 0, \forall t \in \mathbf{R}, \forall x \in \mathbf{R}^d, |\partial_t^p \partial_x^\alpha r(t, x)| \leq C. \quad (3.16)$$

We now set the corrected remainder :

$$\theta^\varepsilon(t, x) = w^\varepsilon(t, x) + \varepsilon g^\varepsilon(t, x)\chi^-(x).$$

This function then solves

$$i\varepsilon \partial_t \theta^\varepsilon(t, x) + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta \theta^\varepsilon(t, x) - V(x)\theta^\varepsilon(t, x) = \varepsilon NL^\varepsilon(t, x) + \varepsilon L^\varepsilon(t, x), \quad \theta^\varepsilon(0, x) = 0, \quad (3.17)$$

with

$$NL^\varepsilon = \Lambda \varepsilon^{d/2} (|\varphi^\varepsilon \chi^+ + \theta^\varepsilon - \varepsilon g^\varepsilon \chi^-|_{\mathbb{C}^2}^2 (\varphi^\varepsilon \chi^+ + \theta^\varepsilon - \varepsilon g^\varepsilon \chi^-) - |\varphi^\varepsilon|^2 \varphi^\varepsilon \chi^+) \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} L^\varepsilon &= \tilde{L}^\varepsilon + \left(i\varepsilon \partial_t g^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta g^\varepsilon - \lambda_-(x)g^\varepsilon \right) \chi^- + \varepsilon^2 d\chi^- \nabla g^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} g^\varepsilon \Delta \chi^-, \\ &= \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct}) + \varepsilon^2 d\chi^- \nabla g^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} g^\varepsilon \Delta \chi^-, \end{aligned} \quad (3.19)$$

where the $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct})$ holds in L^2 .

We now have to study the behaviour of the correction term and its derivatives, since they appear in NL^ε and L^ε . To deal with the nonlinearity, we need to control the L^2 -norm and L^4 -norm of $g^\varepsilon(t)$ and its derivatives; we have the following proposition, which holds for large time; it will be proved in Section 3.3.1.

Proposition 3.2.3. *Assuming (3.9), for $p \in \mathbf{N}$, there exists $C = C(p)$ such that*

$$\|g^\varepsilon(t)\|_{H_x^p} \lesssim e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0.$$

Moreover, for all $\alpha \in \mathbf{N}^d$, there exists $C = C(\alpha)$ such that

$$\|\varepsilon^{|\alpha|} \partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{L^4} \lesssim \varepsilon^{-d/4} e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0.$$

Then, using the control of the eigenvectors (3.4) and the control of g^ε , given by Proposition 3.2.3, we infer

$$\|L^\varepsilon(t)\|_{L^2} = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon}e^{Ct}),$$

where C is independent of ε .

Remarque 3.2.4. In view of Proposition 3.1.4, and Proposition 3.2.3, for all $T > 0$, there exists a constant $C > 0$ independent of ε , such that

$$\|L^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C\varepsilon^{1/2}, \quad \forall t \in [0, T].$$

Besides, we can write Proposition 3.2.3 for finite time intervals, which gives :
Set $T > 0$, then for $p \in \mathbf{N}$, there exists $C = C(T, p)$ such that

$$\|g^\varepsilon(t)\|_{H_x^p} \leq C, \quad \forall t \in [0, T];$$

and for $\alpha \in \mathbf{N}^d$, there exists $C = C(\alpha, T)$ such that

$$\|\varepsilon^{|\alpha|} \partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{L^4} \leq C\varepsilon^{-d/4}, \forall t \in [0, T].$$

These estimates will be useful to deal with finite time intervals.

We give a short summary of the next steps, needed to complete the proofs of Theorems 3.1.5 and 3.1.7, that will be detailed respectively in Section 3.3.2 and Section 3.3.3 :

1. The crucial tool of the proofs are Strichartz estimates : they allow us to deal with the nonlinearity, therefore, we first analyse a Strichartz norm of φ^ε , given by (3.8). This will lead to introduce a bootstrap argument on a Strichartz norm of the remainder θ^ε .
2. Using the bootstrap assumption, Strichartz estimates and inequalities (Hölder, Sobolev injections, Gagliardo-Nirenberg...), we obtain a bound for $\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}$, depending on a power of ε , and t for the large time case.
3. It remains to check the validity of the bootstrap argument, by using the same method as the previous point, to analyse $\|\theta^\varepsilon(t)\|_{H_x^1}$ which will give the Ehrenfest time in the large time case.

3.3 Proof of the main results

In this section, the proof of Proposition 3.2.3, about g^ε , is presented in the following subsection. Then, the final step of the main proof, analysing the behaviour of θ^ε as ε goes to zero is studied in Section 3.3.2 for finite time case, and in Section 3.3.3 for infinite times.

3.3.1 Estimate of the correction term

In this section, we prove Proposition 3.2.3, assuming that we have the exponential control (3.9). The proof of Remark 3.2.4 follows the same lines, in view of Proposition 3.1.4.

In view of the control of the classical trajectories and of the profile u , for all $p \in \mathbf{N}$, there exists $C = C(p)$, such that

$$\|\varphi^\varepsilon(t)\|_{H_x^p} \lesssim e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0. \tag{3.20}$$

Besides, if we have the exponential control of u and of its derivatives, stated in (3.9), we note that $\partial_y^\alpha u(t, \cdot)$ is in L^∞ for all $\alpha \in \mathbf{N}^d$. From this estimate, we infer

$$\forall \alpha \in \mathbf{N}^d, \exists C = C(\alpha), \quad \|\varepsilon^{|\alpha|} \partial_x^\alpha \varphi^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} \lesssim \varepsilon^{-d/4} e^{Ct}. \tag{3.21}$$

Write $U_\pm^\varepsilon(t) = e^{i\frac{t}{\varepsilon} p_\pm(\varepsilon)}$, the semi-group associated with the operator

$$p_\pm(\varepsilon) := -\frac{\varepsilon^2}{2} \Delta + \lambda_\pm(x).$$

We observe that for $p \in \mathbf{N}$, there exists a constant $K = K(p)$ such that

$$\|U_\pm^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{L}(H_x^p)} \lesssim e^{K|t|}. \tag{3.22}$$

For λ_+ and λ_- as in Assumption 3.1.1, we have the following lemma, which will be needed to estimate the correction term g^ε . Note that the crucial point is that the eigenvalues satisfy Point (ii) of Assumption 3.1.1.

Lemme 3.3.1. For $T > 0$, there exists a constant C such that

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall p \in \mathbf{N}, \quad \left\| \frac{1}{i\varepsilon} \int_0^t U_+^\varepsilon(-s) U_-^\varepsilon(s) ds \right\|_{\mathcal{L}(H_\varepsilon^{p+1}, H_\varepsilon^p)} \leq C e^{Ct}.$$

The same estimate remains valid if we permute U_+^ε and U_-^ε .

Proof. This proof follows [25], Lemma 2.2. We first notice that

$$U_+^\varepsilon(-t) U_-^\varepsilon(t) = i\varepsilon U_+^\varepsilon(-t) (\lambda_+ - \lambda_-)^{-1} U_+^\varepsilon(t) \partial_t (U_+^\varepsilon(-t) U_-^\varepsilon(t)).$$

Then, by integration by parts

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\varepsilon} \int_0^t U_+^\varepsilon(-s) U_-^\varepsilon(s) ds &= \left[U_+^\varepsilon(-s) (\lambda_+ - \lambda_-)^{-1} U_-^\varepsilon(s) \right]_0^t \\ &\quad - \int_0^t \partial_s \left(U_+^\varepsilon(-s) (\lambda_+ - \lambda_-)^{-1} U_+^\varepsilon(s) \right) U_+^\varepsilon(-s) U_-^\varepsilon(s) ds. \end{aligned}$$

Write $\gamma = (\lambda_+ - \lambda_-)^{-1}$. Using (3.4), and point (ii) of Assumption 3.1.1, we infer that γ is bounded with bounded derivatives:

$$\forall \alpha \in \mathbf{N}^d, \quad \exists C > 0, \quad |\partial_x^\alpha \gamma(x)| \leq C.$$

Since the propagators map continuously H_ε^p into itself, uniformly with respect to ε , we infer

$$\forall p \in \mathbf{N}, \quad \exists C = C(p), \quad \left\| \left[U_+^\varepsilon(-s) \gamma U_-^\varepsilon(s) \right]_0^t \right\|_{\mathcal{L}(H_\varepsilon^p, H_\varepsilon^p)} \leq C(p) e^{C(p)t}.$$

Besides, we have

$$\begin{aligned} \partial_s \left(U_+^\varepsilon(-s) (\lambda_+ - \lambda_-)^{-1} U_+^\varepsilon(s) \right) &= \frac{1}{i\varepsilon} U_+^\varepsilon(-s) \left[-\frac{\varepsilon^2}{2} \Delta, \gamma \right] U_+^\varepsilon(s), \\ &= U_+^\varepsilon(-s) \left(i\partial_x \gamma(x) \varepsilon \partial_x + i\varepsilon \partial_x^2 \gamma(x) \right) U_+^\varepsilon(s). \end{aligned}$$

Combining :

$$\begin{aligned} \left\| U_+^\varepsilon(-s) \partial_x \gamma(x) \varepsilon \partial_x U_+^\varepsilon(s) \right\|_{\mathcal{L}(H_\varepsilon^{p+1}, H_\varepsilon^p)} &\lesssim e^{Cs}, \\ \text{and } \left\| U_+^\varepsilon(-s) \partial_x^2 \gamma(x) U_+^\varepsilon(s) \right\|_{\mathcal{L}(H_\varepsilon^p, H_\varepsilon^p)} &\lesssim e^{Cs}, \end{aligned}$$

we complete the proof. \square

We now prove Proposition 3.2.3:

Proof of Proposition 3.2.3. We follow the steps of [25], Proposition 2.1.

Let us write $\widetilde{\varphi}^\varepsilon(t, x) = r(t, x) \varphi^\varepsilon(t, x)$, with r given by (3.15). Then we have

$$\begin{aligned} \left(i\varepsilon \partial_t + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta - \lambda_+(x) \right) \widetilde{\varphi}^\varepsilon &= \Lambda \varepsilon^{1+d/2} |\varphi^\varepsilon|^2 r \varphi^\varepsilon - \mathcal{R} r \varphi^\varepsilon + i\varepsilon \partial_t r \varphi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} [\Delta, r] \varphi^\varepsilon, \\ &= \varepsilon f^\varepsilon, \end{aligned}$$

with $f^\varepsilon = \Lambda \varepsilon^{d/2} |\varphi^\varepsilon|^2 r \varphi^\varepsilon + i(\partial_t r) \varphi^\varepsilon + \frac{\varepsilon}{2} [\Delta, r] \varphi^\varepsilon - \varepsilon^{-1} \mathcal{R} r \varphi^\varepsilon$. By Duhamel's formula, we obtain

$$\widetilde{\varphi}^\varepsilon(t) = U_+^\varepsilon(t) \widetilde{\varphi}^\varepsilon(0) - i \int_0^t U_+^\varepsilon(t-s) f^\varepsilon(s) ds.$$

We deduce

$$\begin{aligned} g^\varepsilon(t) &= \frac{1}{i\varepsilon} \int_0^t U_-^\varepsilon(t-s) \widetilde{\varphi}^\varepsilon(s) ds, \\ &= \frac{1}{i\varepsilon} \int_0^t U_-^\varepsilon(t-s) U_+^\varepsilon(s) \widetilde{\varphi}^\varepsilon(0) ds - \int_0^t \frac{1}{\varepsilon} \int_0^s U_-^\varepsilon(t-s) U_+^\varepsilon(s-\tau) f^\varepsilon(\tau) d\tau ds. \end{aligned}$$

We write $U_-^\varepsilon(t-s) = U_-^\varepsilon(t-\tau)U_-^\varepsilon(\tau-s)$ and applying Fubini's theorem, we obtain

$$g^\varepsilon(t) = \frac{1}{i\varepsilon} \int_0^t U_-^\varepsilon(t-s)U_+^\varepsilon(s)\widetilde{\varphi^\varepsilon}(0)ds - \int_0^t \frac{1}{\varepsilon} U_-^\varepsilon(t-\tau) \int_\tau^t U_-^\varepsilon(\tau-s)U_+^\varepsilon(s-\tau)f^\varepsilon(\tau)dsd\tau.$$

Using Lemma 3.3.1, we have

$$\|g^\varepsilon\|_{H_\varepsilon^p} \lesssim e^{Ct} + \int_0^t e^{C(t-\tau)}\|f^\varepsilon(\tau)\|_{H_\varepsilon^{p+1}}d\tau.$$

It remains to study f^ε . We write $f^\varepsilon = f_1^\varepsilon + f_2^\varepsilon$, with

$$f_1^\varepsilon = i(\partial_t r)\varphi^\varepsilon + \frac{\varepsilon}{2}[\Delta, r]\varphi^\varepsilon - \varepsilon^{-1}\mathcal{R}r\varphi^\varepsilon, \quad \text{and} \quad f_2^\varepsilon = \Lambda\varepsilon^{d/2}|\varphi^\varepsilon|^2r\varphi^\varepsilon.$$

By (3.16) and (3.20), it is straightforward that

$$\|f_1^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^{p+1}} \lesssim e^{Ct},$$

provided that (3.9) is satisfied, for $k \leq p+1+3$, to deal with the term $\varepsilon^{-1}\mathcal{R}r\varphi^\varepsilon$.

Besides

$$\begin{aligned} \|f_2^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^{p+1}} &= \varepsilon^{d/2}\|r|\varphi^\varepsilon|^2\varphi^\varepsilon\|_{H_\varepsilon^{p+1}}, \\ &\lesssim \varepsilon^{d/2}\|\varphi^\varepsilon\|_{H_\varepsilon^{p+1}} \sup_{0 \leq |\alpha| \leq p+1} \|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha \varphi^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 \\ &\lesssim \varepsilon^{d/2}(\varepsilon^{-d/4})^2 e^{Ct} \lesssim e^{Ct}, \end{aligned}$$

where we have used the control of φ^ε , (3.20) and (3.21), and the proof is complete.

The proof of the other estimate is based on a Sobolev embedding and on Hölder inequality.

Let $p \in \mathbf{N}$ and $\alpha \in \mathbf{N}^d$, such that $|\alpha| \leq p$. We first notice that $H^{d/4}(\mathbf{R}^d) \hookrightarrow L^4(\mathbf{R}^d)$, and infer

$$\|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{L^4} \leq c\|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{H^{d/4}}.$$

Using the interpolation inequality,

$$\|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{H^{d/4}} \leq c\|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4}\|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{H^1}^{d/4},$$

we write

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{H^1} &= \|\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|\partial_x \left(\varepsilon^{|\alpha|}\partial_x^\alpha g^\varepsilon(t) \right)\|_{L^2}, \\ &\lesssim \|g^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^p} + \varepsilon^{-1}\|g^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^{p+1}}, \end{aligned}$$

and, using the first estimate of Proposition 3.2.3, the proof is complete. \square

3.3.2 End of the proof of Theorem 3.1.5.

We now prove Theorem 3.1.5. In this section, we consider finite time intervals, we will use the estimates of Proposition 3.1.4, which imply Remark 3.2.4. We divide the proof into three steps : first, we will analyse a Strichartz norm of φ^ε , which will lead to introduce a bootstrap argument. Then, using the bootstrap assumption, we will prove the theorem, before checking the validity of the bootstrap in the final step.

Step one :

We recall the equation (3.17) satisfied by the remainder θ^ε :

$$i\varepsilon\partial_t\theta^\varepsilon(t, x) + \frac{\varepsilon^2}{2}\Delta\theta^\varepsilon(t, x) - V(x)\theta^\varepsilon(t, x) = \varepsilon NL^\varepsilon + \varepsilon L^\varepsilon \quad ; \quad \theta^\varepsilon(0, x) = 0,$$

where NL^ε and L^ε are defined in (3.18) and (3.19), respectively. The Duhamel formula gives

$$\begin{aligned}\theta^\varepsilon(t+\tau) &= e^{i\frac{\tau}{\varepsilon}P(\varepsilon)}\theta^\varepsilon(t) - i \int_t^{t+\tau} e^{i\frac{\cdot}{\varepsilon}(t+\tau-s)P(\varepsilon)}NL^\varepsilon(s)ds \\ &\quad - i \int_t^{t+\tau} e^{i\frac{\cdot}{\varepsilon}(t+\tau-s)P(\varepsilon)}L^\varepsilon(s)ds.\end{aligned}$$

We introduce the following Lebesgue exponents:

$$p = \frac{8}{d} \quad ; \quad q = 4 \quad ; \quad \sigma = \frac{8}{4-d}.$$

Then, (p, q) is admissible, and

$$\frac{1}{p'} = \frac{2}{\sigma} + \frac{1}{p} \quad ; \quad \frac{1}{q'} = \frac{3}{4} = \frac{2}{q} + \frac{1}{q}.$$

Let $t \geq 0, 0 < \tau \leq 1$ and $I = [t, t+\tau]$. Strichartz estimates of Theorem 3.2.1 yield

$$\begin{aligned}\varepsilon^{-1/p}\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} &\lesssim \varepsilon^{-1/p}\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \varepsilon^{-1/p}\|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \\ &\quad + \varepsilon^{-2/p}\|NL^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})}.\end{aligned}$$

In view of the pointwise estimate

$$\left| |\varphi^\varepsilon\chi^+ + \theta^\varepsilon - \varepsilon g^\varepsilon\chi^-|_{C^2}^2 - |\varphi^\varepsilon\chi^+ + \theta^\varepsilon - \varepsilon g^\varepsilon\chi^-| - |\varphi^\varepsilon|^2|\varphi^\varepsilon\chi^+| \right| \lesssim (|\varphi^\varepsilon|^2 + |\theta^\varepsilon|^2 + \varepsilon^2|g^\varepsilon|^2)(|\theta^\varepsilon| + |\varepsilon g^\varepsilon|), \quad (3.23)$$

and using Hölder inequality, we infer

$$\begin{aligned}\varepsilon^{-1/p}\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} &\lesssim \\ &\varepsilon^{-1/p}\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \varepsilon^{-1/p}\|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{d/2-2/p} \left(\|\varphi^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 \right. \\ &\quad \left. + \|\theta^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 + \varepsilon^2\|g^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 \right) \left(\|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \varepsilon\|g^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} \right).\end{aligned}$$

We have

$$\|\varphi^\varepsilon(t)\|_{L_x^4} = \varepsilon^{-d/8}\|u(t)\|_{L_y^4} \leq C(T)\varepsilon^{-d/8}, \quad (3.24)$$

with $y = \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}}$. Besides, using Proposition 3.2.3 again, we obtain the estimate

$$\varepsilon^2\|g^\varepsilon(t)\|_{L^4}^2 \leq C(T)\varepsilon^{2-d/2}, \quad (3.25)$$

with $2 - d/2 \geq 1/2$.

Therefore, it is natural to perform a bootstrap argument assuming, say

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} \leq \varepsilon^{-d/8}. \quad (3.26)$$

In the rest of the proof, we will not always mention dependence in T of the constants.

In the following steps, we assume that (3.26) holds on $[0, T]$ and show :

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_1(T)\varepsilon^{1/2}, \quad (3.27)$$

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^p([0, t], L^q)} \lesssim \varepsilon^{1/2-d/8}. \quad (3.28)$$

and

$$\|\varepsilon\nabla\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_2(T)\varepsilon^{1/2}, \quad (3.29)$$

Before proving the previous estimates, we first check that it implies the result: assume (3.27), (3.28) and (3.29), and let

$$t_0 = \inf \left\{ t \geq 0, \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4(\mathbf{R}^d)} \geq \varepsilon^{-d/8} \right\}.$$

Since $\theta^\varepsilon(0) = 0$, $t_0 > 0$. It is easy to see that $t_0 \geq T$: in fact, we argue by contradiction, assuming $t_0 < T$, and using (3.27) and (3.29) in the weighted Gagliardo-Nirenberg inequality, one obtains :

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} \lesssim \varepsilon^{-d/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{d/4} \lesssim \varepsilon^{-d/4} \varepsilon^{1/2}.$$

Since $d = 2, 3$, $1/2 - d/4 > -d/8$ and so

$$\|\theta^\varepsilon(t_0)\|_{L^4} \lesssim \varepsilon^{-d/8+\delta}, \quad \delta > 0,$$

which is a contradiction with

$$\|\theta^\varepsilon(t_0)\|_{L^4} = \varepsilon^{-d/8}, \quad \text{for small } \varepsilon.$$

Step two :

In this step, we assume that (3.26) holds on $[0, T]$ and show (3.27), (3.28).

As long as (3.26) holds, we have

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1/p} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} &\lesssim \varepsilon^{-1/p} \|\theta^\varepsilon(s)\|_{L^2} + \varepsilon^{-1/p} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \\ &\quad + \tau^{2/\sigma} (\|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)}). \end{aligned}$$

where $s \in [t, t + \tau]$, can be different from t , thanks to the mass-conservation and where we have used (3.24), (3.25) and (3.26), with

$$\frac{d}{2} - \frac{2}{p} - \frac{2d}{8} = 0.$$

Integrating in s , between t and $t + \tau$, we get

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1/p} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} &\lesssim \varepsilon^{-1/p} \tau^{-1} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-1/p} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \\ &\quad + \tau^{2/\sigma} (\|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)}). \end{aligned}$$

We choose $\tau \ll 1$ and from now, $\tau > 0$ is fixed, so that τ^{-1} is a constant. We recover the interval $[0, t]$ for some $t \leq T$, with a finite number of intervals of the form $[j\tau, (j+1)\tau]$ and obtain

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1/p} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t], L^2)} + \|\theta^\varepsilon\|_{L^p([0, t], L^q)} &\lesssim \varepsilon^{-1/p} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} \\ &\quad + \varepsilon^{-1/p} \|L^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} + \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^p([0, t], L^q)}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Thanks to (3.25) and under (3.26), we obtain

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t], L^2)} \lesssim \|L^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} + \varepsilon^{1-d/8} + \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)}. \quad (3.31)$$

We use the following estimate, given in Remark 3.2.4, for $t \in [0, T]$:

$$\|L^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} \lesssim \varepsilon^{1/2}.$$

We notice that $1/2 \leq 1 - d/8$, for $d = 2, 3$, and we infer

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t], L^2)} \lesssim \varepsilon^{1/2} + \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)}. \quad (3.32)$$

By Gronwall Lemma, we obtain the estimate (3.27). Combining (3.30) and (3.32), we obtain the announced estimate (3.28), under (3.26), which concludes this step.

Step three:

It remains to check how long the bootstrap assumption (3.26) holds. For this, we look for a control of $\theta^\varepsilon(t)$ in H_x^1 . We differentiate the system (3.17) with respect to x , and we find

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t(\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon) + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta(\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon) - V(x) \varepsilon \nabla \theta^\varepsilon &= \varepsilon \nabla V(x) \theta^\varepsilon + \varepsilon^2 \nabla N L^\varepsilon + \varepsilon^2 \nabla L^\varepsilon, \\ \varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(0, x) &= 0. \end{cases}$$

Using Strichartz estimates again, we find

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} &\lesssim \varepsilon^{-1/p} (\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(s)\|_{L^2} + \|\nabla V \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)}) \\ &\quad + \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-2/p} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})}. \end{aligned}$$

We observe that, thanks to Assumption 3.1.1, $|\nabla V(x)| \leq C$. Besides, by Remark 3.2.4, we have

$$\|\varepsilon \nabla L^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \sqrt{\varepsilon}, \quad \text{for } 0 \leq t \leq T. \quad (3.33)$$

The only remaining point concerns the term $\varepsilon \nabla N L^\varepsilon$. We have

$$|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon| \lesssim \varepsilon^{d/2} (|\varphi^\varepsilon|^2 + |\theta^\varepsilon|^2 + \varepsilon^2 |g^\varepsilon|^2) (|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon| + \varepsilon^2 |\nabla(g^\varepsilon \chi^-)|) + \varepsilon^{d/2} |\varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon| |\varphi^\varepsilon| (|\theta^\varepsilon| + \varepsilon |g^\varepsilon|).$$

We notice that

$$\|\varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon(t)\|_{L^4} \lesssim \varepsilon^{1/2-d/8} \|\nabla u(t)\|_{L^4} + \varepsilon^{-d/8} \|u(t)\|_{L^4} \lesssim C(T) \varepsilon^{-d/8},$$

using Proposition 3.1.4, with $1/2 - d/8 > 0$, we infer by (3.24)

$$\|\varphi^\varepsilon \times \varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{-d/4}. \quad (3.34)$$

Then, we can write, thanks to Hölder inequality :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-2/p} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})} &\lesssim \varepsilon^{d/2-2/p} \left(\|\varphi^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 + \|\theta^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 + \varepsilon^2 \|g^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^q)}^2 \right) \\ &\quad \left(\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \varepsilon^2 \|\nabla(g^\varepsilon \chi^-)\|_{L^p(I, L^q)} \right) \\ &\quad + \varepsilon^{d/2-2/p} \|\varphi^\varepsilon \varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon\|_{L^{\sigma/2}(I, L^2)} \left(\|\theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} \right) \end{aligned}$$

The first part is handled as before, using estimates (3.24), (3.25) and (3.26). For the second part, using (3.28) instead of (3.26), we find

$$\varepsilon^{-2/p} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})} \lesssim \tau^{2/\sigma} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} + \tau^{2/\sigma} \varepsilon^{1/2-d/8},$$

where we have used that $d/2 - 2/p - d/4 = 0$. We infer for $s \in I$:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} &\lesssim \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(s)\|_{L^2} + \varepsilon^{-1/p} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \\ &\quad + \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \tau^{2/\sigma} \varepsilon^{1/2-d/8} + \tau^{2/\sigma} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)}. \end{aligned}$$

By integration on I , we obtain :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)} &\lesssim \varepsilon^{-1/p} \tau^{-1} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-1/p} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \\ &\quad + \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \tau^{2/\sigma} \varepsilon^{1/2-d/8} + \tau^{2/\sigma} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p(I, L^q)}. \end{aligned}$$

We choose τ sufficiently small to absorb the last term, and repeating this procedure a finite number of times, to recover $[0, T]$, we obtain

$$\varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, T], L^2)} + \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p([0, T], L^q)} \lesssim \varepsilon^{-1/p} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1([0, T], L^2)} + \varepsilon^{1/2-d/8}, \quad (3.35)$$

where we have used (3.27), (3.33) and that

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, T], L^2)} + \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1([0, T], L^2)} \lesssim \varepsilon^{1/2}.$$

Using (3.27), (3.33) and (3.35), we now have

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t], L^2)} \lesssim \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} + \varepsilon^{1/2}, \quad \forall t \in [0, T]. \quad (3.36)$$

Then, using Gronwall lemma, we obtain (3.29):

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2}, \quad \forall t \in [0, T].$$

Gagliardo-Nirenberg inequality then implies

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{d/4}, \\ &\lesssim \varepsilon^{-d/4+1/2} \lesssim \varepsilon^{-d/8} \varepsilon^{1/2-d/8}, \end{aligned}$$

with $1/2 - d/8 > 0$ because $d \leq 3$. We infer that (3.26) holds for finite time. This concludes the bootstrap argument and we infer

$$\sup_{0 \leq t \leq T} (\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Theorem 3.1.5 then follows using Proposition 3.2.3 and the relation $\theta^\varepsilon = w^\varepsilon + \varepsilon g^\varepsilon \chi^-$.

Remarque 3.3.2. If the initial datum is such that :

$$\psi_0^\varepsilon(x) = \varepsilon^{-d/4} e^{i\xi_0^+ \cdot (x-x_0^+)/\varepsilon} a \left(\frac{x-x_0^+}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \chi^+(x) + \eta^\varepsilon(x),$$

with $\eta^\varepsilon(x) + \varepsilon \nabla \eta^\varepsilon(x) = \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma_0})$ in L^2 , the initial terms $\theta^\varepsilon(0, x)$ presents a $\mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma_0})$ contribution in H_ε^1 . Performing the same bootstrap argument (3.26), we obtain for $t \in [0, T]$:

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^p([0,t], L^q)} \lesssim \varepsilon^{1/2-d/8} + \varepsilon^{-d/8+\gamma_0},$$

and this gives

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0,t], L^2)} \leq C(T) \left(\varepsilon^{1/2} + \varepsilon^{\gamma_0} \right).$$

The estimate for the derivative writes :

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^p([0,t], L^q)} \lesssim \varepsilon^{1/2-d/8} + \varepsilon^{-d/8+\gamma_0} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1([0,t], L^2)},$$

and finally, by Gronwall Lemma, for $t \in [0, T]$:

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C(T) \left(\varepsilon^{1/2} + \varepsilon^{\gamma_0} \right).$$

Gagliardo-Nirenberg inequality then gives

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^q} &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{d/4} \\ &\lesssim \varepsilon^{-d/8} \varepsilon^{1/2-d/8} + \varepsilon^{\gamma_0-d/8}, \end{aligned}$$

with $1/2 - d/8 > 0$ for $d \leq 3$ and $\gamma_0 > d/8$. This implies that the bootstrap argument (3.26) holds for finite time, whence the result of Remark 3.1.6.

Let us notice that the proof of Theorem 3.1.5 crucially relies on the result of Proposition 3.1.4, for $k \leq 6$. Therefore, in order to deal with large times, we need to have the exponential control (3.9).

3.3.3 Large time case

Our aim is now to prove Theorem 3.1.7 and to find that the approximation holds until $T^\varepsilon = C \log \log(\varepsilon^{-1})$, for some suitable $C > 0$.

We assume that we have the exponential control (3.9) for $k \leq 6$, which gives us the following estimate on $\varphi^\varepsilon(t)$:

$$\|\varphi^\varepsilon(t)\|_{L^4(\mathbf{R}^d)} \lesssim \varepsilon^{-d/8} e^{Ct}.$$

Therefore, we make the following bootstrap assumption on $\theta^\varepsilon(t)$:

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4(\mathbf{R}^d)} \leq \varepsilon^{-d/8} e^{Ct}, \quad t \in [0, T^\varepsilon]. \quad (3.37)$$

We have the following lemma :

Lemma 3.3.3. *Let $\delta_0 > 0$ a small constant. Then, there exist $c > 0$ and $\varepsilon_0 > 0$ such that, if $T^\varepsilon \leq c \log \log(\varepsilon^{-1})$ and (3.37) holds, uniformly for $\varepsilon \in]0, \varepsilon_0]$, then we have the following estimates : $\forall \varepsilon \in]0, \varepsilon_0]$ and $\forall t \in [0, T^\varepsilon]$,*

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2-\delta_0}, \quad (3.38)$$

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}([0,t],L^4)} \lesssim \varepsilon^{1/2-d/8-2\delta_0}, \quad (3.39)$$

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2-3\delta_0}. \quad (3.40)$$

Before writing the proof of this lemma, we first check that it implies the result by a bootstrap argument: assume Lemma 3.3.3 and let

$$t^\varepsilon = \inf \left\{ t \geq 0; \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4(\mathbf{R}^d)} \geq \varepsilon^{-d/8} e^{Ct} \right\},$$

where $C > 0$ is independent of ε and comes from the exponential control of φ^ε and the bootstrap assumption (3.37). Note that since $\theta^\varepsilon(0) = 0$, we have $t^\varepsilon > 0$. We show that $t^\varepsilon \geq T^\varepsilon$, which will yield the desired result; we argue by contradiction :

Assume $t^\varepsilon < T^\varepsilon$, then, using (3.38) and (3.40) from Lemma 3.3.3, the weighted Gagliardo-Nirenberg inequality gives :

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{d/4}, \\ &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \varepsilon^{1/2} \varepsilon^{-\delta_0-d\delta_0/2}. \end{aligned}$$

Choosing δ_0 such that

$$\frac{1}{2} - \frac{d}{4} - \delta_0 - \frac{d\delta_0}{2} > \frac{-d}{8},$$

that is to say $\delta_0 < (4-d)/(4d+8)$, which is possible since $d = 2$ or 3 , we have

$$\|\theta^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^4} \lesssim \varepsilon^{-d/8+\delta_1},$$

for some $\delta_1 > 0$. This is a contradiction with the fact that, for small ε , we have

$$\|\theta^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^4} = \varepsilon^{-d/8} e^{Ct^\varepsilon}.$$

It remains to prove Lemma 3.3.3.

Proof of (3.38) and (3.39)

Let $I = [t, t + \tau] \subset [0, T^\varepsilon]$, where $\tau = \tau(\varepsilon) \leq 1$ will be specified later. For $s \in I$, Strichartz estimates for $(8/d, 4)$ and $(\infty, 2)$, and Hölder inequality yield :

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I,L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I,L^2)} &\lesssim \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon(s)\|_{L^2} + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I,L^2)} + \varepsilon^{d/4} \|NL^\varepsilon\|_{L^{p'}(I,L^{q'})}, \\ &\lesssim \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon(s)\|_{L^2} + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I,L^2)} + \varepsilon^{d/4} \left(\|\varphi^\varepsilon\|_{L^\sigma(I,L^4)}^2 \right. \\ &\quad \left. + \|\theta^\varepsilon\|_{L^\sigma(I,L^4)}^2 + \varepsilon^2 \|g^\varepsilon\|_{L^\sigma(I,L^4)}^2 \right) \left(\|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I,L^4)} + \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I,L^4)} \right). \end{aligned}$$

Then we use the estimate on φ^ε , and choosing a larger C if necessary, we get by integration in s :

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I,L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I,L^2)} &\leq K \left[\tau^{-1} \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I,L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I,L^2)} \right. \\ &\quad \left. + \tau^{2/\sigma} e^{2Ct} \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I,L^4)} + \tau^{2/\sigma+d/8} e^{Ct} \varepsilon^{1-d/4} \right], \end{aligned}$$

with K independent of ε , and where we have used Proposition 3.2.3 to estimate the norms of g^ε .

We want to have the term $K\tau^{2/\sigma} e^{2Ct} \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I,L^4)}$ be absorbed by the left hand side. We first notice that for $t \leq c \log \log(\varepsilon^{-1})$, we have

$$K\tau^{2/\sigma} e^{2Ct} \leq K\tau^{2/\sigma} (\log(\varepsilon^{-1}))^{2Cc}.$$

We choose τ such that

$$K\tau^{2/\sigma} (\log(\varepsilon^{-1}))^{2C_c} = \frac{1}{2}, \quad \text{which gives } \tau = \left[\frac{1}{2K (\log(\varepsilon^{-1}))^{2C_c}} \right]^{\sigma/2}.$$

We then obtain

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} &\lesssim \tau^{-1} \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \\ &\quad + \tau^{2/\sigma+d/8} e^{Ct} \varepsilon^{1-d/4}. \end{aligned}$$

For $t' \leq T^\varepsilon$, we recover $[0, t']$ with at most J^ε intervals of size τ , with

$$J^\varepsilon = \frac{2T^\varepsilon}{\tau},$$

and choosing c sufficiently small, we have :

$$J^\varepsilon \lesssim (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2}.$$

We notice that τ^{-1} is controlled by $(\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2}$.

We now write

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}([0, t'], L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t'], L^2)} &\lesssim (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \left[\varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} + \varepsilon^{1-d/4} e^{Ct'} \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

and for the admissible pair $(\infty, 2)$, we get

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t'], L^2)} \lesssim (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \left[\|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} + \|L^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} + \varepsilon^{1-d/8} e^{Ct'} \right].$$

We recall that

$$\|L^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \sqrt{\varepsilon} e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0,$$

and since $1 - d/8 > 1/2$, we can neglect the last term :

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t'], L^2)} \lesssim (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \left[\|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} + \|L^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} \right].$$

Then Gronwall lemma yields

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_1 \varepsilon^{1/2} e^{Ct} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} e^{C_2 t (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2}}, \quad \text{for } t \leq T^\varepsilon,$$

where C_1 and C_2 are constants independent of ε . Note that for c and ε_0 sufficiently small, and when $\varepsilon \in]0, \varepsilon_0[$, we have

$$\begin{aligned} e^{C_2 t (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2}} &\leq e^{C_2 \log(\varepsilon^{-1})^{1/2} c \log \log(\varepsilon^{-1})} \\ &\leq e^{\delta_0 \log(\varepsilon^{-1})/10} \\ &\leq \varepsilon^{-\delta_0/10}. \end{aligned}$$

Using similar arguments for the other factors, we obtain (3.38).

Going back to (3.41), we get (3.39) using (3.38).

Proof of (3.40)

Strichartz estimates with admissible pairs $(8/d, 4)$ and $(\infty, 2)$ yield :

$$\begin{aligned} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} &\lesssim \varepsilon^{-d/8} (\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(s)\|_{L^2} + \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)}) \\ &\quad + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon (\nabla V) \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-d/4} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})}. \end{aligned}$$

Thanks to Hölder inequality, the nonlinear term writes :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-d/4} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})} &\lesssim \varepsilon^{d/4} \left(\|\varphi^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^4)}^2 + \|\theta^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^4)}^2 + \varepsilon^2 \|g^\varepsilon\|_{L^\sigma(I, L^4)}^2 \right) \\ &\quad \left(\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \varepsilon^2 \|\nabla(g^\varepsilon \chi^-)\|_{L^{8/d}(I, L^4)} \right) \\ &\quad + \varepsilon^{d/4} \|\varphi^\varepsilon \varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon\|_{L^{\sigma/2}(I, L^2)} \left(\|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} \right). \end{aligned}$$

We first notice that, thanks to Proposition 3.2.3, and the control of χ^- , given by (3.4), we have :

$$\varepsilon^2 \|\nabla(g^\varepsilon \chi^-)\|_{L^{8/d}(I, L^4)} \lesssim \varepsilon^{2-d/4} e^{Ct} \tau^{d/8}, \quad \text{and} \quad \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} \lesssim \varepsilon^{1-d/4} e^{Ct} \tau^{d/8}.$$

Besides, we recall that (3.34) in large time gives :

$$\|\varphi^\varepsilon \cdot \varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon\|_{L^{\sigma/2}(I, L^2)} \lesssim \varepsilon^{-d/4} e^{Ct} \tau^{2/\sigma}.$$

Then, by (3.39) and Proposition 3.2.3 again, we have

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-d/4} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{p'}(I, L^{q'})} &\lesssim \tau^{2/\sigma} e^{2Ct} \left(\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \varepsilon^{2-d/4} e^{Ct} \tau^{d/8} \right) \\ &\quad + \tau^{2/\sigma} e^{Ct} \left(\varepsilon^{1/2-d/8-2\delta_0} + \varepsilon^{1-d/4} e^{Ct} \tau^{d/8} \right). \end{aligned}$$

We neglect the terms brought by the correction term g^ε since their contributions are smaller than the other terms. Then, by integration in s , this gives the following estimate

$$\begin{aligned} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} &\lesssim \\ \tilde{K} \left[\varepsilon^{-d/8} \tau^{-1} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon (\nabla V) \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \right. \\ &\quad \left. + \tau^{2/\sigma} e^{2Ct} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \tau^{2/\sigma} e^{Ct} \varepsilon^{1/2-d/8-2\delta_0} \right] \end{aligned}$$

With $t \leq c' \log \log(\varepsilon^{-1})$, we choose τ such that :

$$\tilde{K} \tau^{2/\sigma} (\log(\varepsilon^{-1}))^{2Cc'} = \frac{1}{2}, \quad \text{which gives} \quad \tau = \left[\frac{1}{2\tilde{K} (\log(\varepsilon^{-1}))^{2Cc'}} \right]^{\sigma/2}.$$

The term with $\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)}$ is now absorbed by the left hand side, then we get

$$\begin{aligned} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}(I, L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} &\lesssim \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon (\nabla V) \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \\ &\quad + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \tau^{2/\sigma} e^{Ct} \varepsilon^{1/2-d/8-2\delta_0} \end{aligned}$$

For $t' \leq T^\varepsilon$, we recover $[0, t']$ with at most \tilde{J}^ε intervals of size τ , where $\tilde{J}^\varepsilon = 2T^\varepsilon \tau^{-1}$. Choosing c' sufficiently small, we have

$$\tilde{J}^\varepsilon \lesssim (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2}.$$

We notice that since $\tau^{-1} \leq \tilde{J}^\varepsilon$, we have $\tau^{-1} \leq (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2}$. Using $|\nabla V(x)| \lesssim 1$ because of Assumption 3.1.1, (3.38) and

$$\|\varepsilon \nabla L^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \sqrt{\varepsilon} e^{Ct},$$

we now write

$$\begin{aligned} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}([0, t'], L^4)} + \varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t'], L^2)} &\lesssim \\ (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \left[\varepsilon^{-d/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} + \varepsilon^{1/2-d/8} e^{Ct'} + \varepsilon^{1/2-d/8-2\delta_0} (1 + e^{Ct'}) \right]. \end{aligned}$$

For $(\infty, 2)$ only, we get

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t'], L^2)} \lesssim (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \left[\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t'], L^2)} + \varepsilon^{1/2-2\delta_0} (1 + e^{Ct'}) \right].$$

Then, Gronwall lemma yields :

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2-2\delta_0} (1 + e^{Ct}) (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} e^{(\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} t}, \quad \text{for } t \leq T^\varepsilon.$$

We notice that for $c > 0$ small enough, and for $t \leq c \log \log(\varepsilon^{-1})$, the following estimate holds :

$$e^{Ct} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \lesssim \log(\varepsilon^{-1}),$$

and the last term has been studied before; then

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2-\delta_0} \varepsilon^{-\delta_0/10} \log(\varepsilon^{-1}),$$

and we get (3.40). The proof of Theorem 3.1.7 is now complete.

Remarque 3.3.4. In order to deal with initial data which are perturbation of wave packets, as in Remark 3.1.6, but in large time case, we have to check how long the bootstrap argument holds with new terms appearing from η^ε . We have to show :

Let $\delta_1 > 0$ a small constant. Then, there exist $c > 0$ and $\varepsilon_0 > 0$ such that, if $T^\varepsilon \leq c \log \log(\varepsilon^{-1})$ and (3.37) holds, uniformly for $\varepsilon \in]0, \varepsilon_0]$, then we have the following estimates :
 $\forall \varepsilon \in]0, \varepsilon_0]$ and $\forall t \in [0, T^\varepsilon]$,

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\lesssim \varepsilon^{1/2-\delta_1} + \varepsilon^{\gamma_0-\delta_1}, \\ \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}([0, t], L^4)} &\lesssim \varepsilon^{1/2-d/8-\delta_1} + \varepsilon^{\gamma_0-d/8-\delta_1}, \\ \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\lesssim \varepsilon^{1/2-\delta_1} + \varepsilon^{\gamma_0-\delta_1}. \end{aligned}$$

- If these estimates are true, then : let

$$t^\varepsilon = \inf \left\{ t \geq 0; \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4(\mathbf{R}^d)} \geq \varepsilon^{-d/8} e^{Ct} \right\}.$$

Note that because of

$$\theta^\varepsilon(0) = \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma_0}), \quad \text{in } H_\varepsilon^1$$

and $\varepsilon^{\gamma_0} < \varepsilon^{-d/8}$ since $\varepsilon \leq 1$, we have $t^\varepsilon > 0$. We show that $t^\varepsilon \geq T^\varepsilon$; we argue by contradiction: Assume $t^\varepsilon < T^\varepsilon$, then, using the estimates on θ^ε , the weighted Gagliardo-Nirenberg inequality gives:

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1-d/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{d/4}, \\ &\lesssim \varepsilon^{-d/4} \left(\varepsilon^{1/2-\delta_1} + \varepsilon^{\gamma_0-\delta_1} \right). \end{aligned}$$

Choosing δ_1 such that

$$\frac{1}{2} - \frac{d}{4} - \delta_1 > \frac{-d}{8}, \quad \text{and} \quad \gamma_0 - \frac{d}{4} - \delta_1 > \frac{-d}{8}$$

which is possible since $d = 2$ or 3 and $\gamma_0 > d/8$, we have

$$\|\theta^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^4} \lesssim \varepsilon^{-d/8+\delta},$$

for some $\delta > 0$. This is a contradiction with the fact that, for small ε , we have

$$\|\theta^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^4} = \varepsilon^{-d/8} e^{Ct^\varepsilon}.$$

Let us now prove the estimates on the remainder. We recall that

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/d}([0,t'],L^4)} \lesssim (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \left[\varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \varepsilon^{1-d/4} e^{Ct'} \right],$$

for $t' \leq T^\varepsilon$. Thanks to Strichartz estimates, Hölder inequality, we obtain

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0,t'],L^2)} &\lesssim \|\theta^\varepsilon(0)\|_{L^2} + \|L^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|NL^\varepsilon\|_{L^{p'}([0,t'],L^{q'})} \\ &\lesssim \|\theta^\varepsilon(0)\|_{L^2} + \|L^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \varepsilon^{d/8} e^{Ct'} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \\ &\quad \times \left[\varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \varepsilon^{1-d/4} e^{Ct'} \right]. \end{aligned}$$

But, $t' \leq T^\varepsilon$, so

$$\begin{aligned} e^{Ct'} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} &\leq e^{Cc \log \log(\varepsilon^{-1})} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \\ &\leq \log(\varepsilon^{-1}), \end{aligned}$$

for c small enough. We obtain :

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0,t'],L^2)} &\lesssim \|\theta^\varepsilon(0)\|_{L^2} + \varepsilon^{d/8} \log(\varepsilon^{-1}) \left[\varepsilon^{-d/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon^{-d/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \varepsilon^{1-d/4} e^{Ct'} \right] + \|L^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} \\ &\lesssim \varepsilon^{\gamma_0} + \log(\varepsilon^{-1}) \left[\|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0,t'],L^2)} + \sqrt{\varepsilon} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} \right] \\ &\quad + \sqrt{\varepsilon} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2}. \end{aligned}$$

Finally, Gronwall lemma yields

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\leq C_0 \left(\varepsilon^{\gamma_0} + \sqrt{\varepsilon} (\log(\varepsilon^{-1}))^{1/2} (1 + \log(\varepsilon^{-1})) \right) e^{C_1 \log(\varepsilon^{-1})t} \\ &\lesssim \varepsilon^{1/2-\delta_1} + \varepsilon^{\gamma_0-\delta_1}, \end{aligned}$$

for $\delta_1 > 0$ chosen small, to apply similar arguments as in the previous proof. Then, using this estimate with $\delta_1/2$, we obtain the second estimate we wanted to prove.

Using the same method for $\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon$, should it change δ_1 , we have

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^{1/2-\delta_1} + \varepsilon^{\gamma_0-\delta_1}.$$

3.4 Growth of Sobolev norms and momenta of the profile

We will focus on the behaviour of $u(t)$ for large time and prove Proposition 3.1.9, which gives an additional case where Theorem 3.1.7 holds.

We first recall some results that follow from [52] (see Theorem 2.2 and Corollary 2.7 of this paper) and [77].

We consider Q^+ satisfying

$$\sup_{t \in \mathbf{R}} |Q^+(t)| < +\infty,$$

then, the following (local in time) Strichartz estimates hold.

Proposition 3.4.1 (Strichartz estimates for quadratic potentials). *Let (p, q) , (p_1, q_1) be admissible pairs, defined in Definition 3.1.8. Let I be a finite time interval. We consider u , the solution to*

$$i\partial_t u + \frac{1}{2} \Delta u - \frac{1}{2} \langle Q^+(t)x; x \rangle u = f \quad ; \quad u(0, x) = u_0(x).$$

where $u_0 \in L^2(\mathbf{R}^d)$ and $f \in L^{p_1}(I, L^{q_1})$. Then, there exists $C = C(q, q_1, |I|)$, such that for all $s \in I$

$$\|u\|_{L^p(I, L^q)} \leq C \|u_0\|_{L^2} + \|f\|_{L^{p_1}(I, L^{q_1})} = C \|u(s)\|_{L^2} + \|f\|_{L^{p_1}(I, L^{q_1})}.$$

Remarque 3.4.2. Note that these results are given in [52] for *at most quadratic potentials* and not only quadratic potentials, as it is done in the previous Proposition.

Besides related works are presented in [103] and [104], for Schrödinger equations, with (time independent) *superquadratic* potentials. For the criticality of *quadratic* potentials, see [102].

We prove the following lemma, since it is the first step of the proof of Proposition 3.1.9.

Lemme 3.4.3. *Let $d = 2$ or 3 . Assume $\Lambda \geq 0$ and :*

$$|Q^+(t)| + (1 + |t|) \left| \frac{d}{dt} Q^+(t) \right| \leq C(1 + |t|)^{-\kappa_0}$$

with $C > 0$ and $\kappa_0 > 2$. We consider u , the solution to the Cauchy problem (3.7). Then, there exist $C_1, C_2 > 0$ and $\gamma > 0$ such that

$$\|\nabla u(t)\|_{L^2} \leq C_1, \quad \|xu(t)\|_{L^2} \leq C_2(1 + |t|)^{\gamma+1}.$$

Moreover

$$\|\nabla u\|_{L^p([0,t],L^q)} + \|xu\|_{L^p([0,t],L^q)} \lesssim (1 + |t|)^{\gamma+2}.$$

Proof. We use an energy argument and set

$$E(t) = \frac{1}{2} \|\nabla u(t)\|_{L^2}^2 + \frac{\Lambda}{4} \|u(t)\|_{L^4}^4 + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^d} \langle Q^+(t)x, x \rangle |u(t, x)|^2 dx,$$

and

$$V(t) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^d} |x|^2 |u(t, x)|^2 dx.$$

We have :

$$E'(t) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^d} \left\langle \frac{d}{dt} Q^+(t)x; x \right\rangle |u(t, x)|^2 dx,$$

$$V'(t) = 2 \operatorname{Im} \int_{\mathbf{R}^d} (x \cdot \nabla u(t, x)) \bar{u}(t, x) dx.$$

We introduce the following quantity :

$$A(t) = E(t) + \frac{\tilde{C}}{(1 + |t|)^{2+\delta}} V(t),$$

with $\delta > 0$. For \tilde{C} large enough and choosing $\delta \ll 1$ such that $2 < 2 + \delta < \kappa_0$, we obtain

$$A(t) \geq \frac{1}{2} \|\nabla u(t)\|_{L^2}^2 + \frac{1}{4} \|u(t)\|_{L^4}^4 + \frac{1}{(1 + |t|)^{2+\delta}} V(t).$$

Then, using all these estimates, we have :

$$E'(t) \lesssim \frac{1}{(1 + |t|)^{\kappa_0+1}} V(t) \quad ; \quad V(t) \leq (1 + |t|)^{2+\delta} A(t);$$

we then recall that

$$|V'(t)| \lesssim V(t)^{1/2} A(t)^{1/2},$$

and combining these estimates, we obtain

$$\begin{aligned} A'(t) &= E'(t) + \frac{\tilde{C}}{(1 + |t|)^{2+\delta}} V'(t) - \frac{\tilde{C}(2 + \delta)}{(1 + |t|)^{3+\delta}} V(t), \\ &\leq E'(t) + \frac{\tilde{C}}{(1 + |t|)^{2+\delta}} V'(t), \\ &\leq \left(\frac{C}{(1 + |t|)^{\kappa_0-1-\delta}} + \frac{C}{(1 + |t|)^{1+\delta/2}} \right) A(t), \\ &\leq \frac{C}{(1 + |t|)^{1+\delta}} A(t), \end{aligned}$$

for some $\tilde{\delta} > 0$. By Gronwall Lemma, we find $|A(t)| \leq C$, whence

$$\|\nabla u(t)\|_{L^2} \leq C, \quad \|xu(t)\|_{L^2} \leq C(1 + |t|)^{1+\gamma}, \quad (3.42)$$

where $\gamma > 0$. And since $\|u(t)\|_{L^4}^4 \leq A(t)$, we deduce

$$\|u(t)\|_{L^4} \leq C.$$

Besides, the derivative and the first momentum of u satisfy the following equations:

$$i\partial_t(\nabla u) + \frac{1}{2}\Delta(\nabla u) - \frac{1}{2}\langle Q^+(t)x; x \rangle(\nabla u) = Q^+(t)xu + \Lambda\nabla(|u|^2u),$$

and

$$i\partial_t(xu) + \frac{1}{2}\Delta(xu) - \frac{1}{2}\langle Q^+(t)x; x \rangle(xu) = \nabla u + \Lambda|u|^2(xu).$$

We set $I = [t, t + \tau]$, with $t \geq 0$, $\tau > 0$, and (p, q) any admissible pair. We recall that $(8/d, 4)$ is the admissible pair introduced in the previous proofs, and $\sigma = 8/(4 - d)$, which will be useful for the absorption argument. We have, thanks to Strichartz estimates given in Proposition 3.4.1 :

$$\begin{aligned} \|\nabla u\|_{(L^p(I, L^q)) \cap (L^{8/d}(I, L^4))} & \\ & \lesssim \|\nabla u(t)\|_{L^2} + \|Q^+(t)xu\|_{L^1(I, L^2)} + \|\nabla(|u|^2u)\|_{L^{8/(8-d)}(I, L^{4/3})} \\ & \lesssim \|\nabla u(t)\|_{L^2} + \|xu\|_{L^1(I, L^2)} + \|u\|_{L^\sigma(I, L^4)}^2 \|\nabla u\|_{L^{8/d}(I, L^4)} \\ & \lesssim \|\nabla u(t)\|_{L^2} + \|xu\|_{L^1(I, L^2)} + \tau^{2/\sigma} \|u\|_{L^\infty(I, H^1)}^2 \|\nabla u\|_{L^{8/d}(I, L^4)}, \end{aligned}$$

where we have used Hölder inequality and the Sobolev embedding (with $d \leq 4$). Then we have by (3.42)

$$\|\nabla u\|_{(L^p(I, L^q)) \cap (L^{8/d}(I, L^4))} \lesssim \|\nabla u(t)\|_{L^2} + \|xu\|_{L^1(I, L^2)} + \tau^{2/\sigma} \|\nabla u\|_{L^{8/d}(I, L^4)}. \quad (3.43)$$

Similarly, we have :

$$\begin{aligned} \|xu\|_{(L^p(I, L^q)) \cap (L^{8/d}(I, L^4))} & \lesssim \|xu(t)\|_{L^2} + \|\nabla u\|_{L^1(I, L^2)} + \||u|^2(xu)\|_{L^{8/(8-d)}(I, L^{4/3})} \\ & \lesssim \|xu(t)\|_{L^2} + \|\nabla u\|_{L^1(I, L^2)} + \tau^{2/\sigma} \|u\|_{L^\infty(I, H^1)}^2 \|xu\|_{L^{8/d}(I, L^4)}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Combining (3.43) and (3.44), and choosing τ sufficiently small, we obtain

$$\begin{aligned} \|\nabla u\|_{(L^p(I, L^q)) \cap (L^{8/d}(I, L^4))} + \|xu\|_{(L^p(I, L^q)) \cap (L^{8/d}(I, L^4))} & \\ & \lesssim \|\nabla u(t)\|_{L^2} + \|xu(t)\|_{L^2} + \|\nabla u\|_{L^1(I, L^2)} + \|xu\|_{L^1(I, L^2)} \\ & \lesssim (1 + (t + \tau)^{\gamma+1}), \end{aligned}$$

with $\gamma > 0$, where we have used (3.42).

Using the above estimate for $t = 0, \tau, 2\tau, \dots, j\tau$ for $j \in \mathbf{N}$, and we recover $[0, t]$ with a finite number of intervals, to finally obtain the following estimate, for all $t \geq 0$:

$$\|\nabla u\|_{(L^p([0, t], L^q)) \cap (L^{8/d}([0, t], L^4))} + \|xu\|_{(L^p([0, t], L^q)) \cap (L^{8/d}([0, t], L^4))} \lesssim (1 + t)^{\gamma+2}, \quad (3.45)$$

for any admissible pair; and the proof of the lemma is complete. \square

We now prove Proposition 3.1.9.

Proof of Proposition 3.1.9. We argue by induction. The case $k = 1$ is given by Lemma 3.4.3. Assume now that the result holds for $k - 1$; we will prove it for k . The first important point is to notice that it suffices to analyse the derivatives and momenta of order k . In fact, the following inequality holds :

$$\sum_{|\alpha|+|\beta|\leq k} \|x^\alpha \partial_x^\beta u\|_{L^q} \leq C \left[\|(1 + |x|)^k u\|_{L^q} + \sum_{|\alpha|\leq k} \|\partial_x^\alpha u\|_{L^q} \right].$$

It is an easy consequence of Theorem 5 of [100].

For all $\alpha \in \mathbf{N}^d$ such that $|\alpha| = k$, u satisfies the following equations :

$$i\partial_t(\partial_x^\alpha u) + \frac{1}{2}\Delta(\partial_x^\alpha u) - \frac{1}{2}\langle Q^+(t)x; x \rangle (\partial_x^\alpha u) = \frac{1}{2} [\partial_x^\alpha, \langle Q^+(t)x; x \rangle] u + \Lambda \partial_x^\alpha (|u|^2 u),$$

and

$$i\partial_t(x^\alpha u) + \frac{1}{2}\Delta(x^\alpha u) - \frac{1}{2}\langle Q^+(t)x; x \rangle (x^\alpha u) = \frac{1}{2} [\Delta, x^\alpha] u + \Lambda |u|^2 (x^\alpha u).$$

For convenience, we distinguish cases $d = 2$ and $d = 3$.

Case $d = 2$: Here, the usual admissible pair, used to deal with the nonlinearity, is $(8/d, 4) = (4, 4)$, and $\sigma = 8/(4 - d) = 4$. Strichartz estimates on $I = [t, t + \tau]$, for $t \geq 0$ and $\tau > 0$ then yield :

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \|\partial_x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \|\partial_x^\alpha (|u|^2 u)\|_{L^{4/3}(I, L^{4/3})} \\ &\quad + \|\partial_x^\alpha, \langle Q^+(t)x; x \rangle\| u\|_{L^1(I, L^2)}, \\ \|x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \|x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \||u|^2(x^\alpha u)\|_{L^{4/3}(I, L^{4/3})} \\ &\quad + \|[\Delta, x^\alpha] u\|_{L^1(I, L^2)}. \end{aligned}$$

We write

$$[\partial_x^\alpha, \langle Q^+(t)x; x \rangle] u = \sum_{|\beta|=|\alpha|-1} (c_\beta(t)x) \partial_x^\beta u + \sum_{|\gamma|=|\alpha|-2} d_\gamma(t) \partial_x^\gamma u,$$

where c_β and d_γ are bounded for all $t \in \mathbf{R}$. We first notice that the derivative of the nonlinearity satisfy:

$$|\partial_x^\alpha (|u|^2 u)| \lesssim |u|^2 |\partial_x^\alpha u| + \sum_{j \leq J} |w_{j1}| |w_{j2}| |w_{j3}|,$$

where $J \in \mathbf{N}$, w_{j1} are derivatives of u or \bar{u} of order lower than $k - 1$, rearranged such that w_{j1} is of order lower than w_{j2} , which is of order lower than w_{j3} . Then, thanks to Hölder inequality, and Sobolev embedding, we have

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \|\partial_x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \tau^{2/\sigma} \|u\|_{L^\infty(I, H^1)}^2 \|\partial_x^\alpha u\|_{L^4(I, L^4)} \\ &\quad + \sum_{j \leq J} \|w_{j1}\|_{L^4(I, L^4)} \|w_{j2}\|_{L^4(I, L^4)} \|w_{j3}\|_{L^4(I, L^4)} \\ &\quad + \sum_{|\beta|=|\alpha|-1} \|x \partial_x^\beta u\|_{L^1(I, L^2)} + \tau \mathcal{F}_{k-1}, \\ \|x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \|x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \tau^{2/\sigma} \|u\|_{L^\infty(I, H^1)}^2 \|x^\alpha u\|_{L^4(I, L^4)} + \tau \mathcal{F}_{k-1}, \end{aligned}$$

where \mathcal{F}_{k-1} is the sum of $L^\infty(I, L^2)$ -norm of terms of order lower than $k - 1$ (it contains terms from $\sum_{|\gamma|=|\alpha|-2} d_\gamma(t) \partial_x^\gamma u$ and $[\Delta, x^\alpha] u$). We have, thanks to the induction hypothesis

$$\sum_{j \leq J} \|w_{j1}\|_{L^4(I, L^4)} \|w_{j2}\|_{L^4(I, L^4)} \|w_{j3}\|_{L^4(I, L^4)} \lesssim e^{Ct}.$$

Choosing $\tau \ll 1$, sufficiently small, the nonlinear term can be absorbed by the left handside term, and using (3.42) and the induction hypothesis :

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \|\partial_x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \sum_{|\beta|=|\alpha|-1} \|x \partial_x^\beta u\|_{L^1(I, L^2)} + e^{C(t+\tau)}, \quad (3.46) \\ \|x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \|x^\alpha u(t)\|_{L^2} + e^{C(t+\tau)}. \end{aligned}$$

Writing

$$A_k(t) = \max_{0 \leq s \leq t} \sum_{|\alpha|+|\beta| \leq k} \|x^\alpha \partial_x^\beta u(t)\|_{L^2},$$

we obtain the following inequality :

$$A_k(t + \tau) \leq C A_k(t) + C e^{C(t+\tau)},$$

with $\tau \ll 1$. Set $u_n = A_k(n\tau)$, for $n \in \mathbf{N}$. Then : $u_{n+1} \leq C u_n + C e^{C(n+1)\tau}$. With $v_n = e^{-Kn\tau} u_n$, this inequality allows us to find, by induction on n , that v_n is bounded for all $n \in \mathbf{N}$. We deduce that u_n grows exponentially, and that A_k grows in the same way.

To prove the property for any admissible pair (p, q) , we go back to (3.46) and use the previous estimate, found for $(\infty, 2)$:

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha u\|_{(L^p(I, L^q)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \sup_{s \in I} \|\partial_x^\alpha u(s)\|_{L^2} + \sum_{|\beta|=|\alpha|-1} \|x \partial_x^\beta u\|_{L^1(I, L^2)} + e^{C(t+\tau)}, \\ &\lesssim e^{C(t+\tau)} \\ \|x^\alpha u\|_{(L^p(I, L^q)) \cap (L^4(I, L^4))} &\lesssim \sup_{s \in I} |x^\alpha u(s)|_{L^2} + e^{C(t+\tau)} \\ &\lesssim e^{C(t+\tau)}, \end{aligned}$$

and we recover $[0, t]$ to obtain the property for the case $d = 2$.

Case $d = 3$: The main difference comes from the products of derivatives of u . Since $d = 3$, we have $\sigma > p$ and the Hölder inequality used above fails in this case. Therefore, to deal with these terms, we choose a different admissible pair: $(2, 6)$. It is important to notice that Strichartz estimates are available for this endpoint (see [77] for details). The notations will be the same as for case $d = 2$.

Strichartz estimates on $I = [t, t + \tau]$, for $t \geq 0$ and $\tau > 0$ yield :

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^{8/3}(I, L^4))} &\lesssim \|\partial_x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \| |u|^2 \partial_x^\alpha u \|_{L^{8/5}(I, L^{4/3})} \\ &\quad + \|\partial_x^\alpha, \langle Q^+(t)x; x \rangle\| u \|_{L^1(I, L^2)} + \sum_{j \leq J} \|w_{j1} w_{j2} w_{j3}\|_{L^2(I, L^{6/5})}, \end{aligned}$$

$$\|x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^{8/3}(I, L^4))} \lesssim \|x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \| |u|^2 (x^\alpha u) \|_{L^{8/5}(I, L^{4/3})} + \|\Delta, x^\alpha\| u \|_{L^1(I, L^2)}.$$

We recall that

$$\left[\partial_x^\alpha, \langle Q^+(t)x; x \rangle\right] u = \sum_{|\beta|=|\alpha|-1} (c_\beta(t) \cdot x) \partial_x^\beta u + \sum_{|\gamma|=|\alpha|-2} d_\gamma(t) \partial_x^\gamma u,$$

where c_β and d_γ are bounded for all $t \in \mathbf{R}$. Then, we can write, thanks to Hölder inequality :

$$\begin{aligned} \|w_{j1} w_{j2} w_{j3}\|_{L^2(I, L^{6/5})} &\lesssim \|w_{j1}\|_{L^\infty(I, L^6)} \|w_{j2}\|_{L^\infty(I, L^2)} \|w_{j3}\|_{L^2(I, L^6)} \\ &\lesssim \|w_{j1}\|_{L^\infty(I, H^1)} \|w_{j2}\|_{L^\infty(I, L^2)} \|w_{j3}\|_{L^2(I, L^6)} \\ &\lesssim e^{C(t+\tau)}, \end{aligned}$$

where we have used the Sobolev embedding $(H^1 \hookrightarrow L^6)$, and the induction hypothesis. We now infer, with the same arguments, assuming $\tau \leq 1$:

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^{8/3}(I, L^4))} &\lesssim \|\partial_x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \|u\|_{L^8(I, L^4)}^2 \|\partial_x^\alpha u\|_{L^{8/3}(I, L^4)} \\ &\quad + \sum_{|\beta|=|\alpha|-1} \|x \partial_x^\beta u\|_{L^1(I, L^2)} + \tau \mathcal{F}_{k-1} + e^{C(t+\tau)}, \\ &\lesssim \|\partial_x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \tau^{2/\sigma} \|\partial_x^\alpha u\|_{L^{8/3}(I, L^4)} + e^{C(t+\tau)}, \\ \|x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^{8/3}(I, L^4))} &\lesssim \|x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \|u\|_{L^8(I, L^4)}^2 \|x^\alpha u\|_{L^{8/3}(I, L^4)} + \tau \mathcal{F}_{k-1}, \\ &\lesssim \|x^\alpha u(t)\|_{L^2} + \tau^{2/\sigma} \|x^\alpha u\|_{L^{8/3}(I, L^4)} + e^{C(t+\tau)}. \end{aligned}$$

We choose τ sufficiently small to absorb the nonlinear term and finally obtain

$$\begin{aligned} \|\partial_x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^{8/3}(I, L^4))} &\lesssim \|\partial_x^\alpha u(t)\|_{L^2} + e^{C(t+\tau)}, \\ \|x^\alpha u\|_{(L^\infty(I, L^2)) \cap (L^{8/3}(I, L^4))} &\lesssim \|x^\alpha u(t)\|_{L^2} + e^{C(t+\tau)}. \end{aligned}$$

Then, we use the same procedure as in the case $d = 2$ and the proof is complete for $d = 3$. □

Let us now sketch the proof of the property enunciated in Remark 3.1.10. We first assume that

$$E_0 > \lambda_\infty \quad \text{and that} \quad |x^+(t)| \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \infty.$$

Note that the eigenvalue has the same decreasing rate as the potential V , given by the long range property. On one hand, we have

$$\frac{d^2}{dt^2} |x^+(t)|^2 = 2 (|\dot{x}^+(t)|^2 - 2x^+(t) \cdot \nabla \lambda_+(x^+(t))),$$

which gives

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d^2}{dt^2} |x^+(t)|^2 = 4(E_0 - \lambda_\infty) > 0,$$

thanks to the assumptions. We infer that for t sufficiently large, $x^+(t)$ satisfies :

$$\frac{d}{dt} |x^+(t)|^2 \geq ct, \quad \text{for a small positive constant } c.$$

We finally obtain

$$|x^+(t)|^2 \geq ct^2.$$

On the other hand, the derivative of Q^+ is given by

$$\frac{d}{dt} Q^+(t) = \dot{x}^+(t) \cdot \nabla (\text{Hess } \lambda_+(x^+(t))).$$

We deduce from the conservation of the energy (and (3.6)) that $|\dot{x}^+(t)|$ is bounded. Besides, we have

$$\nabla (\text{Hess } \lambda_+(x^+(t))) \leq c' \langle x^+(t) \rangle^{-p-3}.$$

Combining both previous estimates, we finally obtain the property (3.10).

Let us remark that the assumption

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |x^+(t)| = +\infty,$$

is not sufficient to prove that Q^+ satisfies (3.10), the assumption on the energy is essential. But if E_0 is such that

$$E_0 > \lambda_\infty + \frac{1}{2} \sup_{x \in \mathbf{R}^d} (x \cdot \nabla \lambda_+(x)),$$

then $\lim_{t \rightarrow \infty} |x^+(t)| = +\infty$ and Q^+ satisfies (3.10).

3.5 About the one dimensional case

In this section, we assume $d = 1$; we will prove Theorem 3.1.12.

We first notice that we are in the L^2 -subcritical case. We consider a 2×2 system. The authors of [25] consider a matrix-valued potential which is *at most quadratic* : ρ and ρ_0 are at most quadratic and ω is bounded as well as its derivatives. With these assumptions on the potential, the approximation is verified, up to a time $t^\varepsilon = C \log \log(\varepsilon^{-1})$. Under our assumptions on the potential V , it is possible to improve on this time t^ε . Let us first notice that, because of the absence of crossing points, thanks to the resolvent estimates of [71], [72], we obtain Strichartz estimates, similar to the one in Theorem 3.2.1 in the case $d = 1$, following the same steps as in [50]. In fact, in [50], the authors consider a matrix-valued

potential with crossing points, and they assume $d = 2, 3$ to avoid difficulties brought by these crossing points.

To obtain the approximation for large time, we follow the same steps as in the proof of Theorem 3.1.7, in Section 3.3.3. The difference comes from the estimate on φ^ε and the bootstrap argument. We consider some $t \geq 0$ and $\tau > 0$, we recall the estimate on u , proved in [22] on $I = [t, t + \tau]$, for the Lebesgue exponents $p = 8$, $q = 4$ and $\sigma = 8/3$:

$$\|u\|_{L^8(I, L^4)} \leq K \|u_0\|_{L^2} \lesssim 1.$$

This gives for φ^ε , where $t \in I$:

$$\|\varphi^\varepsilon(t)\|_{L^4} = \varepsilon^{-1/8} \|u(t)\|_{L^4},$$

and then, thanks to $p > \sigma$, we have

$$\begin{aligned} \|\varphi^\varepsilon\|_{L^{8/3}(I, L^4)} &\lesssim \tau^{3/8} \|\varphi^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^4)} \\ &\lesssim \varepsilon^{-1/8} \tau^{3/8} \|u\|_{L^\infty(I, L^4)} \lesssim \varepsilon^{-1/8}. \end{aligned}$$

Consider $t \leq t^\varepsilon$, with $t^\varepsilon = A \log(\varepsilon^{-1})$ where A will be adjusted later. We perform a bootstrap argument. Assume :

$$\|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} \lesssim \varepsilon^{-1/8}. \quad (3.47)$$

Then,

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \varepsilon^{-1/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} &\leq K \left(\varepsilon^{-1/8} \tau^{-1} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-1/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon^{1/4} \tau^{3/4} \left(\varepsilon^{-1/4} + \varepsilon^{3/2} e^{Ct} \right) \left(\|\theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \varepsilon^{3/4} e^{Ct} \right) \right). \end{aligned}$$

We choose A such that $\varepsilon^{7/4} e^{Ct} < 1$ for $t \leq A \log(\varepsilon^{-1})$, (which gives $A < 7/(4C)$), and then, $\tau > 0$ such that

$$2K\tau^{3/4} = \frac{1}{2};$$

τ and τ^{-1} are both bounded by a constant independent of t and ε , which gives

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \varepsilon^{-1/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} \lesssim \varepsilon^{-1/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-1/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{3/4} e^{Ct}.$$

For $t \geq 0$, we notice that, on one hand, since τ is a constant independent of ε and t , the number of intervals, of size τ in $[0, t]$, of order t , is bounded by $J^\varepsilon = C \log(\varepsilon^{-1})$, and on the other hand, all terms with L^1 -norms add up without any factor in front of them. Then, we obtain :

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^8([0, t], L^4)} + \varepsilon^{-1/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t], L^2)} \lesssim \varepsilon^{-1/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} + \varepsilon^{-1/8} \|L^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} + J^\varepsilon \varepsilon^{3/4} e^{Ct}. \quad (3.48)$$

We recall that

$$\|L^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \sqrt{\varepsilon} e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0,$$

and we neglect the last term, we then get for the admissible pair $(\infty, 2)$

$$\|\theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t], L^2)} \lesssim \|\theta^\varepsilon\|_{L^1([0, t], L^2)} + \sqrt{\varepsilon} e^{Ct},$$

and finally, by Gronwall lemma, we obtain

$$\forall t \in [0, t^\varepsilon], \quad \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_0 \sqrt{\varepsilon} e^{C_1 t}, \quad (3.49)$$

where the constants are independent of ε . Besides, combining (3.48) and (3.49), we have

$$\forall t \in [0, t^\varepsilon], \quad \|\theta^\varepsilon\|_{L^8([0, t], L^4)} \lesssim \varepsilon^{3/8} e^{Ct}. \quad (3.50)$$

The proof is then completed by checking how long the bootstrap assumption (3.47) holds. We differentiate the equation satisfied by θ^ε and arguing as before, with Strichartz estimates we obtain :

$$\begin{aligned} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \varepsilon^{-1/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} &\leq K' \left(\varepsilon^{-1/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \varepsilon^{-1/8} \|\nabla V \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon^{-1/8} \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-1/4} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{8/7}(I, L^{4/3})} \right). \end{aligned}$$

We recall the following estimate on the nonlinearity, obtained thanks to Hölder inequality :

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-1/4} \|\varepsilon \nabla N L^\varepsilon\|_{L^{8/7}(I, L^{4/3})} &\lesssim \varepsilon^{1/4} \left(\|\varphi^\varepsilon\|_{L^{8/3}(I, L^4)}^2 + \|\theta^\varepsilon\|_{L^{8/3}(I, L^4)}^2 + \varepsilon^2 \|g^\varepsilon\|_{L^{8/3}(I, L^4)}^2 \right) \\ &\quad \left(\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \varepsilon^2 \|\nabla(g^\varepsilon \chi^-)\|_{L^8(I, L^4)} \right) \\ &\quad + \varepsilon^{1/4} \|\varphi^\varepsilon \varepsilon \nabla \varphi^\varepsilon\|_{L^{8/6}(I, L^2)} \left(\|\theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \varepsilon \|g^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} \right) \\ &\lesssim \tau^{3/4} (1 + \varepsilon^{7/4} e^{Ct}) \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \tau^{3/4} \varepsilon^{3/8} e^{Ct}, \end{aligned}$$

where we have used the exponential control (3.9), which is true in the case $d = 1$, and (3.50). For $t \leq A' \log(\varepsilon^{-1})$, such that $\varepsilon^{7/4} e^{Ct} < 1$ we argue as before, by choosing A' satisfying $A' < 7/4C$ and fixing τ such that

$$\tau = \left(\frac{1}{4K'} \right)^{4/3},$$

to absorb the nonlinearity. We obtain that τ and τ^{-1} are constants independent of ε and t , and we get

$$\begin{aligned} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^8(I, L^4)} + \varepsilon^{-1/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty(I, L^2)} &\lesssim \\ &\varepsilon^{-1/8} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-1/8} \|\theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + \varepsilon^{-1/8} \|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)} + e^{Ct} \varepsilon^{3/8}, \end{aligned}$$

where we have used that V is long range, so $|\nabla V(x)| \lesssim 1$.

For $t \geq 0$, the number of intervals of size τ is equivalent to t , and by using (3.49) and that

$$\|\varepsilon \nabla L^\varepsilon\|_{L^2} \lesssim \sqrt{\varepsilon} e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0,$$

we get

$$\|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^\infty([0, t], L^2)} \lesssim \varepsilon^{1/2} e^{Ct} + \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^1(I, L^2)}$$

where we have neglected the contributions of the correction term, since they are not worse than the other terms.

Applying Gronwall lemma, we finally find :

$$\forall t \in [0, t^\varepsilon], \quad \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon\|_{L^2} \leq C'_0 \sqrt{\varepsilon} e^{C'_1 t}. \quad (3.51)$$

Thanks to Gagliardo-Nirenberg inequality, we now write

$$\begin{aligned} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^4} &\lesssim \varepsilon^{-1/4} \|\theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{3/4} \|\varepsilon \nabla \theta^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1/4} \\ &\lesssim \varepsilon^{-1/4} \sqrt{\varepsilon} e^{Ct}, \end{aligned}$$

where we have used (3.49) and (3.51). We infer that the bootstrap argument (3.47) holds, at least, when $t \leq ct^\varepsilon$ since we have

$$\forall t \in [0, t^\varepsilon], \quad \varepsilon^{-1/4} \sqrt{\varepsilon} e^{Ct} \ll \varepsilon^{-1/8},$$

with $t^\varepsilon \leq c \log(\varepsilon^{-1})$ for a suitable c , and this concludes the proof.

3.6 Nonlinear superposition

3.6.1 General considerations

Theorems 3.1.13 and 3.1.14 follow by the same methods as in Theorem 3.1.5. The main difference comes from the nonlinearity: nonlinear interaction terms appear. In this section, we will give the method for

a nonlinear superposition of two data polarized along different modes. The procedure applied in this subsection is exactly the same if we consider same eigenspaces. We set

$$w^\varepsilon = \psi^\varepsilon - \varphi_+^\varepsilon \chi^+ - \varphi_-^\varepsilon \chi^- + \varepsilon g^\varepsilon,$$

where g^ε is the sum of two correction terms, similar to the one defined in Section 3.2.2:

$$g^\varepsilon = g_+^\varepsilon \chi^+ + g_-^\varepsilon \chi^-,$$

where the function g_+^ε solves the scalar Schrödinger equation

$$i\varepsilon \partial_t g_+^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta g_+^\varepsilon - \lambda_+(x) g_+^\varepsilon = \varphi_-^\varepsilon r_+ \quad ; \quad g_+^\varepsilon(0, x) = 0;$$

and the function g_-^ε solves

$$i\varepsilon \partial_t g_-^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta g_-^\varepsilon - \lambda_-(x) g_-^\varepsilon = \varphi_+^\varepsilon r_- \quad ; \quad g_-^\varepsilon(0, x) = 0,$$

where

$$r_+(t, x) = -i \langle d\chi^+(x) \xi^+(t), \chi^-(x) \rangle \quad ; \quad r_-(t, x) = -i \langle d\chi^-(x) \xi^-(t), \chi^+(x) \rangle.$$

The function $w^\varepsilon(t)$ then solves

$$i\varepsilon \partial_t w^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \Delta w^\varepsilon - V(x) w^\varepsilon = \varepsilon N L^\varepsilon + \varepsilon L^\varepsilon \quad ; \quad w^\varepsilon(0, x) = 0,$$

with

$$N L^\varepsilon = \varepsilon^{d/2} (|w^\varepsilon + \varphi_+^\varepsilon \chi^+ + \varphi_-^\varepsilon \chi^- + \varepsilon g^\varepsilon|^2 (w^\varepsilon + \varphi_+^\varepsilon \chi^+ + \varphi_-^\varepsilon \chi^- + \varepsilon g^\varepsilon) - |\varphi_+^\varepsilon|^2 \varphi_+^\varepsilon \chi^+ - |\varphi_-^\varepsilon|^2 \varphi_-^\varepsilon \chi^-).$$

and

$$L^\varepsilon = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon} e^{Ct}) + \left[\frac{\varepsilon^2}{2} \Delta, \chi^+ \right] g_+^\varepsilon + \left[\frac{\varepsilon^2}{2} \Delta, \chi^- \right] g_-^\varepsilon = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon} e^{Ct}),$$

where the estimate holds in H_ε^1 , using Proposition 3.2.3. To deal with the nonlinearity, we add and subtract the term

$$\varepsilon^{d/2} |\varphi_+^\varepsilon \chi^+ + \varphi_-^\varepsilon \chi^-|^2 (\varphi_+^\varepsilon \chi^+ + \varphi_-^\varepsilon \chi^-),$$

and obtain

$$N L^\varepsilon = N_I^\varepsilon + N_S^\varepsilon,$$

where we have the following pointwise estimates

$$\begin{aligned} |N_I^\varepsilon| &\lesssim \varepsilon^{d/2} (|\varphi_+^\varepsilon|^2 |\varphi_-^\varepsilon| + |\varphi_-^\varepsilon|^2 |\varphi_+^\varepsilon|), \\ |N_S^\varepsilon| &\lesssim \varepsilon^{d/2} (|\varphi_+^\varepsilon|^2 + |\varphi_-^\varepsilon|^2 + |w^\varepsilon|^2 + \varepsilon^2 |g^\varepsilon|^2) (|w^\varepsilon| + \varepsilon |g^\varepsilon|). \end{aligned}$$

The procedure to estimate the term N_S^ε is exactly the same used to deal with the nonlinearity in Section 3.3.2. The only point remaining concerns the analysis of $\int_0^t \|N_I^\varepsilon(s)\|_{H_\varepsilon^1} ds$. We have

$$\varepsilon^{d/2} \|(\varphi_+^\varepsilon)^2 \varphi_-^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} = \left\| \left(u_+ \left(t, y - \frac{x^+(t) - x^-(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \right)^2 u_-(t, y) \right\|_{L^2(\mathbf{R}_y^d)}$$

and the term $|\varphi_-^\varepsilon|^2 |\varphi_+^\varepsilon|$ is handled in the same way, as their contribution play the same role. We leave out the other terms which are needed in view of a H_ε^1 estimate, since they create no trouble.

The estimation of N_I^ε is given by the following lemma

Lemme 3.6.1. *Let $T > 0$, $0 < \gamma < 1/2$ and*

$$I^\varepsilon(T) = \{t \in [0, T], |x^+(t) - x^-(t)| \leq \varepsilon^\gamma\}. \quad (3.52)$$

Then, for all integer k , such that $k > d/2$, there exists a constant $C = C(k)$ such that

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^T \|N_I^\varepsilon(t)\|_{H_x^1} dt \leq C(M_{k+2}(T))^3 \left(T\varepsilon^{k(1/2-\gamma)} + |I^\varepsilon(T)| \right),$$

where $M_k(T) = \max(M_k^+(T), M_k^-(T))$, with

$$M_k^\pm(T) = \sup \{ \| \langle x \rangle^\alpha \partial_x^\beta u_\pm \|_{(L^\infty[0,T]; L^2(\mathbf{R}^d))}; |\alpha| + |\beta| \leq k \}.$$

The proof is extracted from [26] (See Lemma 6.1 in [26] and its proof).

Our next objective is to evaluate the quantity $|I^\varepsilon(T)|$, for $T > 0$.

It has to be noticed that the arguments of [26] and [25] which allow us to deal with large times in some cases cannot be generalized to higher dimension : they are specific to the one-dimensional case.

3.6.2 Nonlinear superposition for data belonging to different modes

Lemme 3.6.2. *Let $T > 0$ and*

$$\Gamma = \inf_{s \in \mathbf{R}} |E^+ - E^- - (\lambda_+(x^+(s)) - \lambda_-(x^-(s)))|,$$

and suppose $\Gamma > 0$. Then, for $0 < \gamma < 1/2$, for $T > 0$, independent of ε , we have :

$$|I^\varepsilon(T)| \lesssim \frac{\varepsilon^\gamma}{\Gamma^2},$$

where $I^\varepsilon(T)$ is defined in (3.52)

Proof. We consider $J^\varepsilon(T)$ a maximal interval, included in $I^\varepsilon(T)$ and $N^\varepsilon(T)$ the number of such intervals. We have the following estimate :

$$|I^\varepsilon(T)| \leq |J^\varepsilon(T)| \times N^\varepsilon(T), \quad (3.53)$$

where $|J^\varepsilon(T)|$ denotes the maximal length of the maximal intervals.

Let z be defined by $z(t) = |x^+(t) - x^-(t)|^2$. We first prove that

$$\exists \varepsilon_0 > 0, \forall \varepsilon \in]0, \varepsilon_0], \forall t \in I^\varepsilon(T), \text{ we have } \ddot{z}(t) \geq \Gamma^2 > 0. \quad (3.54)$$

Step zero : Proof of (3.54).

We have for $t \in J^\varepsilon(T)$:

$$\begin{aligned} \ddot{z}(t) &= 2|\xi^+(t) - \xi^-(t)|^2 - 2(x^+(t) - x^-(t)) \cdot (\nabla \lambda_+(x^+(t)) - \nabla \lambda_-(x^-(t))), \\ \ddot{z}(t) &\geq 2|\xi^+(t) - \xi^-(t)|^2 - C\varepsilon^{2\gamma}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Besides, by definition of Γ , we have :

$$|E^+ - E^- - (\lambda_+(x^+(t)) - \lambda_-(x^-(t)))| \geq \Gamma. \quad (3.56)$$

Then we write, by the definitions of the energies :

$$|E^+ - E^- - (\lambda_+(x^+(t)) - \lambda_-(x^-(t)))| = \frac{1}{2} |(\xi^+(t) - \xi^-(t)) \cdot (\xi^+(t) + \xi^-(t))|,$$

whence by (3.6):

$$\Gamma \leq |E^+ - E^- - (\lambda_+(x^+(t)) - \lambda_-(x^-(t)))| \lesssim |\xi^+(t) - \xi^-(t)|,$$

which gives

$$\Gamma \lesssim |\xi^+(t) - \xi^-(t)|, \quad (3.57)$$

and we obtain by (3.55), (3.56) and, (3.57) for $C\varepsilon^\gamma$ such that $C'\Gamma^2 - C\varepsilon^{2\gamma} \geq C'\Gamma^2/2$:

$$C'\Gamma^2 \leq 2C'\Gamma^2 - 2C\varepsilon^{2\gamma} \leq \ddot{z}(t).$$

Step one : Size of $J^\varepsilon(T)$.

Let us now consider $\tau, \tau' \in J^\varepsilon(T)$ and find a lower bound of $|\tau - \tau'|$. There exists $t^* \in]\tau, \tau'[$ such that

$$|\dot{z}(\tau') - \dot{z}(\tau)| = |\tau' - \tau| \ddot{z}(t^*). \quad (3.58)$$

On one hand, we have by (3.6)

$$\begin{aligned} |\dot{z}(\tau') - \dot{z}(\tau)| &\leq 2|x^+(\tau') - x^-(\tau')| |\xi^+(\tau') - \xi^-(\tau')| \\ &\quad + 2|x^+(\tau) - x^-(\tau)| |\xi^+(\tau) - \xi^-(\tau)|, \\ &\lesssim \varepsilon^\gamma. \end{aligned} \quad (3.59)$$

On the other hand, we recall that the derivatives of z are given by :

$$\begin{aligned} \dot{z}(t) &= 2(x^+(t) - x^-(t)) \cdot (\xi^+(t) - \xi^-(t)), \\ \ddot{z}(t) &= 2|\xi^+(t) - \xi^-(t)|^2 - 2(x^+(t) - x^-(t)) \cdot (\nabla\lambda_+(x^+(t)) - \nabla\lambda_-(x^-(t))) \end{aligned}$$

We have (3.54) for $t^* \in J^\varepsilon(T)$. Therefore, in view of (3.58), (3.59) and (3.54) we infer

$$\Gamma^2 |\tau' - \tau| \lesssim |\tau' - \tau| \ddot{z}(t^*) = |\dot{z}(\tau') - \dot{z}(\tau)| \lesssim \varepsilon^\gamma,$$

whence

$$|\tau - \tau'| \lesssim \frac{\varepsilon^\gamma}{\Gamma^2}, \quad \text{and} \quad |J^\varepsilon(T)| \lesssim \frac{\varepsilon^\gamma}{\Gamma^2}.$$

Step two : Estimation of $N^\varepsilon(T)$.

The difficulty is to prove that the number of interval $J^\varepsilon(T)$ contained in $I^\varepsilon(T)$ is independent of ε . For this reason, we first consider a fixed ε .

Set $\varepsilon_0 > 0$ a fixed constant, small enough to have :

$$C'\Gamma^2 - C\varepsilon_0^{2\gamma} \geq \Gamma^2/2.$$

We consider $I^{\varepsilon_0}(T)$, let us prove that there is a finite number of intervals in this fixed set. We argue by contradiction, assuming that there is an infinite number of intervals such that $z(t) \leq \varepsilon_0^{2\gamma}$.

We consider a sequence $(s_n)_{n \in \mathbf{N}}$, included in $[0, T]$ and such that each term is in a connected interval of $I^{\varepsilon_0}(T)$, which does not contain an other term of the sequence. We can assume that the sequence is monotonic (let us say strictly increasing to fix ideas). By compactness of $[0, T]$, a subsequence of $(s_n)_n$ converges to some $s \in [0, T]$, with

$$z(s) \leq \varepsilon_0^{2\gamma}.$$

Besides, there exists $(t_n)_{n \in \mathbf{N}}$, such that for all

$$n \in \mathbf{N}, \quad t_n \in]s_n, s_{n+1}[\quad \text{with} \quad z(t_n) > \varepsilon_0^{2\gamma}$$

and

$$\frac{d}{dt} z(t)|_{t=t_n} = 0,$$

for all integer n . Using the same argument of compactness, we infer that this sequence (t_n) converges to s , with $z(s) \geq \varepsilon_0^{2\gamma}$, we deduce that

$$z(s) = \varepsilon_0^{2\gamma}, \quad \text{and} \quad \frac{d}{dt} z(t)|_{t=s} = 0.$$

We have

$$\frac{d}{dt}z(t)|_{t=t_n} = \frac{d}{dt}z(t)|_{t=t_{n+1}} = 0,$$

for all $n \in \mathbf{N}$; thanks to Rolle's theorem, there exists en sequence $(r_n)_{n \in \mathbf{N}}$ such that for all $n \in \mathbf{N}$, $r_n \in]t_n, t_{n+1}[$ and

$$\frac{d^2}{dt^2}z(t)|_{t=r_n} = 0.$$

Arguing as before, we infer that (r_n) converges to s , with $\frac{d^2}{dt^2}z(t)|_{t=s} = 0$. But (3.54) for s give $\ddot{z}(s) > 0$. Hence a contradiction with (3.54).

For ε sufficiently small, such that $\varepsilon \leq \varepsilon_0$, $J^\varepsilon(T)$ is included in $I^{\varepsilon_0}(T)$. Besides $z(t) \geq 0$ and $\ddot{z}(t) \geq \Gamma^2 > 0$, which implies that z is a positive and strictly convex function. We infer that in each interval of $I^{\varepsilon_0}(T)$, there is exactly one interval where z is very small, such that $z(t) \leq \varepsilon^{2\gamma}$. This implies that the number of such intervals of $J^\varepsilon(T)$ is the same as in $I^{\varepsilon_0}(T)$; $N^\varepsilon(T)$ is bounded by a constant independent of ε , and this concludes the proof. \square

3.6.3 Nonlinear superposition of data belonging to same modes

Let us first notice that $I^\varepsilon(T)$ has to be rewritten : Let $T > 0$, $0 < \gamma < 1/2$. We set :

$$I^\varepsilon(T) = \{t \in [0, T], |x_1(t) - x_2(t)| \leq \varepsilon^\gamma\}.$$

Then, to estimate the size of $I^\varepsilon(T)$, we have :

Lemme 3.6.3. *Let $T > 0$, independent of ε . Then, there exists $C > 0$, such that*

$$|I^\varepsilon(T)| \leq C\varepsilon^\gamma.$$

Sketch of the proof. The proof is based on Lemma 6.2 of [26]. In this case, we consider classical trajectories built with the same eigenvalue, which is similar to the scalar case, with a scalar potential. It has to be noticed that for

$$(x_1(0), \xi_1(0)) \neq (x_2(0), \xi_2(0)),$$

we have

$$(x_1(t), \xi_1(t)) \neq (x_2(t), \xi_2(t))$$

for all times t , since the trajectories solve the same ODE system. Therefore, on $[0, T]$, the curves $x_1(t)$ and $x_2(t)$ cross on a finite number of isolated points, where $\xi_1(t) \neq \xi_2(t)$. Then, the control of the quantity $|\xi_1(t) - \xi_2(t)|$ in (3.57) follows without any assumption (See [26] for details). \square

Remarque 3.6.4. To complete the proof of Propositions 3.1.13 and 3.1.14, it remains to perform a bootstrap argument, similar to the one in the proof of Theorem 3.1.5, (see [26] for details) which gives a finer condition on γ :

$$\varepsilon^{\gamma-d/4} \ll \varepsilon^{-d/8},$$

and it is equivalent to $\gamma > d/8$ which is compatible with $\gamma < 1/2$.

In both situations, for large time case, we cannot use the same method as in [26] for a scalar potential, or in [25], in the one-dimensional case, to find the number of maximal intervals. However, we have the following result :

Proposition 3.6.5. *Assume that (3.9) is satisfied; and*

$$N^\varepsilon(t) \lesssim e^{Ct},$$

where $N^\varepsilon(t)$ is defined in (3.53). Then there exists $C > 0$ independent of ε such that

$$\sup_{t \leq C \log \log(\varepsilon^{-1})} \|w^\varepsilon(t)\|_{H_\varepsilon^1} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Sketch of the proof. We recall that

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^t \|N_I^\varepsilon(s)\|_{H_\varepsilon^1} ds \lesssim (M_{k+2}(t))^3 \left(t\varepsilon^{k(1/2-\gamma)} + |I^\varepsilon(t)| \right),$$

with M_k defined in Lemma 3.6.1. We first notice that assuming (3.9) for $k \in \mathbf{N}$, we can estimate $M_k(t)$ with

$$M_k(t) \lesssim e^{Ct}, \quad \forall t \geq 0.$$

Then,

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^t \|N_I^\varepsilon(s)\|_{H_\varepsilon^1} ds \lesssim e^{Ct} \left(t\varepsilon^{(k-2)(1/2-\gamma)} + |I^\varepsilon(t)| \right).$$

In order to evaluate $|I^\varepsilon(t)|$ for $t \geq 0$, we argue as in the proof of Lemma 3.6.2 : we still have

$$|I^\varepsilon(t)| \leq N^\varepsilon(t) \times \max |J^\varepsilon(t)|,$$

where $J^\varepsilon(t)$ is a maximal interval included in $I^\varepsilon(t)$. On one hand, we assume that $N^\varepsilon(t) \lesssim e^{Ct}$, and on the other hand, we use the same method as in the proof of Lemma 3.6.2 and the estimate (3.6) to obtain the following estimate :

$$|J^\varepsilon(t)| \lesssim \varepsilon^\gamma$$

and so

$$|I^\varepsilon(t)| \lesssim \varepsilon^\gamma e^{Ct}.$$

We infer

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^t \|N_I^\varepsilon(s)\|_{H_\varepsilon^1} ds \lesssim e^{Ct} \left(t\varepsilon^{(k-2)(1/2-\gamma)} + \varepsilon^\gamma \right).$$

We require $\gamma = (k-2)(1/2-\gamma)$ so $\gamma = (k-2)/(2k-2) > d/8$ (we need $k \geq 6$). Then, the result is obtained, after the final step, the bootstrap argument, as in the proof of Theorem 3.1.5. \square

Remarque 3.6.6. Let us notice that if the approximation of Theorem 3.1.5 is valid up to a time $t = C \log(\varepsilon^{-1})$, then, Theorems 3.1.13 and 3.1.14 will be also valid up to an analogous time.

3.7 Appendix 1: Strichartz estimates

In view of Remark 4 of [50], Proposition 3 of [50] writes:

Proposition 3.7.1. *Consider $T > 0$ and (p, q) an admissible pair. Then, there exists a constant $C = C(q)$ such that*

$$\left\| e^{i\frac{t}{\varepsilon}P(\varepsilon)} u_0^\varepsilon \right\|_{L^p([0, T], L^q(\mathbf{R}^d))} \leq C\varepsilon^{-1/p} \|u_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R}^d)},$$

and Corollary 1 writes:

Corollaire 3.7.2. *Consider $T > 0$ and (p, q) an admissible pair. Then, there exists a constant $C = C(q)$ such that*

$$\left\| \int_0^t e^{i\frac{t-s}{\varepsilon}P(\varepsilon)} f^\varepsilon(s) ds \right\|_{L^p([0, T], L^q(\mathbf{R}^d))} \leq C\varepsilon^{-1/p} \|f^\varepsilon\|_{L^1([0, T], L^2(\mathbf{R}^d))}.$$

Note that these results of [50] crucially use the long range property of V , which allows to prove resolvent estimates. Proposition 3.7.1 gives the first Strichartz estimate (3.12). Let us prove that we also have (3.13), namely:

$$\left\| \int_0^t e^{i\frac{t-s}{\varepsilon}P(\varepsilon)} f^\varepsilon(s) ds \right\|_{L^{p_1}([0, T], L^{q_1}(\mathbf{R}^d))} \leq C\varepsilon^{-1/p_1-1/p_2} \|f^\varepsilon\|_{L^{p_2}'([0, T], L^{q_2}'(\mathbf{R}^d))},$$

where (p_1, q_1) and (p_2, q_2) are admissible pairs, and C independent of ε .

By Christ-Kiselev's theorem, it is sufficient to estimate the $L^{p_1}([0, T], L^{q_1})$ -norm of

$$h^\varepsilon(t) := \int_0^T e^{i\frac{t-\tau}{\varepsilon}P(\varepsilon)} f^\varepsilon(\tau) d\tau.$$

Using (3.12), we obtain

$$\begin{aligned} \|h^\varepsilon\|_{L^{p_1}([0, T], L^{q_1})} &\leq C(q_1)\varepsilon^{-1/p_1} \|h^\varepsilon(0)\|_{L^2}, \\ &\leq C(q_1)\varepsilon^{-1/p_1} \left\| \int_0^T e^{-i\frac{s}{\varepsilon}P(\varepsilon)} f^\varepsilon(s) ds \right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

The dual inequality of (3.12) for (p_2, q_2) admissible pair gives

$$\left\| \int_0^T e^{-i\frac{\tau}{\varepsilon}P(\varepsilon)} f^\varepsilon(\tau) d\tau \right\|_{L^2} \leq C(q_2)\varepsilon^{-1/p_2} \|f^\varepsilon\|_{L^{p_2'}([0, T], L^{q_2'})}.$$

Combining these estimates, we finally obtain (3.13).

3.8 Appendix 2: Global existence of the exact solution

In view of [22] Section 3.7 allows us to prove global existence and uniqueness of the solution of (3.1)-(3.2), for fixed $\varepsilon > 0$:

Proposition 3.8.1. *If V satisfies Assumption 3.1.1, and $\psi_0^\varepsilon \in L^2(\mathbf{R}^d)$, there exists a unique, global, solution to (3.1)-(3.2)*

$$\psi^\varepsilon \in \mathcal{C}(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R}^d)) \cap L_{loc}^{8/d}(\mathbf{R}, L^4(\mathbf{R}^d)).$$

Moreover, the L^2 -norm of ψ^ε does not depend on time

$$\|\psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbf{R}^d)} = \|\psi_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbf{R}^d)}, \quad \forall t \in \mathbf{R}.$$

We denote by $E(t)$ the energy, given by :

$$E(t) = \frac{1}{2} \|\nabla u(t)\|_{L^2}^2 + \frac{\Lambda}{4} \|u(t)\|_{L^4}^4 + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^d} \langle Q^+(t)x; x \rangle |u(t, x)|^2 dx.$$

Sketch of the proof. From the above-mentioned results, it follows that local in time Strichartz estimates are available. Therefore, using a fixed point argument, one can prove local existence of the solution. Then, using the conservation of the L^2 -norm and computations with the energy and virial identity, one can infer that the solution is global. See [50, Remark 5] and [56] for the details. \square

For fixed ε , it is actually possible to prove global existence of the solution under weaker assumptions : V has to be *at most quadratic* : assuming ρ and ρ_0 are at most quadratic and ω is bounded with bounded derivatives, the author of [22] obtains global existence of the solution.

Chapitre 4

Propagation of Coherent States through an Avoided Crossing

Ce chapitre est disponible en version *preprint*: (<http://arxiv.org/abs/1401.7859>) et a été accepté dans la revue “*Journal de l’Institut de Mathématiques de Jussieu*” en 2014.

We study the propagation of wave packets for a one-dimensional system of two coupled Schrödinger equations with a cubic nonlinearity, in the semi-classical limit. Couplings are induced by the nonlinearity and by the potential whose eigenvalues present an “avoided crossing”: at one given point, the gap between them reduces as the semi-classical parameter becomes smaller. For data which are coherent states polarized along an eigenvector of the potential, we prove that when the wave function propagates through the avoided crossing point, there are transitions between the eigenspaces at leading order. We analyze the nonlinear effects, which are noticeable away from the crossing point, but see that in a small time interval around this point, the nonlinearity’s role is negligible at leading order, and the transition probabilities can be computed with the linear Landau-Zener formula.

Keywords : Nonlinear Schrödinger equations, Semiclassical limit, Quantum propagation of coherent states, Avoided crossing.

Mathematics Subject Classification : 35Q40, 35Q55, 81Q05, 81R20, 81R30

4.1 Introduction

In the framework of the Born-Oppenheimer approximation, systems of linear time-dependent Schrödinger equations have been studied throughout years in order to understand molecular dynamics. The notion of adiabaticity and questions about energy level crossing arose. In fact, when one considers systems where the electronic energy levels are assumed to be well isolated from each other, one can prove that there is an *adiabatic decoupling*. The validity of such approximations has been analyzed, in various settings (see for instance [87] and [96] and the references given there); however the approximation breaks down in the presence of eigenvalue crossing, leading to numerous questions about those situations.

Thus several types of eigenvalue crossing phenomena have been analyzed, since they can imply transitions between electronic energy levels. One of these situations, where the adiabatic approximation breaks down is when one has an *Avoided crossing*, as studied in [61], [62], [65], and [92].

Définition 4.1.1. *Let $d, n \in \mathbf{N}^*$, and $\Omega \subset \mathbf{R}^d$ an open subset of \mathbf{R}^d . We suppose that $V_\delta(x)$ is a family of $n \times n$ symmetric and smooth matrices on Ω and $\delta \in [0, \delta_0)$, for a fixed $\delta_0 > 0$. We suppose that $V_\delta(x)$ has two eigenvalues $\lambda_\delta^A(x), \lambda_\delta^B(x)$ such that for all $x \in \Omega$, $\lambda_\delta^A(x) \neq \lambda_\delta^B(x)$, for $\delta > 0$. We consider Γ given by*

$$\Gamma = \{x \mid \lambda_0^A(x) = \lambda_0^B(x)\},$$

and assume that Γ is a single point or a non-empty connected proper submanifold of Ω . Then, we say that $V_\delta(x)$ has an **Avoided crossing** on Γ .

In this case, two energy levels come close to one another, without crossing and a solution with a data polarized along one given mode is not polarized along this mode anymore, when it has propagated through the avoided crossing point. In the linear case, it is possible to compute the transition probabilities, thanks to the well known *Landau-Zener formula* ([81], [105]), which was mathematically proved in [59], and in [75] with less restrictions. Propagation of specific coherent states through avoided crossing has been studied in [61] (see also [65] for a classification) and in [60] for “exact” crossing, where some issues about regularity are added in the study. For more general data and crossing, the transition is also noticeable when one looks at the Wigner transform of the wave function, whose description is performed studying semi-classical measures and is useful to understand how the Wigner transform concentrates on trajectories passing through the crossing region (see for instance [44] for semi-classical measures describing the Wigner transform in an explicit case and [46] for more general data). The crossing phenomena have been analyzed in the linear case and the reader can find various results on different aspects, including [34], [35] for a classification of results for more general equations. For some numerical simulations, that are used in other fields such as Quantum Chemistry, we refer the reader to see for instance [48] and [83].

The aim of this paper is to analyze the nonlinear twin of the situation presented in [61] in a simple and explicit case, in order to understand the nonlinear effects combined with the crossing phenomenon: we will study an avoided crossing phenomenon, which occurs at one point, for a system of two nonlinear time-dependent Schrödinger equations with an initial coherent state, in dimension one, with a cubic nonlinearity.

This problem arises from the description of nonadiabatic transitions when one studies properties of binary mixtures of Bose-Einstein Condensates (see [66], [67], [68]). The nonlinearity induces a coupling between each mode and if the systems do present crossing phenomena, we want to understand how effects from both couplings can interact. Some cases with a potential without eigenvalue crossing have been studied, in order to analyze the nonlinear effects: in [25] and [69], for initial coherent states, adiabatic theorems and validity of approximations of the wave function at leading order are proved for cubic nonlinearities, provided there is a gap assumption. Note also that other point of views, such as stationary problems, are also discussed, for instance in [1], using Ginzburg-Landau Energies in the context of Binary mixtures of Bose-Einstein Condensates. Some results in different frameworks, such as quantum systems with periodic potentials and studies about the adiabaticity in that case can be found in [31] (whereas the linear version of the previous results is presented in [32]). Transitions phenomena in the periodic setting - transitions between Bloch bands - are analyzed, for instance in [73],[74]. The result presented here extends to more general nonlinearities, of the form $(a|\psi_1^\varepsilon|^2 + b|\psi_2^\varepsilon|^2)\psi^\varepsilon$ such as those studied in [66], [67], [68] and references there.

4.1.1 Framework

We consider the semi-classical limit $\varepsilon \rightarrow 0$ for the nonlinear Schrödinger equation

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2\psi^\varepsilon - V_\delta(x)\psi^\varepsilon = \kappa\varepsilon^{3/2}|\psi^\varepsilon|^2\psi^\varepsilon; \\ \psi^\varepsilon(-T, \cdot) \in \mathcal{S}(\mathbf{R}), \end{cases} \quad (4.1)$$

where $\psi^\varepsilon(t, x) = (\psi_1^\varepsilon(t, x); \psi_2^\varepsilon(t, x))$, $(t, x) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}$, $\kappa \in \mathbf{R}$ is a small coefficient, and the quantity $|\psi^\varepsilon|^2$ denotes the square of the Hermitian norm in \mathbf{C}^2 of the vector ψ^ε . The initial data $\psi^\varepsilon(-T, \cdot)$ is a *coherent state* or *wave packet*, which concentrates at some given point in the phase space. We consider the following potential

$$V_\delta(x) = \begin{pmatrix} x & \delta \\ \delta & -x \end{pmatrix}, \text{ where } \delta > 0,$$

for $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$ for a nonnegative constant c . The eigenvalues are given by

$$\lambda_\delta^\pm(x) = \pm\sqrt{x^2 + \delta^2}, \text{ and } \lambda_0^+(0) = \lambda_0^-(0) = 0.$$

One can see that the gap size between the two eigenvalues is at least $\delta > 0$, and that it is minimal when $x = 0$ and so that an avoided crossing phenomenon occurs at $x = 0$.

The eigenvectors associated with the eigenvalues of V_δ are

$$\chi_\delta^\pm(x) = \begin{pmatrix} \Theta_1^\pm(x) \\ \Theta_2^\pm(x) \end{pmatrix},$$

with

$$\begin{cases} \Theta_1^+(x) = -\Theta_2^-(x) &= \frac{\delta}{(2\sqrt{x^2 + \delta^2}(\sqrt{x^2 + \delta^2} - x))^{1/2}}, \\ \Theta_2^+(x) = \Theta_1^-(x) &= \frac{\sqrt{x^2 + \delta^2} - x}{(2\sqrt{x^2 + \delta^2}(\sqrt{x^2 + \delta^2} - x))^{1/2}}. \end{cases} \quad (4.2)$$

One can see that since $\delta > 0$, the eigenvectors are \mathcal{C}^∞ . In the following, we will use estimates on their derivatives: writing Θ_j^\pm as $\Theta_j^\pm(x) = f_j^\pm(x, \delta)$, where f_j^\pm are homogeneous of degree 0 and we obtain

$$|\partial_x^\alpha \chi_\delta^\pm(x)| \lesssim \delta^{-\alpha}, \quad \forall \alpha \in \mathbf{N}. \quad (4.3)$$

It is also possible to obtain finer bounds in some cases, see Section 4.4.2 for a deeper discussion about these eigenvectors.

Let us first comment on the value of the parameter δ . In the linear case, studied in [61], the authors work with a gap size of the order $\sqrt{\varepsilon}$ since there can be important transitions between each mode for δ of this size. The same critical value appears in the study of Dirac type equations, studied in [43]. For higher power of ε , one can prove that the adiabatic decoupling is still valid. We choose to study the nonlinear propagation in this setting too. For asymptotics in linear cases, with other values of δ , which can be independent of ε we refer the reader to [92].

Another notion of criticality appears for the exponent of the nonlinearity: criticality for the Cauchy problem; this notion does not depend on the asymptotical one, that will be detailed after. We recall that if we write the nonlinearity $\kappa \varepsilon^\alpha |\psi^\varepsilon|^{2\sigma} \psi^\varepsilon$ and denote by d the space dimension, we say that:

- the nonlinearity is L^2 -subcritical if $\sigma < 2/d$, L^2 -supercritical otherwise.
- for $d \geq 3$, the nonlinearity is H^1 -subcritical if $\sigma < 2/(d-2)$.

Here, the nonlinearity is L^2 -subcritical which is a good point to prove global existence of the solution for fixed ε more easily, and to deal with other technical issues that will be developed later.

The coefficient κ can be either negative or nonnegative, but has to be small: $\exists C > 0$ independent of ε, δ , such that $|\kappa| \leq 1/C$. For convenience, we will use $|\kappa| \leq 1$ and will then make a restriction and take it smaller in the analysis, when it is needed.

It is also worth pointing out that the nonlinearity is critical, concerning the semiclassical limit $\varepsilon \rightarrow 0$ for semi-classical wave packets, in the case without crossing: if we write the nonlinearity $\kappa \varepsilon^\alpha |\psi^\varepsilon|^2 \psi^\varepsilon$, and introduce $\alpha_c = 1 + d\sigma/2 = 3/2$, for data which are wave packets, we have

- if $\alpha > \alpha_c$, one can linearize the equation at leading order, since the nonlinearity's weight (or in an other point of view, the size of the initial data) is not big enough to have an effect. One can build an approximation which is a linear coherent state (at leading order), in the case of adiabatic regimes.
- if $\alpha = \alpha_c$, for this critical situation, the effects of the nonlinearity cannot be neglected: in the absence of crossing points, the wave function is still approximated by a coherent state at leading order, but the propagation gets some nonlinear effects.

We refer the reader to [26] for a deeper discussion about this critical exponent, in a scalar case, and [25], [69] for matrix-valued cases. Similar discussions are made for Hartree equations in [4], [19].

For fixed ε , and for $\delta > 0$, since the potential is at most quadratic, in view of [22], one can prove global existence and uniqueness of the solution ψ^ε to (4.1), for any data in $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ and for any $\kappa \in \mathbf{R}$.

Since our aim is to understand the competition between couplings induced by the nonlinearity and those induced by the potential, if there is some, we choose a critical power of ε in front of the nonlinearity.

4.1.2 Classical trajectories and actions

We introduce the following quantities.

Classical trajectories. Let $(x^\pm(t), \xi^\pm(t))$ be the solution of the following system:

$$\begin{cases} \dot{x}^\pm(t) = \xi^\pm(t) \\ \dot{\xi}^\pm(t) = -\partial_x \lambda_\delta^\pm(x^\pm(t)) \end{cases} \quad \text{with} \quad \begin{cases} x^\pm(0) = x_0^\pm \\ \xi^\pm(0) = \xi_0^\pm \end{cases} \quad (4.4)$$

Remarque 4.1.2. These trajectories admit a limit when δ tends to zero:

$$\begin{cases} \dot{x}^\pm(t) = \xi^\pm(t) \\ \dot{\xi}^\pm(t) = \mp x(t) / |x(t)| \end{cases}$$

Note that these limit trajectories are well-defined (see for instance [46]).

Remarque 4.1.3. Since $\delta > 0$, the eigenvalues are smooth and so (4.4) has a unique, global, δ -dependent and smooth solution. Besides, for any $T > 0$, using [26] one can write

$$\exists C > 0, \exists \delta_0 > 0, \forall t \in [-T, 0], \forall \delta \in [0, \delta_0], |\xi^\pm(t)| + |x^\pm(t)| \leq C.$$

Classical action.

$$S^\pm(t) = \int_0^t \left(\frac{|\xi^\pm(s)|^2}{2} - \lambda_\delta^\pm(x^\pm(s)) \right) ds.$$

4.1.3 Initial time and Data

We consider the “+” classical trajectories introduced by (4.4), defined by choosing

$$x_0 = 0 \quad ; \quad \xi_0 > 0,$$

as initial data for them. The point of minimal gap is reached at time $t = 0$ for $x = 0$.

We chose an initial data $\psi^\varepsilon(-T, x)$ which is a localized wave packet, polarized along the eigenvector χ_δ^+ :

$$\psi^\varepsilon(-T, x) = \varepsilon^{-1/4} a \left(\frac{x - x^+(-T)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{i \frac{S^+(-T)}{\varepsilon} + i \frac{\xi^+(-T) \cdot (x - x^+(-T))}{\varepsilon}} \chi_\delta^+(x), \quad (4.5)$$

where the terms $x^+(-T), \xi^+(-T), S^+(-T)$ are the values of the quantities, introduced by (4.4), at time $t = -T$, and $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$.

Moreover, we restrain to T such that for $t \in [-T, 0]$, the classical trajectory $x^+(t)$ grows to zero.

4.1.4 Main result

We will split the analysis of the propagation of the coherent state into three parts, depending on the closeness of the crossing region; we will have to consider different time intervals. The last one will not be analyzed in the paper and the author will explain the technical obstructions. Each one will lead to a different regime, and the approximations will have to be matched at the border of the time intervals.

It is necessary to consider different regimes because of nonadiabatic transitions: in fact, the wave function cannot remain localized in the mode “+” at leading order beyond a specific time, which is a small power of ε . Thus, in order to deal with energy level transitions, we have to build different approximations.

We first introduce some functions.

In the adiabatic region, where $x^+(t) \ll -1$, we consider the function $u_\delta = u_\delta(t, y)$, solution to

$$i \partial_t u_\delta + \frac{1}{2} \partial_y^2 u_\delta - \frac{1}{2} \lambda_\delta^{+(2)}(x^+(t)) y^2 u_\delta = \kappa |u_\delta|^2 u_\delta \quad ; \quad u_\delta(-T, y) = a(y), \quad (4.6)$$

where $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$, and where the second derivative of the eigenvalue is given by $\lambda_\delta^{+(2)}(x) = \delta^2 (x^2 + \delta^2)^{-3/2}$. Existence and properties of u_δ are discussed in Section 4.3.

In the crossing region, we introduce f , a vector-valued function, solution to

$$i\partial_s f - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} f = 0; \quad (4.7)$$

with data

$$f(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) = u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \quad (4.8)$$

where $s, y \in \mathbf{R}$, $\gamma \in]0, 1/6[$, and $\phi^\varepsilon(y)$ is a real-valued phase function (see (4.32) for an explicit formula). Note that the system (4.7) presents transitions between each mode.

We can now state the main theorem of the paper, which gives a valid approximation of the exact solution ψ^ε at leading order, in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$:

Théorème 4.1.4 (Main Theorem). *We consider $\psi^\varepsilon(t, x)$ the exact solution to the Cauchy problem (4.1) with data (4.5), and $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$ for some $c > 0$. Then, if $c_0 > 0$ is independent of ε , and if $\gamma \in]0, 1/6[$:*

(1) *For $-T \leq t \leq -c_0\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma}$, in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ we have*

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} u_\delta \left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{iS^+(t)}{\varepsilon} + \frac{i\xi^+(t) \cdot (x - x^+(t))}{\varepsilon}} \chi_\delta^+(x) + \mathcal{O}(\varepsilon^\gamma), \text{ in } L^2,$$

where u_δ is the profile, solution to (4.6).

(2) *For $-c_0\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma} \leq t \leq c_0\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma}$, in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ we have*

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} f \left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i\xi_0^2 t}{2\varepsilon} + \frac{i\xi_0 \cdot (x - t\xi_0)}{\varepsilon}} + \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma/2}), \text{ in } L^2$$

where f is the solution to (4.7) and with data (4.8).

Remarque 4.1.5. For both approximations given by points (1) and (2) from the previous theorem, to deal with the nonlinearity, we also need estimates in some weighted Sobolev spaces of type H^1 (see Theorems 4.2.5 and 4.2.9).

For time $t \in [-T, -c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}]$, the exact solution ψ^ε can be approached, at leading order, by a coherent state polarized along the same eigenvector as the initial data. The nonlinear effect is noticeable thanks to the profile u_δ , whose equation is a nonlinear Schrödinger equation (4.6).

The transition between energy levels occurs on the time interval

$$[-t^\varepsilon, t^\varepsilon] = [-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}]$$

but the nonlinearity, does not affect the phenomenon.

Corollaire 4.1.6 (Transition between the modes). *We consider*

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \psi_+^\varepsilon(t, x)\chi_\delta^+(x) + \psi_-^\varepsilon(t, x)\chi_\delta^-(x)$$

the exact solution to the Cauchy problem (4.1) with data (4.5), and $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$ for some $c > 0$. Consider $c_0 > 0$, $\gamma \in]0, 1/6[$, and $t^\varepsilon = c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}$, when $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\forall t \in [-T, -t^\varepsilon], \quad \|\psi_+^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 = \|a\|_{L^2}^2 + o(1) \\ \|\psi_-^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 = o(1).$$

and for $p = e^{-\frac{\pi c^2}{\xi_0}}$

$$\|\psi_+^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 = (1 - p)\|a\|_{L^2}^2 + o(1) \\ \|\psi_-^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 = p\|a\|_{L^2}^2 + o(1).$$

Note that p is the same transition coefficient as in [61] (the Landau-Zener coefficient).

We are not able to describe the wave function for nonnegative times of order $\mathcal{O}(1)$ because the approximation given by Theorem 4.1.4 is not good enough to be propagated. In fact, in simplest situations, as in [25] and [69], one can treat initial data which are a wave packet up to a term of size $\mathcal{O}(\varepsilon^l)$, in $L^2(\mathbf{R}^d) \cap H_\varepsilon^1(\mathbf{R}^d)$ where $l = 1/4$ in the case $d = 1$, $l > d/8$ if $d = 2, 3$, and can prove the validity of the approximation.

In our case, the fact that $0 < \gamma < 1/6$ yields a technical obstruction if we keep the same approach for $t \in [t^\varepsilon, T]$ as we did for $t \in [-T, -t^\varepsilon]$.

4.1.5 Organization of the paper

In Section 2, we give a brief exposition without proofs of all results we need in order to prove the main theorem of the paper. We then look more closely at the profile u_δ in Section 3 before proceeding with the study of the approximation far from the crossing region in Section 4. The fifth section is devoted to the analysis of the crossing region and gives the proof of the validity of the second approximation. In the last section, we restrict our attention to the transition phenomenon.

4.2 Sketch of proof of the main theorem

4.2.1 Approximation away from the crossing point

Our aim is to approach the exact solution ψ^ε by a function polarized along the eigenvector $\chi_\delta^+(x)$, that we are going to build using the profile u_δ , up to a time $-t^\varepsilon$ of order $\varepsilon^{1/2-\gamma}$, for some $\gamma \in]0, 1/6[$. near the crossing point.

We consider the classical trajectories and action associated with $\lambda_\delta^+(x)$. In order to prove the validity of the approximation of point (1) in Theorem (3.1.5), we first need to control u_δ , solution to (4.6). By [25], we have global existence of u_δ for any $\delta > 0$.

Théorème 4.2.1 (Global existence from [22]). *Let $\delta > 0$ and $\kappa \in \mathbf{R}$. For all $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$, (4.6) has a unique solution*

$$u_\delta \in \mathcal{C}(\mathbf{R}, L^2(\mathbf{R})) \cap L_{loc}^8(\mathbf{R}, L^4(\mathbf{R})).$$

Moreover, its L^2 -norm is conserved:

$$\|u_\delta(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} = \|a\|_{L^2(\mathbf{R})}, \quad \forall t \in \mathbf{R}.$$

Sketch of the proof. This result is proved in [22]: for a fixed $\delta > 0$, the potential is at most quadratic. Thus, one can use local in time Strichartz estimates (which are available thanks to [51] and [52]) and prove local existence of the solution. And since we are in the L^2 -subcritical case, the mass conservation implies global existence of the profile for any κ , in the suitable space. \square

Proposition 4.2.2 (Control of derivatives and momenta far from $t = 0$). *For any $T_0 \in]0, T[$, there exists $C > 0$, such that*

$$\forall t \in [-T, -T_0], \forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}, \alpha + \beta \leq k, \quad \|y^\alpha \partial_y^\beta u_\delta(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} \leq C.$$

Sketch of the proof. The only thing we need to observe is that

$$\left| \lambda^{+(2)}(x(t)) \right| = \frac{\delta^2}{(x^+(t)^2 + \delta^2)^{3/2}} \leq \frac{C\delta^2}{(\inf_{[-T, -T_0]} x^+(t))^3} \leq \tilde{C}\delta^2,$$

for $t \in [-T, -T_0]$, since $|x^+(t)|$ is bounded from below by a positive constant independent of ε far from $t = 0$. The control of the derivatives and momenta is then a consequence of [22]. \square

We actually need the profile on a bounded time interval of the form $[-T, 0]$, and it requires additional work to prove the uniformity of the bound since this interval contains zero. The following result will be proved in Section 4.3:

Théorème 4.2.3 (Behaviour of derivatives and momenta until $t = 0$). *Let $\kappa \in \mathbf{R}$, and $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$. We consider u_δ the solution to the Cauchy problem (4.6), and $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$ for some $c > 0$. Then, there exists $T_0 > 0$ such that for all $k \in \mathbf{N}$, the following property is satisfied: There exists $C > 0$, such that*

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}, \alpha + \beta \leq k, \quad \|y^\alpha \partial_y^\beta u_\delta(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} \leq C, \quad \forall t \in [-T_0, 0]$$

As a consequence, we have a control on the whole interval $[-T, 0]$.

We denote by φ^ε , the following function associated with u_δ , x^+ , ξ^+ , S^+ :

$$\varphi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} u_\delta \left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{iS^+(t)}{\varepsilon} + \frac{i\xi^+(t) \cdot (x - x^+(t))}{\varepsilon}}. \quad (4.9)$$

Using $|\xi^+(t)| \leq C$, for $t \in [-T, 0]$, we deduce the following corollary.

Corollaire 4.2.4. *Let $T > 0$. Let us consider $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$, and u_δ solution to (4.6). We have for φ^ε defined by (4.9)*

$$\forall \beta \in \mathbf{N}, \quad \|\varepsilon^\beta \partial_x^\beta \varphi^\varepsilon(t)\|_{L^\infty(\mathbf{R})} \lesssim \varepsilon^{-1/4}, \quad \forall t \in [-T, 0].$$

The first point of Theorem 4.1.4 is a consequence of the following theorem, that will be proved in Section 4.4.

Théorème 4.2.5. *Let $T > 0$, $\gamma \in [0, 1/6]$, $c_0 > 0$ and $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$. We consider ψ^ε , the exact solution to the Cauchy problem (4.1) - (4.5), and φ^ε , the function given by (4.9). Then the difference*

$$w^\varepsilon(t, x) = \psi^\varepsilon(t, x) - \varphi^\varepsilon(t, x) \chi_\delta^+(x),$$

satisfies: $\exists C > 0, \exists \varepsilon_0 > 0, \forall \varepsilon \in]0, \varepsilon_0]$

$$\sup_{t \in [-T, -t^\varepsilon]} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} + \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbf{R})} \leq C\varepsilon^\gamma,$$

where $t^\varepsilon = c_0 \varepsilon^{1/2 - \gamma}$.

4.2.2 Through the crossing point: comparison with the linear model

As in the linear case, studied by the authors of [61], the classical trajectories and action x^+ , ξ^+ and S^+ are not relevant to build an approximation when one approaches the avoided crossing point: the aim is to show that the exact solution does not remain in the energy level “+” and so, that after time $t = 0$, the wave function is not utterly localized around $(x^+(t), \xi^+(t))$ in the phase space, at leading order. We are going to prove that it has two components on each mode at time $t^\varepsilon = c_0 \varepsilon^{1/2 - \gamma}$. Thus, on this small time interval, we localize the approximation around an “averaged” trajectory which is close to both trajectories “+” and “-” near zero. Indeed both \pm trajectories satisfy

$$x^\pm(t) = \xi_0 t + \mathcal{O}(t^2) \quad ; \quad \xi^\pm(t) = \xi_0 + \mathcal{O}(t),$$

so we introduce the free trajectory, which is an approximation of the previous ones:

$$\tilde{x}(t) = \xi_0 t \quad ; \quad \tilde{\xi}(t) = \xi_0 > 0.$$

In the nonlinear case, the main difficulty that could arise is the presence of the nonlinear contribution at leading order on this time interval. We will see that with a critical nonlinearity, at leading order, there won't be any effect and the mechanism of transition is guided by the system (4.7), as in the linear case (see Equation (3.91) in [61]). We introduce the following rescaled variables:

$$\begin{cases} y = (x - t\xi_0) / \sqrt{\varepsilon} \\ s = t / \sqrt{\varepsilon}, \end{cases}$$

and the rescaled solution v^ε is given by

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} v^\varepsilon \left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i\xi_0^2 t}{2\varepsilon} + \frac{i\xi_0(x - t\xi_0)}{\varepsilon}} \quad (4.10)$$

with $v^\varepsilon(s, y) \in \mathbf{C}^2$, satisfying the following Schrödinger equation

$$\begin{cases} i\partial_s v^\varepsilon + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_x^2 v^\varepsilon - V_{\delta/\sqrt{\varepsilon}}(y + s\xi_0) v^\varepsilon = \kappa\sqrt{\varepsilon}|v^\varepsilon|^2 v^\varepsilon, \\ v^\varepsilon(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) = v_{init.}^\varepsilon(y) \end{cases} \quad (4.11)$$

where

$$V_{\delta/\sqrt{\varepsilon}}(y + s\xi_0) = \begin{pmatrix} (y + s\xi_0) & \delta/\sqrt{\varepsilon} \\ \delta/\sqrt{\varepsilon} & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix}.$$

The function $v_{init.}^\varepsilon(y)$ is chosen so that (4.10) holds at $t = -c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}$ and will be given in details in Section 4.5.1. There exist nonlinear Landau-Zener formulae adapted to nonlinear transition systems; see for instance the following system from [27] and [14].

$$i\partial_t u = \mathcal{H}(\gamma)u, \quad u = (u_1, u_2),$$

with

$$\mathcal{H}(\gamma) = \begin{pmatrix} \gamma(t) + \kappa(|u_2|^2 - |u_1|^2) & \delta \\ \delta & -(\gamma(t) + \kappa(|u_2|^2 - |u_1|^2)) \end{pmatrix},$$

where δ is the coupling constant between the energy levels, κ is a parameter for the nonlinear interaction, and $\gamma(t)$ is the level separation. The reader can also refer to [78] or [93] for other discussions about the nonlinear versions of the Landau-Zener formula. However, we will not use these tools in this paper since the nonlinear effects will not be visible in our transition system.

In fact, v^ε can be approached at leading order by the linear function f solution to (4.7)-(4.8), on the time interval $[-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}]$. Let us first notice that an explicit form of the solution f is computed in [61], using *parabolic cylinder functions*, whose asymptotics are well known (see [57] for details). We need some results on f , how it is ‘‘carried’’ on each eigenspace, in order to deduce some information on v^ε . Writing $f_{1,2}(s, y) = u_{2,1}(s\sqrt{\xi_0} + y/\sqrt{\xi_0}, y)$, we have the following theorem from [44], which contains the only results we need on the asymptotics:

Théorème 4.2.6 (Scattering result from Appendix 9 in [44]). *We consider the following system*

$$-i\partial_s u = \begin{pmatrix} s & \eta \\ \eta & -s \end{pmatrix} u. \quad (4.12)$$

Then there exist (g_1^{s-}, g_2^{s-}) and (g_1^{s+}, g_2^{s+}) two orthonormal bases of solutions to (4.12) such that locally uniformly in η , the following asymptotics hold:

$$\begin{aligned} \text{for } s \rightarrow -\infty, \quad & \begin{cases} g_1^{s-}(s, \eta) = e^{i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + o(1) \\ g_2^{s-}(s, \eta) = e^{-i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + o(1) \end{cases} \\ \text{for } s \rightarrow +\infty, \quad & \begin{cases} g_1^{s+}(s, \eta) = e^{i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + o(1) \\ g_2^{s+}(s, \eta) = e^{-i\Lambda(s, \eta)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + o(1) \end{cases} \end{aligned}$$

where

$$\Lambda(s, \eta) = \frac{s^2}{2} + \frac{\eta^2}{2} \log |s|,$$

and with the following transition rule from components (α_1, α_2) in $(g_1^{s^-}, g_2^{s^-})$ to (β_1, β_2) in $(g_1^{s^+}, g_2^{s^+})$:

$$\begin{pmatrix} \beta_1(\eta) \\ \beta_2(\eta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(\eta) & -\bar{B}(\eta) \\ B(\eta) & A(\eta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1(\eta) \\ \alpha_2(\eta) \end{pmatrix}$$

where

$$A(\eta) = e^{-\pi\eta^2/2}, \quad B(\eta) = \frac{2i}{\sqrt{\pi\eta}} 2^{-i\eta^2/2} e^{-\pi\eta^2/4} \Gamma\left(1 + \frac{i\eta^2}{2}\right) \sinh\left(\frac{\pi\eta^2}{2}\right),$$

and $|A(\eta)|^2 + |B(\eta)|^2 = 1$.

As a consequence, for f we obtain

Corollaire 4.2.7. *Let $\gamma \in]0, 1/6[$. We consider $f = (f_1, f_2)$ the solution to (4.7)-(4.8) on $[-c_0\varepsilon^{-\gamma}, c_0\varepsilon^{-\gamma}]$. Then,*

$$\|f_1(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 = 0 \quad \text{and} \quad \|f_2(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 = \|a\|_{L^2}^2 + o(1),$$

and

$$\|f_1(c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 = (1 - e^{-\frac{\pi c_0^2}{\varepsilon_0}}) \|a\|_{L^2}^2 + o(1)$$

$$\|f_2(c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 = e^{-\frac{\pi c_0^2}{\varepsilon_0}} \|a\|_{L^2}^2 + o(1).$$

Here again, the behaviour of f and its derivatives is important.

Lemme 4.2.8. *Let $\gamma \in]0, 1/6[$ and f be the solution to (4.7) with an initial data given by (4.8). Then if $s \in [-c_0\varepsilon^{-\gamma}, c_0\varepsilon^{-\gamma}]$, we have:*

$$\forall k \in \mathbf{N}, \exists C_k > 0, \quad \|\partial_y^k f(s)\|_{L^2} \leq C_k \varepsilon^{-k\gamma}.$$

Then, we state the following theorem which implies the second point of Theorem 4.1.4 and is proved in Section 4.5.

Théorème 4.2.9. *Let $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$, $\gamma \in]0, 1/6[$ and $c_0 > 0$. We consider v^ε the solution to (4.11), on the time interval $I_\varepsilon = [-c_0\varepsilon^{-\gamma}, c_0\varepsilon^{-\gamma}]$, and f the solution to the linear ODE (4.7)-(4.8) on the same time interval. Then, the function*

$$r^\varepsilon(s, y) = v^\varepsilon(s, y) - f(s, y)$$

satisfies: $\exists C_1, C_2 > 0, \exists \kappa_0 > 0, \forall \kappa \in]0, \kappa_0], \exists \varepsilon_0 > 0, \forall \varepsilon \in]0, \varepsilon_0]$,

$$\sup_{s \in I_\varepsilon} \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \leq C_1 \varepsilon^{\gamma/2} \quad ; \quad \sup_{s \in I_\varepsilon} \|\sqrt{\varepsilon} \partial_y r^\varepsilon(s)\|_{L^2} = C_2 \varepsilon^\gamma.$$

Let us mention that Corollary 4.1.6 is a consequence of Corollary 4.2.7 and Theorem 4.2.9 as we shall see in Section 4.6.

4.3 Properties of the profile u_δ in the adiabatic region

In this section, we prove Theorem 4.2.3 and study the profile, solution to the Cauchy problem (4.6) when $t = 0$. There are two difficulties. The first one is linked with the small size of the gap δ since the function $\lambda_\delta^{(2)}(x(t)) = \mathcal{O}(\delta^{-1})$ when t tends to zero. The second one is that we have no Strichartz estimates for the operator

$$-\frac{1}{2} \partial_y^2 + \frac{1}{2} \lambda_\delta^{(2)}(x(t)) y^2.$$

In order to avoid dealing with the δ -dependent potential, we use a Lens transform that allows to drop the potential and to use “free Strichartz estimates”.

4.3.1 Preliminary results

We introduce the tools and some results that we need in our proofs.

In many computations in this paper, the function $\lambda_\delta^{+(2)}(x(t))$ has to be controlled. We will use the following lemma.

Lemme 4.3.1 (From Proposition 2.2 of [61]). *Let $T > 0$. Then, there exists $\sigma > 0$, such that*

$$\exists \delta_0 > 0, \forall \delta \in]0, \delta_0], \int_0^T \left| \lambda_\delta^{(2)}(x(s)) \right| ds \leq \sigma(1 + T).$$

From now on, we shall take $\delta \in]0, \delta_0]$.

Proof from [61]. Asymptotic estimates when $t \rightarrow 0$ and $\delta \rightarrow 0$:

We write $x(t) = x(0) + t.\dot{x}(0) + \mathcal{O}(t^2) = t.\xi_0 + \mathcal{O}(t^2)$. Then $x(t)^2 = t^2\xi_0^2 + \mathcal{O}(t^3)$. This gives for $\lambda_\delta^{(2)}(x(t))$:

$$\begin{aligned} \lambda_\delta^{(2)}(x(t)) &= \frac{\delta^2}{(x(t)^2 + \delta^2)^{3/2}} \\ &= \frac{\delta^2}{(\xi_0^2 t^2 + \delta^2)^{3/2}} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{t^3}{t^2\xi_0^2 + \delta^2}\right) \right) \\ &= \frac{\delta^2}{(\xi_0^2 t^2 + \delta^2)^{3/2}} + \mathcal{O}(1). \end{aligned} \tag{4.13}$$

Then we use (4.13) to write

$$\begin{aligned} \int_0^t \left| \lambda_\delta^{(2)}(x(s)) \right| ds &\leq \sigma \int_0^t \frac{\delta^2}{(s^2 + \delta^2)^{3/2}} + 1 ds \\ &\leq \sigma \int_0^T \frac{\delta^2}{(s^2 + \delta^2)^{3/2}} + 1 ds \\ &\leq \sigma \left[\frac{s}{(s^2 + \delta^2)^{1/2}} + s \right]_0^T \leq \sigma(1 + T). \end{aligned}$$

□

We now introduce μ_δ, ν_δ , solutions to

$$\begin{cases} \ddot{\mu}_\delta + \lambda_\delta^{(2)}(x(t))\mu_\delta = 0; & \mu_\delta(0) = 0; & \dot{\mu}_\delta(0) = 1, \\ \ddot{\nu}_\delta + \lambda_\delta^{(2)}(x(t))\nu_\delta = 0; & \nu_\delta(0) = 1; & \dot{\nu}_\delta(0) = 0. \end{cases} \tag{4.14}$$

Let us notice that for fixed $\delta > 0$, there exists a unique couple of solutions (μ_δ, ν_δ) satisfying (4.14) on some maximal interval of existence $[0, T_\delta]$.

Proposition 4.3.2. *We consider μ_δ, ν_δ solutions to (4.14). There exist $T_0 > 0$ such that $T_0 \leq T_\delta$, independently of δ , and $C > 0$ such that*

$$\forall \delta \in]0, \delta_0], \forall t \in [0, T_0], |\mu_\delta(t)| + |\nu_\delta(t)| + |\dot{\nu}_\delta(t)| + \left| \frac{1}{\nu_\delta(t)} \right| \leq C.$$

Moreover, $t \mapsto \frac{\mu_\delta(t)}{\nu_\delta(t)}$ is an increasing function on $[0, T_0]$.

In the rest of this paper, in order to simplify the notations, we will not write the dependence on δ of these functions. Lemma 4.3.1 is a crucial tool to obtain the preceding proposition.

Proof. Let us first study ν and $\dot{\nu}$.
For $0 \leq t \leq T_\delta$, we write:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \nu \\ \dot{\nu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\lambda_\delta^{(2)}(x(t)) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu \\ \dot{\nu} \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} \nu(0) \\ \dot{\nu}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

We deduce

$$\begin{pmatrix} \nu(t) \\ \dot{\nu}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \int_0^t \begin{pmatrix} \dot{\nu}(s) \\ -\lambda_\delta^{(2)}(x(s))\nu(s) \end{pmatrix} ds.$$

We introduce the following notation:

$$|A|_\infty = \sup_{s \in [0, T_0]} |A(s)|.$$

We have

$$\begin{aligned} \left| \int_0^t \dot{\nu}(s) ds \right| &\leq |\dot{\nu}|_\infty |t|, \\ \left| \int_0^t -\lambda_\delta^{(2)}(x(s))\nu(s) ds \right| &\leq |\nu|_\infty \int_0^{T_0} |\lambda_\delta^{(2)}(x(s))| ds \leq \sigma(1 + T_0)|\nu|_\infty. \end{aligned}$$

It gives

$$\begin{aligned} |\nu|_\infty &\leq 1 + |t| |\dot{\nu}|_\infty \\ |\dot{\nu}|_\infty &\leq \sigma(1 + T_0)|\nu|_\infty, \end{aligned}$$

and then

$$\begin{aligned} |\nu|_\infty &\leq 1 + \sigma(1 + T_0) |t| |\nu|_\infty \\ |\dot{\nu}|_\infty &\leq \sigma(1 + T_0)|\nu|_\infty. \end{aligned}$$

We choose T_0 small enough at the beginning, such that for all $0 \leq t \leq T_0$, we have

$$\sigma(1 + T_0) |t| \leq \frac{1}{2}, \quad \text{where } T_0 \leq \frac{\sqrt{1 + 2/\sigma} - 1}{2},$$

then

$$|\nu|_\infty \leq C_1 \quad ; \quad |\dot{\nu}|_\infty \leq C_2,$$

where C_1, C_2 are independent of δ .

We now study $(\nu(t))^{-1}$. Since $\nu(0) = 1$ we have

$$|\nu(t) - 1|_\infty \leq |t| |\dot{\nu}(t)|_\infty.$$

We deduce $1 - C_2|t| \leq |\nu(t)|_\infty$, which gives for t small enough $|\nu(t)|_\infty \geq \frac{1}{2}$ and so $(\nu(t))^{-1} \leq 2$. Using the same arguments, we finally compute for μ :

$$\begin{aligned} |\mu|_\infty &\leq |t| + \sigma|t|(1 + T_0)|\mu|_\infty \\ |\dot{\mu}|_\infty &\leq 1 + \sigma(1 + T_0)|\mu|_\infty. \end{aligned}$$

And so, choosing T_0 small enough, as we have already done, we find

$$|\mu|_\infty \leq 2|t| \leq 2T_0 \leq C_4,$$

and taking $C = \max \{C_1, C_2, C_3, C_4\}$, the desired estimates are proved.

It is then easy to see that $t \mapsto \frac{\mu(t)}{\nu(t)}$ is an increasing function on our time interval: in fact

$$\frac{d}{dt} (\dot{\mu}\nu - \dot{\nu}\mu) = \ddot{\mu}\nu - \ddot{\nu}\mu = 0,$$

and so $\dot{\mu}\nu - \dot{\nu}\mu = 1$ for all $t \in [0, T_0]$. We deduce that

$$\left(\frac{\mu}{\nu}\right)' = \frac{\dot{\mu}\nu - \dot{\nu}\mu}{\nu^2} = \frac{1}{\nu^2},$$

is nonnegative on $[0, T_0]$. □

4.3.2 Lens transform and Free Strichartz estimates

In order to remove the potential, we now introduce the Lens transform, from [22], which relies upon the functions μ, ν :

Proposition 4.3.3. *Let $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$ and $T_0 > 0$, μ, ν as in Proposition 4.3.2. We set*

$$s = \frac{\mu(t)}{\nu(t)}, \quad t \in [0, T_0],$$

and

$$\mathcal{H}(s) = \mathcal{H}_\delta(s) = \nu \left(\left(\frac{\mu}{\nu} \right)^{-1}(s) \right) \kappa, \quad s \in \left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)} \right].$$

We consider v the solution to:

$$i\partial_s v + \frac{1}{2}\partial_x^2 v = \mathcal{H}(s)|v|^2 v \quad ; \quad v(0, x) = u_\delta(-T_0, x). \quad (4.15)$$

Set

$$u_\delta(t - T_0, x) = \frac{1}{\sqrt{\nu(t)}} v \left(\frac{\mu(t)}{\nu(t)}, \frac{x}{\nu(t)} \right) e^{\frac{i\nu(t)}{\nu(t)} \cdot \frac{x^2}{2}}, \quad \forall t \in [0, T_0],$$

then u_δ is the solution to (4.6):

$$i\partial_t u + \frac{1}{2}\partial_x^2 u - \frac{1}{2}\lambda_\delta^{(2)}(x(t))x^2 u = \kappa|u|^2 u \quad ; \quad u(-T, x) = a(x).$$

Remarque 4.3.4. In [22], the statement is given in a more general case, for higher dimensions, with potentials of the form $\langle \Omega(t)x|x \rangle$, with $\Omega \in \mathcal{C}(\mathbf{R}, \mathbf{R})$ and isotropic. More general nonlinearities, with time-dependent coefficients, are also allowed under specific conditions.

Remarque 4.3.5. Using Proposition 4.3.2, it is easy to see that $\frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)}$ is bounded independently of δ and so is $\mathcal{H}(s)$ on $\left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)} \right]$.

The conservation of mass of the profile u and Proposition 4.3.2 allow us to infer existence of the solution v for fixed δ , on the bounded time interval $\left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)} \right]$. The next step is to study the derivatives and momenta of v , solution to (4.15). We introduce *free Strichartz estimates*, from [55], [95] and [97].

Définition 4.3.6 (Admissible pairs). *A pair (p, q) is admissible if $2 \leq q \leq \infty$ and*

$$\frac{2}{p} = \frac{1}{2} - \frac{1}{q}.$$

We now introduce the following notation to state Strichartz estimates.

Notation. For $1 \leq p \leq +\infty$, we denote by p' , the dual exponent:

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1.$$

Théorème 4.3.7. *Let $(p, q), (p_1, q_1), (p_2, q_2)$ be admissible pairs. Let us introduce*

$$u(t) = e^{-i\frac{t}{2}\partial_x^2} u_0 \quad \text{and} \quad v(t) = \int_{\{s \leq t\}} e^{i\frac{t-\tau}{2}\partial_x^2} f(\tau) d\tau.$$

– *There exists $C = C(q)$ such that for all $u_0 \in L^2(\mathbf{R})$, we have for all $s \in \mathbf{R}$*

$$\|u\|_{L^p(\mathbf{R}, L^q(\mathbf{R}))} \leq C \|u(s)\|_{L^2(\mathbf{R})} = C \|u_0\|_{L^2(\mathbf{R})}. \quad (4.16)$$

– *There exists $C = C(q_1, q_2)$ such that for all $f \in L^{p'_2}(\mathbf{R}, L^{q'_2}(\mathbf{R}))$ we have*

$$\|v\|_{L^{p_1}(\mathbf{R}, L^{q_1}(\mathbf{R}))} \leq C \|f\|_{L^{p'_2}(\mathbf{R}, L^{q'_2}(\mathbf{R}))}. \quad (4.17)$$

4.3.3 Control of v

Using the previous results, we can study the derivatives and momenta of v , given by (4.15).

Proposition 4.3.8. *Let $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$ and $T_0 > 0$ the fixed time given by Proposition 4.3.2. Let v be the solution to the Cauchy problem (4.15), with*

$$\mathcal{H}(s) = \nu \left(\left(\frac{\mu}{\nu} \right)^{-1} (s) \right) \kappa.$$

Then, for all $k \in \mathbf{N}$, there exists $C_k > 0$ such that for all admissible pairs (p, q) and for all $\delta \in]0, \delta_0]$

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}, \alpha + \beta = k, \quad \|x^\alpha \partial_x^\beta v\|_{L^p\left(\left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)}\right], L^q\right)} \leq C_k. \quad (4.18)$$

Proof. We proceed by induction on k .

Case $k = 0$: Thanks to the conservation of the L^2 -norm of u , and Proposition 4.3.2 we deduce that (4.18) is true for the pair $(\infty, 2)$. We now prove (4.18) for an other admissible pair. We consider an interval $I = [s, s + \tau]$, where $s \in \left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)}\right[$ and $\tau > 0$. Using Strichartz estimates given by Theorem 4.3.7, we write

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^s(I, L^4)} &\leq \tilde{C} \left[\|v(s)\|_{L^2} + \|\mathcal{H}(s)|v|^2 v\|_{L^{s/7}(I, L^{4/3})} \right] \\ &\leq C \left[\|a\|_{L^2} + \|v\|_{L^{8/3}(I, L^4)}^2 \|v\|_{L^s(I, L^4)} \right] \\ &\leq C \left[\|a\|_{L^2} + \sqrt{\tau} \|v\|_{L^s(I, L^4)}^2 \|v\|_{L^s(I, L^4)} \right] \\ &\leq C \left[\|a\|_{L^2} + \sqrt{\tau} \|v\|_{L^s(I, L^4)}^3 \right], \end{aligned}$$

where we have used Remark 4.3.5, Hölder inequalities and that $\|v(s)\|_{L^2}$ is bounded independently of δ . We use the following Bootstrap argument to prove that $\|v\|_{L^s(I, L^4)}$ is bounded: We suppose $\|v\|_{L^s(I, L^4)} \leq M$, for $M > 0$. Choosing M and τ such that

$$\begin{aligned} C \|a\|_{L^2} &\leq \frac{M}{4} \quad \text{and} \quad C \sqrt{\tau} \|v\|_{L^s(I, L^4)}^3 \leq \frac{M}{4} \\ C \|a\|_{L^2} &\leq \frac{M}{4} \quad \text{and} \quad \tau \leq \left(\frac{1}{4CM^2} \right)^2, \end{aligned}$$

so, choosing

$$M = 4C\|a\|_{L^2} + 1 \quad ; \quad \tau_0 = \frac{1}{(4CM^2)^2},$$

the previous estimate gives

$$\|v\|_{L^s(I, L^4)} \leq \frac{M}{2},$$

and so the assumption on $|v|_{L^s(I, L^4)}$ holds on any time interval of size smaller than τ_0 . Finally, we have for $I = [s, s + \tau]$, with $\tau \leq \tau_0$

$$\|v\|_{L^s(I, L^4)} \leq C(\|a\|_{L^2} + M).$$

Since we only have a finite number of intervals of size τ_0 in the whole considered interval, we can deduce

$$\|v\|_{L^s\left(\left[0, \frac{\mu(\tau_0)}{\nu(\tau_0)}\right], L^4\right)} \leq C,$$

where C is independent of δ . The other pairs are easily obtained, using Strichartz estimates and the previous bound.

Case $k \geq 1$: We now consider some k ; and assume that

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbf{N}, \quad \alpha + \beta = k - 1, \quad \|x^\alpha \partial_x^\beta v\|_{L^p\left(\left[0, \frac{\mu(\tau_0)}{\nu(\tau_0)}\right], L^q\right)} \leq C_{k-1}$$

The equations for the k -derivative and momentum are:

$$\begin{aligned} i\partial_s(\partial_x^k v) + \frac{1}{2}\partial_x^2(\partial_x^k v) &= \mathcal{H}(s)\partial_x^k(|v|^2 v) \\ i\partial_s(x^k v) + \frac{1}{2}\partial_x^2(x^k v) &= \mathcal{H}(s)|v|^2(x^k v) + \frac{1}{2}[\partial_x^2, x^k]v. \end{aligned}$$

We recall the following result, which is a consequence of [100], and that will be useful to drop all “mixed” norms of derivatives and momenta:

$$\sum_{|\alpha|+|\beta|\leq k} \|x^\alpha \partial_x^\beta v\|_{L^q} \leq C \left[\|(1+|x|)^k v\|_{L^q} + \sum_{|\alpha|\leq k} \|\partial_x^\alpha v\|_{L^q} \right].$$

We consider $I = [s, s + \tau]$, $\tau > 0$ and thanks to Strichartz estimates and Remark 4.3.5:

$$\begin{aligned} \|\partial_x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\partial_x^k v\|_{L^s(I, L^4)} &\lesssim \|\partial_x^k v(s)\|_{L^2} + \|\partial_x^k(|v|^2 v)\|_{L^{s/7}(I, L^{4/3})} \\ \|x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|x^k v\|_{L^s(I, L^4)} &\lesssim \|x^k v(s)\|_{L^2} + \| |v|^2(x^k v) \|_{L^{s/7}(I, L^{4/3})} + \|[\partial_x^2, x^k]v\|_{L^1(I, L^2)}. \end{aligned}$$

We write

$$\begin{aligned} |\partial_x^k(|v|^2 v)| &\lesssim |v|^2 |\partial_x^k v| + \sum_{j \in J} |w_{j_1}| |w_{j_2}| |w_{j_3}|, \quad J \subset \mathbf{N}, \\ [\partial_x^2, x^k]v &= C_1 x^{k-1} \partial_x v + C_2 x^{k-2} v, \end{aligned}$$

where w_{j_l} is a derivative of u or \bar{u} of order at most $k - 1$. So

$$\begin{aligned} \|\partial_x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\partial_x^k v\|_{L^s(I, L^4)} &\lesssim \|\partial_x^k v(s)\|_{L^2} + \|v\|_{L^{s/3}(I, L^4)}^2 \|\partial_x^k v\|_{L^s(I, L^4)} \\ &\quad + \sum_{j \in J} \|w_{j_1}\|_{L^s(I, L^4)} \|w_{j_2}\|_{L^s(I, L^4)} \|w_{j_3}\|_{L^s(I, L^4)} \\ &\lesssim K \left[\|\partial_x^k v(s)\|_{L^2} + \tau^{1/2} \|\partial_x^k v\|_{L^s(I, L^4)} + \tau^{1/2} C_{k-1} \right], \end{aligned}$$

where we have used Hölder, the fact that we are in the one-dimensional case, the estimate obtained for $k = 0$ and the induction hypothesis. Then, we choose τ such that $K\tau^{1/2} \leq 1/2$ and we obtain

$$\|\partial_x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\partial_x^k v\|_{L^s(I, L^4)} \lesssim \|\partial_x^k v(s)\|_{L^2} + C.$$

Then, we analyze the other term, with the same tools:

$$\begin{aligned}
\|x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|x^k v\|_{L^8(I, L^4)} &\lesssim \|x^k v(s)\|_{L^2} + \|v\|_{L^{8/3}(I, L^4)}^2 \|x^k v\|_{L^8(I, L^4)} \\
&\quad + \tau \|x^{k-1} \partial_x v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \tau \|x^{k-2} v\|_{L^\infty(I, L^2)} \\
&\lesssim \|x^k v(s)\|_{L^2} + \tau^{1/2} \|x^k v\|_{L^8(I, L^4)} + C_{k-2} \\
&\quad + \tau [\|x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|\partial_x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + C_{\leq k-1}] \\
&\leq K \left[\|x^k v(s)\|_{L^2} + \tau^{1/2} \|x^k v\|_{L^8(I, L^4)} \right. \\
&\quad \left. + \tau \|x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \tau \|\partial_x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + C \right].
\end{aligned}$$

We choose τ small: $K\tau^{1/2} \leq 1/2$ and $K\tau \leq 1/2$.

For τ such that $\tau \leq \inf(1/(2K); 1/(4K^2))$, we have

$$\|x^k v\|_{L^\infty(I, L^2)} + \|x^k v\|_{L^8(I, L^4)} \lesssim \|x^k v(s)\|_{L^2} + \|\partial_x^k v(s)\|_{L^2} + C.$$

Since we work on a finite time interval, and τ is bounded by a constant independent of s, δ , we have a finite number of intervals of size τ in it:

$$\|x^k v(s)\|_{L^2} + \|\partial_x^k v(s)\|_{L^2} \lesssim 1, \quad \forall s \in \left[0, \frac{\mu(T_0)}{\nu(T_0)}\right].$$

Bounds for other admissible pairs are easily obtained using Strichartz estimates and the previous estimate. \square

4.3.4 Control of the profile

We will now prove Theorem 4.2.3. We recall:

$$u_\delta(t - T_0, x) = \frac{1}{\sqrt{\nu(t)}} v\left(\frac{\mu(t)}{\nu(t)}, \frac{x}{\nu(t)}\right) e^{\frac{i\nu(t)}{\nu(t)} \cdot \frac{x^2}{2}}.$$

The mass-conservation of the profile gives the result for $k = 0$. For $k \geq 1$, we still analyze full derivatives and momenta of order k only, and not all ‘‘mixed’’ norms, thanks to [100]. Using the previous formula, we can compute for all $t \in [0, T_0]$:

$$\begin{aligned}
\|x^k u_\delta(t - T_0)\|_{L^2}^2 &= \nu(t)^{2k} \left\| y^k v\left(\frac{\mu(t)}{\nu(t)}\right) \right\|_{L^2}^2 \leq C \\
\|\partial_x^k u_\delta(t - T_0)\|_{L^2}^2 &\leq \int \frac{1}{\nu(t)} \sum_{\alpha \leq k} \left| \nu(t)^{-\alpha} \partial_y^\alpha v\left(\frac{\mu(t)}{\nu(t)}\right) \right|^2 \times \left(\partial_y^{k-\alpha} e^{\frac{i\nu(t)}{\nu(t)} \cdot \frac{x^2}{2}} \right)^2 dx
\end{aligned}$$

We use Faa di Bruno’s formula (see for instance [90] and references given there) to deal with the derivative of the exponential and notice that we obtain a sum of terms of the form $\nu^{-2\gamma} \partial_x^\gamma v \times \frac{i^\gamma}{\nu^{\gamma/2}} y^{\gamma/2} v$, with exponents smaller than $2k$. Using Propositions 4.3.2 and 4.3.8 we deduce that all these terms are bounded by constants independent of δ and t ; we finally obtain for t instead of $t - T_0$:

$$\|x^k u(t)\|_{L^2} + \|\partial_x^k u(t)\|_{L^2} \leq C, \quad \forall t \in [-T_0, 0].$$

From this study of the profile, we easily deduce the result on φ^ε stated in Corollary 4.2.4.

The task is now to prove the validity of the approximation given by (4.9).

4.4 Convergence of the approximation in the adiabatic region.

In this section, we prove Theorem 4.2.5. To simplify notation, we will drop the sign “+” when no confusion can arise.

4.4.1 Strategy of the proof

We recall the equation satisfied by ψ^ε :

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2\psi^\varepsilon - V_\delta(x)\psi^\varepsilon = \kappa\varepsilon^{3/2}|\psi^\varepsilon|^2\psi^\varepsilon; \\ \psi^\varepsilon(-T, x) \text{ given by (4.5),} \end{cases}$$

and the definition (4.9) of φ^ε ,

$$\varphi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4}u_\delta\left(t, \frac{x - x^+(t)}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{iS^+(t)}{\varepsilon} + \frac{i\xi^+(t)\cdot(x - x^+(t))}{\varepsilon}}.$$

We first notice that φ^ε satisfies:

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\varphi^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2\varphi^\varepsilon - \lambda_\delta(x)\varphi^\varepsilon = \kappa\varepsilon^{3/2}|\varphi^\varepsilon|^2\varphi^\varepsilon - \mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x)\varphi^\varepsilon; \\ \varphi^\varepsilon(-T, x) = \varepsilon^{-1/4}a\left(t, \frac{x - x(-T)}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{iS(-T)}{\varepsilon} + \frac{i\xi(-T)\cdot(x - x(-T))}{\varepsilon}} \end{cases}$$

where

$$\mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x) = \frac{\lambda^{(3)}(g(t, x))}{6}(x - x(t))^3, \quad \text{with } g(t, x) = \tau x + (1 - \tau)x(t), \quad \tau = \tau(t, x), \quad \tau \in]0, 1[. \quad (4.19)$$

We want to study the term w^ε given by $w^\varepsilon = \psi^\varepsilon - \varphi^\varepsilon\chi_\delta$; its equation is

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t w^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_x^2 w^\varepsilon - V_\delta(x)w^\varepsilon = \varepsilon NL^\varepsilon + \varepsilon L^\varepsilon; \\ w^\varepsilon(-T, x) = 0 \end{cases} \quad (4.20)$$

where

$$\begin{aligned} NL^\varepsilon &= \kappa\varepsilon^{1/2}(|\psi^\varepsilon|^2\psi^\varepsilon - |\varphi^\varepsilon|^2\varphi^\varepsilon\chi_\delta) \\ L^\varepsilon &= \varepsilon^{-1}\mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x)\varphi^\varepsilon\chi_\delta + \varepsilon\partial_x\varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta + \frac{\varepsilon}{2}\varphi^\varepsilon d^2\chi_\delta. \end{aligned}$$

Using (4.3), it is easy to see that some terms are too big (in L^2) and will present an obstacle to prove that the remainder is small. Thus, we need a finer analysis of the eigenvectors.

Besides, a rough estimate suggests that the second term in L^ε presents an $\mathcal{O}(1)$ contribution. Nevertheless after a careful analysis of the eigenvectors to find finer estimates, presented in the next subsection, and using the minimal gap size δ , as it is done in [61] we will be able to study all linear terms and their derivatives in L^2 . The last subsection will be devoted to the nonlinear terms, which will be handled by a bootstrap argument, and this will complete the proof of Theorem 4.2.5.

4.4.2 About the eigenvectors

We need more refined estimates than (4.3). We recall that the eigenvectors of the potential are of the form:

$$\chi_\delta^\pm(x) = \begin{pmatrix} \Theta_1^\pm(x) \\ \Theta_2^\pm(x) \end{pmatrix},$$

with

$$\Theta_1^+(x) = \frac{\delta}{(2\sqrt{x^2 + \delta^2}(\sqrt{x^2 + \delta^2} - x))^{1/2}} = -\Theta_2^-(x);$$

$$\Theta_2^+(x) = \frac{\sqrt{x^2 + \delta^2} - x}{(2\sqrt{x^2 + \delta^2}(\sqrt{x^2 + \delta^2} - x))^{1/2}} = \Theta_1^-(x),$$

We can rewrite the coordinates:

$$\Theta_1^+(x) = F\left(\frac{x}{\delta}\right) = -\Theta_2^-(x) \quad ; \quad \Theta_1^-(x) = G\left(\frac{x}{\delta}\right) = \Theta_2^+(x),$$

with

$$F(y) = \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right) \quad ; \quad G(y) = \sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right), \quad \text{for } x \geq 0$$

$$F(y) = -\sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right) \quad ; \quad G(y) = \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right), \quad \text{for } x \leq 0.$$

We find for $y \neq 0$:

$$\left[\cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)\right]' = \frac{-1}{2} \frac{1}{1+y^2} \sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)$$

$$\left[\sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)\right]' = \frac{1}{2} \frac{1}{1+y^2} \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)$$

$$\left[\cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)\right]'' = \frac{-y}{(1+y^2)^2} \sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right) - \frac{1}{4} \frac{1}{(1+y^2)^2} \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)$$

$$\left[\sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)\right]'' = \frac{y}{(1+y^2)^2} \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right) - \frac{1}{4} \frac{1}{(1+y^2)^2} \sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{y}\right)\right)$$

So we deduce

$$|d\chi_\delta^\pm(x)| \lesssim \frac{\delta}{x^2 + \delta^2} \lesssim \frac{1}{\delta} \frac{1}{\left(\frac{x}{\delta}\right)^2 + 1} \quad (4.21)$$

$$|d^2\chi_\delta^\pm(x)| \lesssim \frac{\delta}{(x^2 + \delta^2)^{3/2}} \lesssim \frac{1}{\delta^2} \frac{1}{\left(\left(\frac{x}{\delta}\right)^2 + 1\right)^{3/2}}. \quad (4.22)$$

4.4.3 Analysis of the linear terms

We recall the form of L^ε which stands for the linear term of (4.20):

$$L^\varepsilon = \varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon \chi_\delta + \varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta + \frac{\varepsilon}{2} \varphi^\varepsilon d^2 \chi_\delta.$$

In this subsection, we will prove the following lemma:

Lemme 4.4.1. *Let $a \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$ and $\Lambda > 0$ be a fixed constant. Then, there exists a constant $C_L > 0$ independent of ε , such that for all $t \in [-T, -\Lambda\sqrt{\varepsilon}]$, we have*

$$\|L^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} + \|\varepsilon \partial_x L^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}$$

In order to prove this lemma, we will analyze each term and its derivative in L^2 .

• **Analysis of $\frac{\varepsilon}{2}\varphi^\varepsilon.d^2\chi_\delta$:**

We see that $\left\|\frac{\varepsilon}{2}\varphi^\varepsilon.d^2\chi_\delta(t)\right\|_{L^2} \lesssim \varepsilon|d^2\chi_\delta|_\infty\|\varphi^\varepsilon(t)\|_{L^2} \lesssim \frac{\varepsilon}{\delta^2}$,

where we have used (4.3). This rough estimate is not good enough: it presents an $\mathcal{O}(1)$ contribution for $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$. So, using (4.22), we find for $-T \leq t \leq -\Lambda\sqrt{\varepsilon}$:

$$\begin{aligned} \|\varepsilon\varphi^\varepsilon.d^2\chi_\delta(s)\|_{L^1([-T;t],L^2)} &\lesssim \int_{-T}^t \left[\int_{x \in \mathbf{R}} \varepsilon^2 \varepsilon^{-1/2} |d^2\chi_\delta(x)|^2 |u(s, \dots)|^2 dx \right]^{1/2} ds \\ &\lesssim \int_{-T}^t \left[\int_{|x| \geq \theta|s|} \dots + \int_{|x| \leq \theta|s|} \dots \right]^{1/2} ds \\ &\lesssim \int_{-T}^t \left[I^{1/2} + II^{1/2} \right] ds. \end{aligned}$$

For I , since $|x| \geq \theta|s|$, we write $\left|\frac{x}{\delta}\right|^{-1} \leq \frac{\delta}{\theta|s|}$, and obtain

$$I \lesssim \int_{|x| \geq \theta|s|} \varepsilon^2 \varepsilon^{-1/2} \frac{1}{\delta^4} \times \frac{\delta^6}{|s|^6} |u(s, \dots)|^2 dx \lesssim \frac{\varepsilon^2 \delta^2}{|s|^6},$$

where we have used mass-conservation of the profile. For II , we write

$$II \lesssim \int_{|x| \leq \theta|s|} \varepsilon^2 \varepsilon^{-1/2} \frac{1}{\delta^4} \frac{1}{\left(1 + \left|\frac{x}{\delta}\right|^2\right)^3} \times \frac{\sqrt{\varepsilon}^{2M}}{|x - x(s)|^{2M}} \frac{|x - x(s)|^{2M}}{\sqrt{\varepsilon}^{2M}} |u(s, \dots)|^2 dx$$

where M is an integer, $M > 1$.

We notice that since $|x| \leq \theta|s|$, we have $|x - x(s)| \geq \xi_0|s| - \theta|s|$. For θ small enough, we can write $|x - x(s)| \geq \xi_0|s|/2$, and so

$$II \lesssim \int_{y \in \mathbf{R}} \varepsilon^2 \frac{1}{\delta^4} \frac{\sqrt{\varepsilon}^{2M}}{|s|^{2M}} \times y^{2M} |u(s, y)|^2 dy \lesssim \frac{\varepsilon^2 \sqrt{\varepsilon}^{2M}}{\delta^4 |s|^{2M}},$$

where we have used that all momenta of the profile are bounded by constants independent of ε and t . Finally, we compute

$$\begin{aligned} \|\varepsilon\varphi^\varepsilon.d^2\chi_\delta(s)\|_{L^1([-T;t],L^2)} &\lesssim \int_{-\infty}^t \frac{\varepsilon\delta}{|s|^3} + \frac{\varepsilon\sqrt{\varepsilon}^M}{\delta^2|s|^M} ds \\ &\lesssim \frac{\varepsilon\delta}{t^2} + \frac{\varepsilon\sqrt{\varepsilon}^M}{\delta^2} \frac{1}{t^{M-1}} \\ &\lesssim \frac{\varepsilon\sqrt{\varepsilon}}{t^2} \end{aligned} \tag{4.23}$$

with $\delta = c\sqrt{\varepsilon}$, and where we have only kept the worst contribution. In fact, thanks to Theorem 4.2.3, all momenta of the profile are bounded on the time interval we consider. So we can choose M as big as we want.

We estimate the derivative in the same fashion:

$$\varepsilon\partial_x(\varepsilon\varphi^\varepsilon.d^2\chi_\delta) = \varepsilon^2\varphi^\varepsilon.d^3\chi_\delta + \varepsilon^{-1/4} e^{\frac{iS(t)}{\varepsilon} + \frac{i\xi(t) \cdot (x-x(t))}{\varepsilon}} (i\varepsilon\xi(t)u(\dots) + \varepsilon\sqrt{\varepsilon}u(\dots)) d^2\chi_\delta.$$

It is sufficient to use (4.3) to deal with the following terms:

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^2\varphi^\varepsilon.d^3\chi_\delta\|_{L^1([-T;t],L^2)} &\lesssim \frac{\varepsilon^2}{\delta^3} \lesssim \varepsilon^{1/2} \\ \|\varepsilon^{-1/4}\varepsilon\sqrt{\varepsilon}u(\dots)d^2\chi_\delta\|_{L^1([-T;t],L^2)} &\lesssim \frac{\varepsilon\sqrt{\varepsilon}}{\delta^2} \lesssim \varepsilon^{1/2}, \end{aligned}$$

and we notice that since $|\xi(t)|$ is bounded (Remark 4.1.3), we have thanks to (4.23)

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^{-1/4} i \varepsilon \xi(s) u(s, \frac{x-x(s)}{\sqrt{\varepsilon}}) d^2 \chi_\delta\|_{L^1([-T;t], L^2)} &\simeq \|\varepsilon \varphi^\varepsilon \cdot d^2 \chi_\delta(s)\|_{L^1([-T;t], L^2)} \\ &\lesssim \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon}}{t^2}. \end{aligned}$$

So, we obtain

$$\|\varepsilon \partial_x (\varepsilon \varphi^\varepsilon \cdot d^2 \chi_\delta)\|_{L^1([-T;t], L^2)} \lesssim \sqrt{\varepsilon} + \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon}}{t^2}. \quad (4.24)$$

• **Analysis of $\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d \chi_\delta$**

We have $\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d \chi_\delta = \varepsilon^{-1/4} e^{\dots} [\sqrt{\varepsilon} \partial_x u + i \xi(t) u] d \chi_\delta$, and we study successively each part. We use (4.21) and compute

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^{-1/4} \sqrt{\varepsilon} \partial_x u \cdot d \chi_\delta(s)\|_{L^1([-T;t], L^2)} &\lesssim \int_{-T}^t \left[\int_{x \in \mathbf{R}} \varepsilon \varepsilon^{-1/2} |\partial_x u(\dots)|^2 \frac{1}{\delta^2} \frac{1}{\left(1 + \left|\frac{x}{\delta}\right|^2\right)^2} dx \right]^{1/2} ds \\ &\lesssim \int_{-T}^t \left(\int_{|x| \geq \theta|s|} \dots + \int_{|x| \leq \theta|s|} \dots \right)^{1/2} ds \\ &\lesssim \int_{-T}^t I^{1/2} + II^{1/2}. \end{aligned}$$

For I , since $|x| \geq \theta|s|$, we have

$$I \lesssim \int_{|x| \geq \theta|s|} \varepsilon \varepsilon^{-1/2} |\partial_x u(\dots)|^2 \frac{1}{\delta^2} \frac{\delta^4}{|s|^4} dx \lesssim \frac{\varepsilon \delta^2}{|s|^4},$$

where we have used that the H^1 -norm of the profile is bounded. Integrating in time, we obtain

$$\int_{-T}^t I^{1/2} ds \lesssim \frac{\varepsilon}{|t|}$$

We then write:

$$II \lesssim \int_{|x| \leq \theta|s|} \varepsilon \varepsilon^{-1/2} \frac{1}{\delta^2} \frac{1}{\left(1 + \left|\frac{x}{\delta}\right|^2\right)^2} \times \frac{\sqrt{\varepsilon}^{2M}}{|x-x(s)|^{2M}} \frac{|x-x(s)|^{2M}}{\sqrt{\varepsilon}^{2M}} |\partial_x u(s, \dots)|^2 dx,$$

and arguing as in the previous analysis, using the control of all momenta of the profile, and integrating in time, we find

$$\int_{-T}^t II^{1/2} dt \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}^M}{|t|^{M-1}},$$

where $M > 1$ can be chosen as big as we want. So, keeping only the worst contribution, we obtain:

$$\|\varepsilon^{-1/4} \sqrt{\varepsilon} \partial_x u \cdot d \chi_\delta\|_{L^1([-T;t], L^2)} \lesssim \frac{\varepsilon}{|t|}.$$

We now need to estimate the second contribution of $\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta$, we write

$$\left| i\varepsilon^{-1/4} \xi(t) u(\dots) \cdot d\chi_\delta \right| \lesssim \left| \frac{\delta}{\delta^2 + x^2} u(\dots) \right|.$$

So

$$\begin{aligned} \|i\varepsilon^{-1/4} \xi(t) u(\dots) \cdot d\chi_\delta\|_{L^1([-T, t]; L^2)} &\lesssim \int_{-T}^t \left[\int_{x \in \mathbf{R}} \varepsilon^{-1/2} \frac{\delta^2}{(x^2 + \delta^2)^2} |u(s, \dots)|^2 dx \right]^{1/2} ds \\ &\lesssim \int_{-T}^t \left[\int_{y \in \mathbf{R}} \frac{\delta^2}{\left((x(s) + \sqrt{\varepsilon}y)^2 + \delta^2 \right)^2} |u(s, y)|^2 dy \right]^{1/2} ds \\ &\lesssim \int_{-T}^t \left(\int_{|y| \geq \theta \frac{|s|}{\sqrt{\varepsilon}}} \dots \right)^{1/2} + \left(\int_{|y| \leq \theta \frac{|s|}{\sqrt{\varepsilon}}} \dots \right)^{1/2} ds \\ &\lesssim \int_{-T}^t A^{1/2} + B^{1/2}, \end{aligned}$$

with $c > 0$. For A , we write $|y| \geq \theta \frac{|s|}{\sqrt{\varepsilon}}$ and so $|y|^{-1} \leq \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\theta |s|}$ and then, for an integer $M > 1$, we have

$$\begin{aligned} A &\lesssim \int_{|y| \geq \theta \frac{|s|}{\sqrt{\varepsilon}}} \frac{\delta^2}{\left((x(s) + \sqrt{\varepsilon}y)^2 + \delta^2 \right)^2} \frac{1}{y^{2M}} \times y^{2M} |u(s, y)|^2 dy \\ &\lesssim \frac{1}{\delta^2} \frac{\sqrt{\varepsilon}^{2M}}{|s|^{2M}} \|y^M u(s)\|_{L^2}^2, \end{aligned}$$

and so

$$A^{1/2} \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}^{M-1}}{|s|^M},$$

where $M > 1$ is an integer. This gives

$$\int_{-T}^t A^{1/2} ds \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}^{M-1}}{|t|^{M-1}}.$$

For the other part, B , we first need to find a lower bound for the term $(x(s) + \sqrt{\varepsilon}y)^2$. We write

$$\begin{aligned} |x(s) + \sqrt{\varepsilon}y| &\geq |x(s)| - \sqrt{\varepsilon}|y| \\ &\geq \frac{|x(s)|}{2} + \frac{|x(s)|}{2} - \sqrt{\varepsilon}|y| \\ &\geq \frac{|x(s)|}{2} + \frac{\xi_0 |s|}{4} - \theta |s|, \end{aligned}$$

since $|y| \leq \theta |s| / \sqrt{\varepsilon}$. For a small $\theta > 0$, we have

$$|x(s) + \sqrt{\varepsilon}y| \geq \frac{|x(s)|}{2},$$

and so

$$\begin{aligned}
\int_{-T}^t B^{1/2} ds &\lesssim \int_{-T}^t \frac{\delta}{\frac{x(s)^2}{4} + \delta^2} dt \\
&\lesssim \int_{-T}^t \frac{\delta}{\frac{\xi_0^2 s^2}{16} + \delta^2} dt \\
&\lesssim \int_{-\infty}^t \frac{1}{\delta} \frac{1}{\frac{\xi_0^2 s^2}{16\delta^2} + 1} dt \\
&\lesssim \frac{4}{\xi_0} \int_{-\infty}^{\tilde{t}} \frac{1}{r^2 + 1} dr,
\end{aligned}$$

with $\tilde{t} = \xi_0 t / (4\delta)$. We finally find

$$\begin{aligned}
\int_{-T}^t B^{1/2} &\lesssim \frac{4}{\xi_0} \left[\arctan\left(\frac{\xi_0 t}{4\delta}\right) + \frac{\pi}{2} \right] \\
&\lesssim -\arctan\left(\frac{4\delta}{\xi_0 t}\right) \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + o(1).
\end{aligned}$$

So, choosing M big enough, we can write

$$\|\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta\|_{L^1([-T, t]; L^2)} \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}. \quad (4.25)$$

In order to estimate the derivative of this term, we write

$$|\varepsilon \partial_x (\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta)| \lesssim \varepsilon^{-1/4} (|\varepsilon \partial_x^2 u \cdot d\chi_\delta| + |\sqrt{\varepsilon} \partial_x u \cdot d\chi_\delta| + |u \cdot d\chi_\delta| + |\varepsilon \sqrt{\varepsilon} \partial_x u \cdot d^2 \chi_\delta| + |\varepsilon u \cdot \delta^2 \chi_\delta|).$$

Using (4.3), and (4.25), we argue as in the previous computations, keeping only ‘‘worst’’ terms and find

$$\|\varepsilon \partial_x (\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta)\|_{L^1([-T, t]; L^2)} \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}. \quad (4.26)$$

• **Analysis of $\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon \chi_\delta$**

$$\begin{aligned}
|\mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x)| &= \left| \frac{\lambda^{(3)}(g(t, x))}{6} (x - x(t))^3 \right| \\
&\lesssim \frac{\delta^2 (x - x(t))^4 + \delta^2 |x(t)(x - x(t))|^3}{\left[(\tau(x - x(t)) + x(t))^2 + \delta^2 \right]^{5/2}}.
\end{aligned}$$

We notice that $\frac{1}{\left[(\tau(x - x(t)) + x(t))^2 + \delta^2 \right]^{5/2}} \lesssim \frac{1}{(x(t)^2 + \delta^2)^{5/2}}$, since

$x(t) = t \cdot \xi_0 + \mathcal{O}(t^2)$, for T sufficiently small, $\exists C_1, C_2$ independent of δ (they depend on T) such that

$$C_1 |t| \leq |x(t)| \leq C_2 |t|.$$

Then

$$|\mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x)| \lesssim \frac{\delta^2 (x - x(t))^4}{(t^2 + \delta^2)^{5/2}} + \frac{\delta^2 t (x - x(t))^3}{(t^2 + \delta^2)^{5/2}}.$$

We can write

$$\|\varepsilon^{-1}\mathcal{R}_\delta^\varepsilon\varphi^\varepsilon\chi_\delta\|_{L^1([-T,t],L^2)}$$

$$\begin{aligned} &\lesssim \varepsilon^{-1} \int_{-T}^t \left[\int_{x \in \mathbf{R}} \varepsilon^{-1/2} |u(s, \dots)|^2 \left(\frac{\delta^4 (x - x(s))^8}{(s^2 + \delta^2)^5} + \frac{\delta^4 s^2 (x - x(s))^6}{(s^2 + \delta^2)^5} \right) dx \right]^{1/2} ds \\ &\lesssim \varepsilon^{-1} \int_{-T}^t \frac{\delta^2 \varepsilon^2}{(s^2 + \delta^2)^{5/2}} ds \times \|y^4 u\|_{L^\infty(L^2)} + \varepsilon^{-1} \int_{-T}^t \frac{s \delta^2 \varepsilon^{3/2}}{(s^2 + \delta^2)^{5/2}} ds \times \|y^3 u\|_{L^\infty(L^2)} \\ &\lesssim C(u) (I + II). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I &\lesssim \int_{-T}^t \frac{\delta^2 \varepsilon}{(s^2 + \delta^2)^{5/2}} ds \lesssim \varepsilon \delta^{-3} \int_{-T}^t \frac{1}{\left(\left(\frac{s}{\delta}\right)^2 + 1\right)^{5/2}} ds \\ &\lesssim \varepsilon \delta^{-2} \int_{-T/\delta}^{t/\delta} \frac{1}{(r^2 + 1)^{5/2}} dr \\ &\lesssim \varepsilon \delta^{-2} \int_{-\infty}^{t/\delta} \frac{1}{r^5} dr \\ &\lesssim \frac{\varepsilon^2}{t^4}, \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} II &\lesssim \int_{-T}^t \frac{s \delta^2 \varepsilon^{1/2}}{(s^2 + \delta^2)^{5/2}} ds \lesssim \varepsilon^{1/2} \delta^{-3} \int_{-T}^t \frac{s}{\left(\left(\frac{s}{\delta}\right)^2 + 1\right)^{5/2}} ds \\ &\lesssim \varepsilon^{1/2} \delta^{-1} \int_{-T/\delta}^{t/\delta} \frac{r}{(r^2 + 1)^{5/2}} dr \\ &\lesssim \varepsilon^{1/2} \delta^{-1} \int_{-\infty}^{t/\delta} \frac{r}{(r^2 + 1)^{5/2}} dr \\ &\lesssim \frac{\varepsilon^{3/2}}{|t|^3}, \end{aligned}$$

which finally gives

$$\|\varepsilon^{-1}\mathcal{R}_\delta^\varepsilon\varphi^\varepsilon\chi_\delta\|_{L^1([-T,t],L^2)} \lesssim \frac{\varepsilon^{3/2}}{|t|^3}. \quad (4.27)$$

For its derivative, we write

$$\begin{aligned} \varepsilon \partial_x (\varepsilon^{-1}\mathcal{R}_\delta^\varepsilon\varphi^\varepsilon\chi_\delta) &= (\partial_x \mathcal{R}_\delta^\varepsilon)\varphi^\varepsilon\chi_\delta + \varepsilon^{-1}\mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varepsilon \partial_x (\varphi^\varepsilon)\chi_\delta + \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon d\chi_\delta \\ &= (1) + (2) + (3). \end{aligned}$$

Study of (1): $|\partial_x \mathcal{R}_\delta^\varepsilon| \leq \left| \frac{\lambda^{(3)}(g(t, x))}{2} (x - x(t))^2 \right| + \frac{\tau}{6} |\lambda^{(4)}(g(t, x)) (x - x(t))^2|.$

We write $g(t, x) = \tau x + (1 - \tau)x(t)$, $\tau = \tau(t, x)$, $\tau \in]0, 1[$, and since $x(t) = t \cdot \xi_0 + \mathcal{O}(t^2)$, for T sufficiently small, $\exists C_1, C_2$ independent of δ (they depend on T) such that

$$C_1 |t| \leq |x(t)| \leq C_2 |t|,$$

we can write

$$\begin{aligned} |\partial_x \mathcal{R}_\delta^\varepsilon| &\lesssim \frac{\delta^2 |x - x(t)|^5 + \delta^2 x(t)^2 |x - x(t)|^3 + \delta^4 |x - x(t)|^3}{\left[(\tau(x - x(t)) + x(t))^2 + \delta^2 \right]^{7/2}} \\ &\lesssim \frac{\delta^2 |x - x(t)|^5 + \delta^2 t^2 |x - x(t)|^3 + \delta^4 |x - x(t)|^3}{[t^2 + \delta^2]^{7/2}}. \end{aligned}$$

Arguing as before, we find

$$\|(\partial_x \mathcal{R}_\delta^\varepsilon) \varphi^\varepsilon \chi_\delta\|_{L^1([-T, t], L^2)}$$

$$\begin{aligned} &\lesssim C \left(\int_{-T}^t \frac{\delta^2 \varepsilon^{5/2}}{(s^2 + \delta^2)^{7/2}} ds + \int_{-T}^t \frac{\delta^2 s^2 \varepsilon^{3/2}}{(s^2 + \delta^2)^{7/2}} ds + \int_{-T}^t \frac{\delta^4 \varepsilon^{3/2}}{(s^2 + \delta^2)^{7/2}} ds \right) \\ &\lesssim C (I + II + III), \end{aligned}$$

where C is a constant depending on L^2 -norms of momenta of the profile. We write:

$$\begin{aligned} I &\lesssim \int_{-T}^t \frac{\delta^2 \varepsilon^{5/2}}{(s^2 + \delta^2)^{7/2}} ds \\ &\lesssim \int_{-T/\delta}^{t/\delta} \frac{\delta^{-4} \varepsilon^{5/2}}{(r^2 + 1)^{7/2}} dr \\ &\lesssim \delta^{-4} \varepsilon^{5/2} \int_{-\infty}^{t/\delta} \frac{1}{r^7} dr \lesssim \frac{\varepsilon^{7/2}}{t^6}; \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} II &\lesssim \int_{-T}^t \frac{\delta^2 s^2 \varepsilon^{3/2}}{(s^2 + \delta^2)^{7/2}} ds \\ &\lesssim \int_{-T/\delta}^{t/\delta} \frac{\delta^{-2} r^2 \varepsilon^{3/2}}{(r^2 + 1)^{7/2}} dr \\ &\lesssim \delta^{-2} \varepsilon^{3/2} \int_{-\infty}^{t/\delta} \frac{r^2}{r^2 + 1} \times \frac{1}{(r^2 + 1)^{5/2}} dr \\ &\lesssim \delta^{-2} \varepsilon^{3/2} \int_{-\infty}^{t/\delta} \frac{1}{r^5} dr \lesssim \frac{\varepsilon^{5/2}}{t^4}. \end{aligned}$$

Using same computations as for I , we find for III

$$III \lesssim \int_{-T}^t \frac{\delta^4 \varepsilon^{3/2}}{(s^2 + \delta^2)^{7/2}} ds \lesssim \frac{\varepsilon^{7/2}}{t^6}$$

So, we only keep the worst term and find:

$$\|(\partial_x \mathcal{R}_\delta^\varepsilon) \varphi^\varepsilon \chi_\delta\|_{L^1([-T, t], L^2)} \lesssim \frac{\varepsilon^{5/2}}{t^4}.$$

Study of (2): We then write

$$\begin{aligned} |\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varepsilon \partial_x (\varphi^\varepsilon)| &= \left| \varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varepsilon^{-1/4} (\sqrt{\varepsilon} \partial_x u(t, \dots) + i\xi(t) u(t, \dots)) \right| \\ &\lesssim \left| \varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varepsilon^{-1/4} \sqrt{\varepsilon} \partial_x u(t, \dots) \right| + |\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon|. \end{aligned}$$

Using (4.27), and since $\|y^\alpha \partial_x^\beta u(t)\|_{L^2}$ are bounded for all α, β , we can easily find

$$\begin{aligned} \|\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \chi_\delta\|_{L^1([-T, t], L^2)} &\lesssim \sqrt{\varepsilon} \|\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varepsilon^{-1/4} \partial_x u\|_{L^1([-T, t], L^2)} \\ &\quad + \|\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} \\ &\lesssim \frac{\varepsilon^{3/2}}{|t|^3}. \end{aligned}$$

Study of (3): We finally use (4.3) and see

$$|\mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon d\chi_\delta| \lesssim \varepsilon \delta^{-1} |\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon|.$$

Using (4.27), we can write:

$$\begin{aligned} \|\mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon d\chi_\delta\|_{L^1([-T, t], L^2)} &\lesssim \varepsilon \delta^{-1} \|\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} \\ &\lesssim \frac{\varepsilon^2}{|t|^3}. \end{aligned}$$

So we obtain

$$\|\varepsilon \partial_x (\varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon \varphi^\varepsilon \chi_\delta)\|_{L^1([-T, t], L^2)} \lesssim \frac{\varepsilon^{3/2}}{|t|^3}. \quad (4.28)$$

Conclusion: Combining (4.23), (4.25) and (4.27), and dropping better contributions, we obtain

$$\|L^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|},$$

and thanks to (4.24), (4.26) and (4.28):

$$\|\varepsilon \partial_x L^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} \lesssim \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|},$$

and taking C_L as the largest constant in front of these terms, we obtain Lemma 4.4.1.

4.4.4 Nonlinear terms and end of the proof

We recall the equation (4.20) satisfied by the remainder w^ε :

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t w^\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} \partial_x^2 w^\varepsilon - V_\delta(x) w^\varepsilon = \varepsilon N L^\varepsilon + \varepsilon L^\varepsilon; \\ w^\varepsilon(-T, x) = 0 \end{cases},$$

where

$$\begin{aligned} N L^\varepsilon &= \kappa \varepsilon^{1/2} (|\psi^\varepsilon|^2 \psi^\varepsilon - |\varphi^\varepsilon|^2 \varphi^\varepsilon \chi_\delta) \\ L^\varepsilon &= \varepsilon^{-1} \mathcal{R}_\delta^\varepsilon(t, x) \varphi^\varepsilon \chi_\delta + \varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \cdot d\chi_\delta + \varepsilon/2 \varphi^\varepsilon d^2 \chi_\delta. \end{aligned}$$

Thanks to the Duhamel formula, we use a standard L^2 -estimate and find

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq \|w^\varepsilon(-T)\|_{L^2} + \int_{-T}^t \|N L^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds + \int_{-T}^t \|L^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds.$$

We now focus on the nonlinear terms; we have the following pointwise estimate:

$$||\psi^\varepsilon|^2 \psi^\varepsilon - |\varphi^\varepsilon|^2 \varphi^\varepsilon \chi_\delta| \lesssim (|w^\varepsilon|^2 + |\varphi^\varepsilon|^2) |w^\varepsilon|.$$

Since κ is a small fixed constant and since its size will not affect the propagation in the adiabatic region, it will not appear in the following computations. We then have

$$\begin{aligned} \|NL^\varepsilon\|_{L^2} &\lesssim \sqrt{\varepsilon} \left\| (|w^\varepsilon|^2 + |\varphi^\varepsilon|^2) |w^\varepsilon| \right\|_{L^2} \\ &\lesssim \sqrt{\varepsilon} (\|w^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|\varphi^\varepsilon\|_{L^\infty}^2) \|w^\varepsilon\|_{L^2}. \end{aligned}$$

We recall that thanks to Corollary 4.2.4, we have

$$\|\varphi^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} \lesssim \varepsilon^{-1/4},$$

and we perform the following bootstrap argument:

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} \leq \frac{M}{|t|}, \quad M > 0. \quad (4.29)$$

Note that in (4.29), we assume that the L^∞ -norm is not worse than the linear term, which seems to be the leading one; the comparison is not made with $\|\varphi^\varepsilon(t)\|_{L^\infty}$ as it is usually done.

We prove that, as long as (4.29) holds, we have:

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + K C_L C_T e^{\frac{KM^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{2\Lambda} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}, \quad (4.30)$$

$$\|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + \tilde{K} \tilde{C}_T C_L e^{\frac{\tilde{K}M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{2\Lambda} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}, \quad (4.31)$$

for some $\Lambda > 0, K, \tilde{K}, C_T, \tilde{C}_T$ independent of ε and t . Before writing the computations, we check that it implies the result. We assume that (4.30) and (4.31) are satisfied and let

$$\tau^\varepsilon = \inf \left\{ -T \leq t \leq -\Lambda\sqrt{\varepsilon}, \|w^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} \geq \frac{M}{|t|} \right\}.$$

Since $w^\varepsilon(-T) = 0$, we have $\tau^\varepsilon > -T$. If $\tau^\varepsilon < -\Lambda\sqrt{\varepsilon}$, using (4.30) and (4.31) in a Gagliardo-Nirenberg inequality, we obtain

$$\|w^\varepsilon(\tau^\varepsilon)\|_{L^\infty} \leq \frac{C_L}{|\tau^\varepsilon|} \left(C_1 + C_1 e^{C_2 \frac{M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{\Lambda} \right),$$

and choosing an appropriate $M > 0$ and taking Λ big enough, both independent of $\varepsilon, \tau^\varepsilon$, we have

$$\|w^\varepsilon(\tau^\varepsilon)\|_{L^\infty} \leq \frac{3M}{4|\tau^\varepsilon|}.$$

This last statement is a contradiction with

$$\|w^\varepsilon(\tau^\varepsilon)\|_{L^\infty} = \frac{M}{|\tau^\varepsilon|},$$

then we deduce that $\tau^\varepsilon \leq -\Lambda\sqrt{\varepsilon}$.

So as long as (4.29) holds, we have

$$\|NL^\varepsilon(s)\|_{L^2} \leq K \left(\frac{M^2 \sqrt{\varepsilon}}{s^2} + 1 \right) \|w^\varepsilon(s)\|_{L^2},$$

and we infer by Lemma 4.4.1

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq \int_{-T}^t \|L^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds + K \int_{-T}^t \left(\frac{M^2 \sqrt{\varepsilon}}{s^2} + 1 \right) \|w^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds.$$

Using Gronwall lemma we obtain

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + KC_L \int_{-T}^t \left(\frac{\varepsilon M^2}{|s|^3} + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|s|} \right) \exp \left(K \int_{-T}^s \left(1 + \frac{\sqrt{\varepsilon} M^2}{r^2} \right) dr \right) ds$$

We notice that for $-T \leq t \leq -\Lambda\sqrt{\varepsilon}$

$$\begin{aligned} \exp \left(K \int_{-T}^s \left(1 + \frac{\sqrt{\varepsilon} M^2}{r^2} \right) dr \right) &= e^{K(T - \frac{\sqrt{\varepsilon} M^2}{T})} e^{K(s - \frac{\sqrt{\varepsilon} M^2}{s})} \\ &\leq C_T e^{K(\frac{M^2}{\Lambda} - \Lambda\sqrt{\varepsilon})} \leq C_T e^{\frac{KM^2}{\Lambda}}, \end{aligned}$$

and this bound is independent of ε , t and s . We then write

$$\begin{aligned} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} - C_T e^{\frac{KM^2}{\Lambda}} KC_L \int_{-T}^t \left(\frac{\varepsilon M^2}{s^3} + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{s} \right) \\ &\leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + C_T e^{\frac{KM^2}{\Lambda}} KC_L \left[\sqrt{\varepsilon} \log(|t|) + \frac{\varepsilon M^2}{2t^2} \right], \end{aligned}$$

where we have dropped all terms in T since they present a $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$ contribution. Since $|t| \geq \Lambda\sqrt{\varepsilon}$ we finally find (4.30)

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + KC_L C_T e^{\frac{KM^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{2\Lambda} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}.$$

It remains to check the validity of the bootstrap assumption (4.29). We study the ε -derivative of w^ε :

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t (\varepsilon \partial_x w^\varepsilon) + \frac{\varepsilon^2}{2} \partial_x^2 (\varepsilon \partial_x w^\varepsilon) - V_\delta(x) (\varepsilon \partial_x w^\varepsilon) = (\varepsilon \partial_x V_\delta) w^\varepsilon + \varepsilon^2 \partial_x (NL^\varepsilon + L^\varepsilon); \\ \varepsilon \partial_x w^\varepsilon(-T, x) = 0, \end{cases}$$

A standard L^2 - estimate allows us to find

$$\begin{aligned} \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\lesssim \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(-T)\|_{L^2} + \int_{-T}^t \|\varepsilon \partial_x NL^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds + \int_{-T}^t \|\varepsilon \partial_x L^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds \\ &\quad + \int_{-T}^t \|(\varepsilon \partial_x V_\delta) w^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds. \end{aligned}$$

We first notice that since $|\partial_x V_\delta(x)| \leq C$ for all $x \in \mathbf{R}$, where C is independent of δ and x ; we have, using (4.30) and keeping only the worst contributions:

$$\|(\varepsilon \partial_x V_\delta) w^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} \lesssim \varepsilon \sqrt{\varepsilon} \left[C_L + KC_L C_T e^{\frac{KM^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{2\Lambda} \right] \log |t|,$$

Then, we write

$$\begin{aligned} |\varepsilon \partial_x NL^\varepsilon| &\lesssim \sqrt{\varepsilon} |w^\varepsilon + \varphi^\varepsilon \chi_\delta|^2 (\varepsilon \partial_x w^\varepsilon + \varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \chi_\delta + \varphi^\varepsilon \varepsilon d\chi_\delta) \\ &\quad - |\varphi^\varepsilon|^2 (\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \chi_\delta + \varphi^\varepsilon \varepsilon d\chi_\delta) \\ &\lesssim \sqrt{\varepsilon} |w^\varepsilon + \varphi^\varepsilon \chi_\delta|^2 |\varepsilon \partial_x w^\varepsilon| \\ &\quad + \sqrt{\varepsilon} (|w^\varepsilon + \varphi^\varepsilon \chi_\delta|^2 - |\varphi^\varepsilon|^2) |\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \chi_\delta + \varphi^\varepsilon \varepsilon d\chi_\delta|. \end{aligned}$$

The first part will be handled as before. For the second part of this term, we write $|w^\varepsilon + \varphi^\varepsilon \chi_\delta|^2 - |\varphi^\varepsilon|^2 \times |\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon \chi_\delta + \varphi^\varepsilon \varepsilon d\chi_\delta|$

$$\begin{aligned} &\lesssim (|w^\varepsilon| + |\varphi^\varepsilon|) |w^\varepsilon| |\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon| + (|w^\varepsilon| + |\varphi^\varepsilon|) |w^\varepsilon| |\varphi^\varepsilon \varepsilon d\chi_\delta| \\ &\lesssim (|w^\varepsilon| + |\varphi^\varepsilon|) |w^\varepsilon| |\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon| + (|w^\varepsilon| + |\varphi^\varepsilon|) |w^\varepsilon| \left| \varphi^\varepsilon \frac{\varepsilon}{\delta} \right|, \end{aligned}$$

where we have used (4.3). So

$$\begin{aligned}
\|\varepsilon \partial_x N L^\varepsilon(s)\|_{L^2} &\lesssim \sqrt{\varepsilon} (\|w^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|\varphi^\varepsilon\|_{L^\infty}^2) \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon\|_{L^2} \\
&\quad + \sqrt{\varepsilon} (\|w^\varepsilon\|_{L^\infty} + \|\varphi^\varepsilon\|_{L^\infty}) \|\varepsilon \partial_x \varphi^\varepsilon\|_{L^\infty} \|w^\varepsilon\|_{L^2} \\
&\quad + \sqrt{\varepsilon} (\|w^\varepsilon\|_{L^\infty} + \|\varphi^\varepsilon\|_{L^\infty}) \left\| \frac{\varepsilon}{\delta} \varphi^\varepsilon \right\|_{L^\infty} \|w^\varepsilon\|_{L^2} \\
&\lesssim \left[\frac{M^2 \sqrt{\varepsilon}}{s^2} + 1 \right] \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(s)\|_{L^2} \\
&\quad + \left(\frac{\varepsilon^{3/4} M}{s^2} + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|s|} \right) C_L \left(1 + K C_T e^{\frac{\kappa M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{2\Lambda} \right),
\end{aligned}$$

where we have used Corollary 4.2.4, (4.29), and (4.30). We recall that by Lemma 4.4.1, we have

$$\|\varepsilon \partial_x L^\varepsilon\|_{L^1([-T, t], L^2)} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|},$$

and it is easily seen that this contribution is the most important. So we find, dropping better terms

$$\|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + \tilde{K} \int_{-T}^t \left(1 + \frac{\sqrt{\varepsilon} M^2}{s^2} \right) ds.$$

Applying Gronwall lemma again, and arguing as before, as long as (4.29) holds, we finally get (4.31)

$$\|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C_L \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|} + \tilde{K} \tilde{C}_T C_L e^{\frac{\tilde{\kappa} M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{2\Lambda} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{|t|}.$$

Note that t has to satisfy $\varepsilon^{1/2-\gamma} \lesssim |t|$, for $0 < \gamma < 1/2$, if we want w^ε to become smaller in $H_\varepsilon^1(\mathbf{R})$, as ε tends to zero.

We can now use Gagliardo-Nirenberg inequality, and obtain thanks to (4.30) and (4.31)

$$\begin{aligned}
\|w^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} &\leq C_{GN} \varepsilon^{-1/2} \|w^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1/2} \|\varepsilon \partial_x w^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{1/2} \\
&\leq \frac{C_L}{|t|} \left[C_1 + C_1 e^{C_2 \frac{M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{\Lambda} \right],
\end{aligned}$$

where C_1 and C_2 are both nonnegative constants, depending on $K, \tilde{K}, C_T, \tilde{C}_T, C_{GN}$ only. Taking

$$M = 2C_1 C_L,$$

and choosing Λ large enough to have

$$e^{C_2 \frac{M^2}{\Lambda}} \frac{M^2}{\Lambda} \leq \frac{1}{2},$$

we have

$$\|w^\varepsilon(t)\|_{L^\infty} \leq \frac{C_L}{|t|} \frac{3}{2} C_1 \leq \frac{3}{4} \frac{M}{|t|},$$

so the remainder w^ε is small in the appropriate spaces and the bootstrap assumption (4.29) holds for $-T \leq t \leq -c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}$, for any $c_0 > 0$ and $0 < \gamma < 1/2$. And the proof is complete.

Conclusion: Since this approximation is valid until a time $-t^\varepsilon = -c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}$, where c_0 is a fixed constant, for any $\gamma \in]0, 1/2[$, we can choose the exponent γ as small as we wish. In order to study the propagation through the crossing point, we can now work on a time interval of the form $[-c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}, c_0 \varepsilon^{1/2-\gamma}]$ without restriction, as it is done in the linear case, in [61].

4.5 Approximation in the crossing region.

This section is devoted to the proof of Theorem 4.2.9.

4.5.1 Introduction of a new regime

We recall the free trajectories, introduced in Section 4.2.2

$$\tilde{\xi}(t) = \xi_0 > 0 \quad ; \quad \tilde{x}(t) = \xi_0 t,$$

and the following rescaled variables:

$$\begin{cases} y = (x - t\xi_0)/\sqrt{\varepsilon} \\ s = t/\sqrt{\varepsilon}. \end{cases}$$

We then recall that for $t \in [-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}]$, where $0 < \gamma < 1/6$, v^ε is defined by

$$\psi^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} v^\varepsilon \left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{\frac{i\xi_0^2 t}{2\varepsilon} + \frac{i\xi_0 \cdot (x - t\xi_0)}{\varepsilon}},$$

and the associated Schrödinger equation (4.11) is

$$\begin{cases} i\partial_s v^\varepsilon - V_{\delta/\sqrt{\varepsilon}}(y + s\xi_0) v^\varepsilon = -\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 v^\varepsilon + \kappa\sqrt{\varepsilon}|v^\varepsilon|^2 v^\varepsilon, \\ v^\varepsilon(-s^\varepsilon, y) = v_{init.}^\varepsilon(y), \end{cases}$$

where $s^\varepsilon = c_0\varepsilon^{-\gamma}$, the function $v_{init.}^\varepsilon(y)$ is chosen such that (2.18) holds at time $t = -c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}$ and

$$V_{\delta/\sqrt{\varepsilon}}(y + s\xi_0) = \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix}.$$

Our aim is to construct an approximation of v^ε on $[-s^\varepsilon, s^\varepsilon]$. In the linear case, the solution is approximated by f , solution to (4.7)-(4.8):

$$\begin{cases} i\partial_s f - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} f = 0 \\ f(-s^\varepsilon, y) = u_\delta(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon, y) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)}. \end{cases}$$

In fact, assuming the approximation has an expansion of the form

$$v_{app}^\varepsilon(s, y) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \varepsilon^{j/2} f_j(s, y),$$

where c_j are constants and f_j are vector-valued functions, we can easily see that the lowest order term satisfies (4.7). Since our power of ε in front of the nonlinearity is $1/2$, whereas there are smaller powers of ε , we claim that the nonlinearity does not affect the evolution at leading order. So we introduce r^ε the difference

$$r^\varepsilon(s, y) = v^\varepsilon(s, y) - f(s, y),$$

which satisfies

$$\begin{cases} i\partial_s r^\varepsilon + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 r^\varepsilon - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} r^\varepsilon = -\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 f + \sqrt{\varepsilon}|r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f) \\ r^\varepsilon(-s^\varepsilon, y) = v_{init.}^\varepsilon(y) - f(-s^\varepsilon, y). \end{cases}$$

The aim is to prove that this term is small in L^2 in the semiclassical limit. We first need to study $v_{init.}^\varepsilon$ in order to match it with the approximation φ^ε at the initial time with the new rescaled variables. Then we need some results on the behaviour of f , and to prove the validity of it as an approximation at leading order of v^ε , which will allow us to deduce the behaviour of the exact solution on the time interval that we consider.

This section is divided into three parts:

1. Analysis of the initial data
2. Analysis of f
3. Proof of Theorem 4.2.9

4.5.2 Initial data and matching

The aim of this section is to prove the following proposition:

Proposition 4.5.1. *Let v^ε satisfying (4.10). Then v^ε solves (4.11) with*

$$v_{init.}^\varepsilon(y) = u_\delta\left(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y\right) e^{\frac{i\phi^\varepsilon(y)}{\varepsilon}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + W^\varepsilon(y),$$

where u_δ is the profile, solution to (4.6), the phase is the difference between both phases

$$\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y) = \frac{i}{\varepsilon} \left(S(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}\xi_0^2 s^\varepsilon \right) + \frac{i}{\varepsilon} \left[\xi(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) \cdot (\sqrt{\varepsilon}y - \sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon\xi_0 - x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})) - \xi_0\sqrt{\varepsilon}y \right], \quad (4.32)$$

and where W^ε satisfies

$$\|W^\varepsilon\|_{L^2} + \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y W^\varepsilon\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^\gamma.$$

Proof. We first notice that thanks to Theorem 4.2.5, we have for $\gamma \in]0, 1/6[$,

$$\psi^\varepsilon(-t^\varepsilon, x) = \varepsilon^{-1/4} u_\delta\left(-t^\varepsilon, \frac{x - x(-t^\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\Phi^\varepsilon(-t^\varepsilon, x)} \chi_\delta(x) + w^\varepsilon(-t^\varepsilon, x),$$

where $t^\varepsilon = c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}$, and $\Phi^\varepsilon(-t^\varepsilon, x) = S^+(-t^\varepsilon) + \xi^+(-t^\varepsilon) \cdot (x - x^+(-t^\varepsilon))$. But, since

$$\psi^\varepsilon(-t^\varepsilon, x) = \varepsilon^{-1/4} v^\varepsilon\left(\frac{-t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x + t^\varepsilon\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\tilde{\Phi}^\varepsilon(-t^\varepsilon, x)},$$

with $\tilde{\Phi}^\varepsilon(t, x) = \xi_0^2 t/2 + \xi_0(x - t\xi_0)$, we have to match these two expressions of the same term.

In the rescaled variables (s, y) , we have for $-s^\varepsilon = -c_0\varepsilon^{-\gamma}$:

$$v^\varepsilon(-s^\varepsilon, y) = u_\delta\left(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon, y + \theta(\varepsilon)\right) \chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - s^\varepsilon\xi_0)) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} + \omega^\varepsilon(-s^\varepsilon, y),$$

where

- $\theta(\varepsilon) = -s^\varepsilon\xi_0 - \frac{x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})}{\sqrt{\varepsilon}}$,
- the phase is given by (4.32):

$$\begin{aligned} \frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y) &= \frac{i}{\varepsilon}(\Phi^\varepsilon - \tilde{\Phi}^\varepsilon)(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}(y - s^\varepsilon\xi_0)) \\ &= \frac{i}{\varepsilon} \left(S(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}\xi_0^2 s^\varepsilon \right) \\ &\quad + \frac{i}{\varepsilon} \left[\xi(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) \cdot (\sqrt{\varepsilon}y - \sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon\xi_0 - x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})) - \xi_0\sqrt{\varepsilon}y \right] \end{aligned}$$

- ω^ε is obtained writing

$$w^\varepsilon(t, x) = \varepsilon^{-1/4} \omega^\varepsilon\left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t\xi_0}{\sqrt{\varepsilon}}\right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\tilde{\Phi}^\varepsilon(t, x)},$$

where w^ε , the difference between the exact solution and the approximation is introduced in Section 4.3.4, by (4.20).

Thus we can write

$$v^\varepsilon(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) = u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + W^\varepsilon(y), \quad (4.33)$$

where

$$\begin{aligned} W^\varepsilon(y) &= \omega^\varepsilon(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) \\ &+ \theta(\varepsilon) \left(\int_0^1 \partial_y u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, \zeta\theta(\varepsilon) + y) d\zeta \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \chi_\delta^+(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma})) \\ &+ u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \left[\chi_\delta^+(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \end{aligned}$$

Our next steps are

Step (1) To check that $\theta(\varepsilon)$ is small.

Step (2) To prove that ϕ^ε , the difference between both phases is not troublesome.

Step (3) To prove that the last three terms of (4.33) are small in the semi-classical limit, and in the appropriate space.

Step (1): Analysis of $\theta(\varepsilon)$. Using (4.4), we compute higher derivatives of the classical trajectories and the action, and find those we will need:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \xi; \quad \ddot{x} = \dot{\xi} = \frac{-x}{\sqrt{x^2 + \delta^2}} = \mathcal{O}(1) \\ x^{(3)} &= \ddot{\xi} = \frac{-\dot{x}\delta^2}{(x^2 + \delta^2)^{3/2}} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\delta}\right) \\ \dot{S} &= \frac{|\xi|^2}{2} - \sqrt{x^2 + \delta^2}; \quad \ddot{S} = 2\xi\dot{\xi} = \mathcal{O}(1) \\ S^{(3)} &= 2\dot{\xi}^2 + 2\xi\ddot{\xi} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\delta}\right), \end{aligned}$$

and so

$$\begin{array}{l|l|l} x(0) = 0 & \xi(0) = \xi_0 & S(0) = 0 \\ \dot{x}(0) = \xi_0 & \dot{\xi}(0) = 0 & \partial_t S(0) = \frac{\xi_0^2}{2} - \delta \\ x^{(2)}(0) = 0 & \xi_0^{(2)} = \frac{-\xi_0}{\delta} & \partial_t^2 S(0) = 0 \\ x^{(3)}(0) = \frac{-\xi_0}{\delta} & \xi^{(3)}(0) = x^{(4)}(0) = 0 & \partial_t^3 S(0) = \frac{-2\xi_0^2}{\delta}. \end{array} \quad (4.34)$$

An easy computation, using Taylor expansions of the classical trajectories around $-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon$, which is small, allows us to write for $\tau = \tau(\varepsilon) \in]0, 1[$:

$$\theta(\varepsilon) = -s^\varepsilon \xi_0 - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left[-\xi_0 s^\varepsilon \sqrt{\varepsilon} + \dot{\xi}(-\tau\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) \cdot \frac{\varepsilon}{2} (s^\varepsilon)^2 \right] = \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}-2\gamma}), \quad (4.35)$$

where we choose γ small enough to have $1/2 - 2\gamma > 0$.

Step (2): Analysis of the phase $\phi^\varepsilon(y)$. We prove the following Lemma:

Lemme 4.5.2. *We consider ϕ^ε the difference between both phases, given by (4.32). Then*

$$\frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(y) = -ic_0\varepsilon^{-\gamma} \dot{\xi}(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}\tau') \cdot y + \mathcal{O}(\varepsilon^{-3\gamma}) = \mathcal{O}(\varepsilon^{-\gamma}) \cdot y + \mathcal{O}(\varepsilon^{-3\gamma}), \quad (4.36)$$

where the last term does not depend on y , and where $\dot{\xi}(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}\tau') = \mathcal{O}(1)$ for a $\tau' = \tau'(\varepsilon) \in]0, 1[$.

We deduce that

$$\sqrt{\varepsilon} \frac{d}{dy} \left(\frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(y) \right) = \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma}). \quad (4.37)$$

Proof. We need to estimate the difference of both phases ϕ^ε at time $s = -s^\varepsilon$. This term will depend on ε and y and will induce a loss of ε at each derivative for the initial data. In fact, we compute:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(y) &= \frac{i}{\varepsilon} (S(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) - \xi_0^2(-s^\varepsilon)\sqrt{\varepsilon}/2) \\ &\quad + \frac{i}{\varepsilon} [\xi(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) \cdot (\sqrt{\varepsilon}y - \sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon\xi_0 - x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})) - \xi_0\sqrt{\varepsilon}y] \\ &= (i) + (ii). \end{aligned}$$

We write, using Taylor expansion of the classical action, and (4.34)

$$\begin{aligned} (i) &= \frac{i}{\varepsilon} (S(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) - \xi_0^2(-s^\varepsilon)\sqrt{\varepsilon}/2) \\ &= \frac{i\delta s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}}{\varepsilon} + \frac{ig^\varepsilon(-s^\varepsilon)}{\varepsilon} \\ &= ic_0\varepsilon^{-\gamma} + \frac{ig^\varepsilon(-s^\varepsilon)}{\varepsilon}, \end{aligned}$$

where

$$g^\varepsilon(s) = \frac{S^{(3)}(\zeta)}{6} \cdot (s\sqrt{\varepsilon})^3, \quad \zeta = \tau s\sqrt{\varepsilon}; \quad \tau = \tau(\varepsilon) \in]0, 1[, \quad \text{and} \quad |S^{(3)}(\zeta)| \lesssim \frac{1}{\delta}.$$

We deduce

$$(i) = \mathcal{O}(\varepsilon^{-3\gamma}). \quad (4.38)$$

We then study the second term:

$$\begin{aligned} (ii) &= \frac{i}{\varepsilon} [\xi(-\sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon) \cdot (\sqrt{\varepsilon}y - \sqrt{\varepsilon}s^\varepsilon\xi_0 - x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})) - \xi_0\sqrt{\varepsilon}y] \\ &= \frac{i}{\sqrt{\varepsilon}} (\xi(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}) - \xi_0) \cdot y + \frac{i}{\varepsilon} \xi(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}) \cdot (-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}\xi_0 - x(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon})) \\ &= \frac{i}{\sqrt{\varepsilon}} (-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}) \cdot \dot{\xi}(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}\tau') \cdot y + \frac{i}{\varepsilon} [\xi_0 + \dot{\xi}(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}\tau')] \cdot \dot{\xi}(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}\tau'') \cdot \frac{(s^\varepsilon)^2 \cdot \varepsilon}{2} \\ &= -ic_0\varepsilon^{-\gamma} \dot{\xi}(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}\tau') \cdot y + \mathcal{O}(\varepsilon^{-2\gamma}) = \mathcal{O}(\varepsilon^{-\gamma}) \cdot y + \mathcal{O}(\varepsilon^{-2\gamma}), \end{aligned} \quad (4.39)$$

where $0 < \tau', \tau'' < 1$ depend on ε and where we have used the estimates on the classical trajectories. Using (4.38) and (4.39), we can write (4.36).

For (4.37), we notice that only one part of the phase depends on y , and so the $\sqrt{\varepsilon}$ -derivative of the phase gives

$$-\sqrt{\varepsilon} ic_0 \varepsilon^{-\gamma} \dot{\xi}(-s^\varepsilon\sqrt{\varepsilon}\tau') = \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma}).$$

□

Step (3): Analysis of W^ε .

(i) We first study $\omega^\varepsilon(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y)$: it will allow us to see in which weighted space we need to estimate the derivative.

We recall

$$\omega^\varepsilon(s, y) = \varepsilon^{1/4} w^\varepsilon(s\sqrt{\varepsilon}, \sqrt{\varepsilon}(y + s\xi_0)) e^{-i(\xi_0^2 s + \xi_0 \cdot y)/\sqrt{\varepsilon}}$$

where w^ε is defined in Section 4.3.4, by (4.20), for $s\sqrt{\varepsilon} \in [-T, -c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}]$. Thanks to Theorem 4.2.5, we deduce

- $\|\omega^\varepsilon(-s^\varepsilon)\|_{L^2} = \|w^\varepsilon(-t^\varepsilon)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^\gamma,$
- Since $\sqrt{\varepsilon}\partial_y\omega^\varepsilon = \varepsilon^{1/4} [\varepsilon\partial_x w^\varepsilon + i\xi_0 w^\varepsilon] e^{-i(\xi_0^2 s + \xi_0 \cdot y)/\sqrt{\varepsilon}}$ we infer

$$\|\sqrt{\varepsilon}\partial_y\omega^\varepsilon(-s^\varepsilon)\|_{L^2} \lesssim \|\varepsilon\partial_x w^\varepsilon(-t^\varepsilon)\|_{L^2} + \|w^\varepsilon(-t^\varepsilon)\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^\gamma.$$

(ii) We then study the second term:

- We first notice that for the L^2 -norm of this term, we have

$$\begin{aligned} \left(\int_{\mathbf{R}} |\theta(\varepsilon)|^2 \left| \int_0^1 \partial_y u_\delta(-t^\varepsilon, y + \zeta\theta(\varepsilon)) d\zeta \right|^2 dy \right) &\leq |\theta(\varepsilon)|^2 \left(\int_{\mathbf{R}} \int_0^1 |\partial_y u_\delta(-t^\varepsilon, y + \zeta\theta(\varepsilon))|^2 d\zeta dy \right) \\ &\leq |\theta(\varepsilon)|^2 \|\partial_y u_\delta(-t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 \end{aligned}$$

and using (4.35) and Theorem 4.2.3, we deduce that the second term of W^ε is an $\mathcal{O}(\varepsilon^{1/2-2\gamma})$ in L^2 .

- Then for the derivative, we need to study the following terms

$$\begin{aligned} &\theta(\varepsilon)\sqrt{\varepsilon}\partial_y \left(\int_0^1 \partial_y u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, \zeta\theta(\varepsilon) + y) d\zeta \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\varepsilon^{-\gamma})) \\ &+ \theta(\varepsilon) \left(\int_0^1 \partial_y u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, \zeta\theta(\varepsilon) + y) d\zeta \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \varepsilon d\chi_\delta(\dots) \\ &+ \theta(\varepsilon) \left(\int_0^1 \partial_y u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, \zeta\theta(\varepsilon) + y) d\zeta \right) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \frac{i}{\sqrt{\varepsilon}} \partial_y \phi^\varepsilon(y) \chi_\delta(\dots). \end{aligned}$$

Using similar arguments as before, we find that the first term presents a $\mathcal{O}(\varepsilon^{1-2\gamma})$ contribution in L^2 .

We then use (4.3) for the second term and obtain that it is a $\mathcal{O}(\varepsilon^{1-2\gamma})$ contribution too.

We finally use (4.37) for the third term and deduce that the $\sqrt{\varepsilon}$ -derivative of the second term of W^ε presents a $\mathcal{O}(\varepsilon^{1-3\gamma})$ contribution in L^2 .

(iii) For the last term, we write

$$\begin{aligned} \left\| u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \left[\chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - \xi_0 c_0 \varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \right\|_{L^2}^2 = \\ \int_{|y| \leq \theta c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}} \dots + \int_{|y| \geq \theta c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}} \dots, \end{aligned}$$

where $\theta < 1$ is independent of ε . For the first integral, we first recall that in the new variables the eigenvector $\chi_\delta(x)$, associated with $\lambda_\delta(x) = \sqrt{x^2 + \delta^2}$ is given by (Section 4.4.2):

$$\chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y + s\xi_0)) = \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{c}{y + s\xi_0}\right)\right) \\ \cos\left(\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{c}{y + s\xi_0}\right)\right) \end{pmatrix},$$

for $s \in [-T/\sqrt{\varepsilon}, -c_0\varepsilon^{-\gamma}]$. For $s = -c_0\varepsilon^{-\gamma}$, we compute

$$\chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right)\right) \\ \cos\left(\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right)\right) - 1 \end{pmatrix},$$

and since $|y| \leq \theta c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}$, $\theta < 1$, we have

$$|y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}| \geq c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma} - |y| \geq (1 - \theta)c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma},$$

so

$$\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}} \leq \frac{c}{(1 - \theta)c_0\xi_0} \varepsilon^\gamma \lesssim \varepsilon^\gamma.$$

Then, using Taylor expansions, we have

$$\arctan\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right) = \frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right)^3\right),$$

which gives

$$\sin\left(\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right)\right) = \frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right)^3\right) = \mathcal{O}(\varepsilon^\gamma),$$

and

$$\cos\left(\frac{1}{2}\arctan\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right)\right) = 1 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{c}{y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right)^2\right) = 1 + \mathcal{O}(\varepsilon^{2\gamma}).$$

Finally, for $|y| \leq \theta c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}$, we can write

$$\left|\chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right| = \mathcal{O}(\varepsilon^\gamma),$$

and so, thanks to Theorem 4.2.3

$$\left(\int_{|y| \leq \theta c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}} |u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y)|^2 \left|\chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right|^2\right)^{1/2} \lesssim \varepsilon^\gamma$$

For the second integral, we notice that, since $|y| \geq \theta c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}$, we have

$$\left|\frac{y}{c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right| \geq \theta,$$

and so

$$\begin{aligned} & \left(\int_{|y| \geq \theta c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}} |u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y)|^2 \times \left|\frac{y}{c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right|^2 \times \left|\frac{c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}{y}\right|^2\right)^{1/2} \\ & \leq \frac{1}{\theta} \left(\int_{|y| \geq \theta c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}} |u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y)|^2 \times \left|\frac{y}{c_0\xi_0\varepsilon^{-\gamma}}\right|^2\right)^{1/2} \\ & \lesssim \varepsilon^\gamma \|y u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma})\|_{L^2} \lesssim \varepsilon^\gamma. \end{aligned}$$

We then deduce

$$u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \left[\chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right] = \mathcal{O}(\varepsilon^\gamma), \text{ in } L^2$$

and arguing as before, using (4.37) we can also deduce

$$\sqrt{\varepsilon}\partial_y \left[u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)} \left[\chi_\delta(\sqrt{\varepsilon}(y - c_0\varepsilon^{-\gamma})) - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right] \right] = \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}-\gamma}), \text{ in } L^2,$$

and the proof is complete. \square

4.5.3 Study of the linear approximation f

In this subsection, we prove Corollary 4.2.7 and Lemma 4.2.8 concerning f solution to (4.7)

$$i\partial_s f - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} f = 0;$$

with data (4.8)

$$f(-c_0\varepsilon^{-\gamma}, y) = u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\varepsilon}\phi^\varepsilon(y)}$$

where $s, y \in \mathbf{R}$, $\gamma \in]0, 1/6[$, and ϕ^ε is given in (4.32). We first prove Corollary 4.2.7.

Proof of Corollary 4.2.7. We first make a change of variables and switch the coordinates to obtain a similar system: $\tilde{s} = (s\xi_0 + y)/\sqrt{\xi_0}$ and $\tilde{f}(\tilde{s}, y) = f(s, y)$. The system in the new variables is

$$-i\partial_{\tilde{s}}\tilde{f} - \begin{pmatrix} -\tilde{s} & \frac{-c}{\sqrt{\xi_0}} \\ \frac{-c}{\sqrt{\xi_0}} & \tilde{s} \end{pmatrix} \tilde{f} = 0;$$

and taking $\begin{cases} \tilde{f}_1 = u_2 \\ \tilde{f}_2 = u_1 \end{cases}$, we obtain

$$-i\partial_{\tilde{s}}u - \begin{pmatrix} \tilde{s} & \frac{-c}{\sqrt{\xi_0}} \\ \frac{-c}{\sqrt{\xi_0}} & -\tilde{s} \end{pmatrix} u = 0, \quad \text{with } u = (u_1, u_2).$$

We can apply Theorem 4.2.6 to u , with $\eta = -c/\sqrt{\xi_0}$ and write

$$\begin{aligned} u(\tilde{s}, y) &= \alpha_1(y)g_1^{s-}(\tilde{s}, y) + \alpha_2(y)g_2^{s-}(\tilde{s}, y) \\ &= \beta_1(y)g_1^{s+}(\tilde{s}, y) + \beta_2(y)g_2^{s+}(\tilde{s}, y), \end{aligned}$$

where the α_j and β_j are respectively the coordinates in $(g_1^{s-}(\tilde{s}, y), g_2^{s-}(\tilde{s}, y))$ and $(g_1^{s+}(\tilde{s}, y), g_2^{s+}(\tilde{s}, y))$. Using asymptotics of the bases from [44], and since

$$f_{1,2}(s, y) = \tilde{f}_{1,2}(\tilde{s}, y) = u_{2,1}(\tilde{s}, y),$$

we can deduce

$$\begin{aligned} f(s, y) &= \alpha_2(y)e^{-i\Lambda\left(\frac{s\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}, y\right)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_1(y)e^{i\Lambda\left(\frac{s\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}, y\right)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\quad + \alpha_1(y)\rho_2^{s-}\left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}}\right) + \alpha_2(y)\rho_1^{s-}\left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}}\right) \\ &= \beta_2(y)e^{-i\Lambda\left(\frac{s\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}, y\right)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta_1(y)e^{i\Lambda\left(\frac{s\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}, y\right)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\quad + \beta_1(y)\rho_2^{s+}\left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}}\right) + \beta_2(y)\rho_1^{s+}\left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}}\right), \end{aligned}$$

where

$$\Lambda\left(\frac{s\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}, y\right) = \frac{\left(\frac{s\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}\right)^2}{2} + \frac{\eta^2}{2} \log\left|\frac{s\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}\right|, \quad \rho_{1,2}^{s\pm}(s) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{s}\right) \text{ in } L^2.$$

Expanding $\Lambda\left(\frac{-s^\varepsilon\xi_0+y}{\sqrt{\xi_0}}, y\right)$, and comparing with (4.8), we infer

$$\alpha_2 \equiv 0, \quad \text{and } \alpha_1(y) = u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y)e^{i\theta^\varepsilon(y)}$$

$$\begin{aligned}
i\theta^\varepsilon(y) &= ic_0\varepsilon^{-\gamma} + \frac{ic_0^2\varepsilon^{-2\gamma}}{2} \left(-\xi_0 + \dot{\xi}(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}\tau_\varepsilon)(\xi_0 + \dot{\xi}(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}\tau_\varepsilon)) \right) \\
&\quad - \frac{ic_0^3S^{(3)}(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}\tau'_\varepsilon)\varepsilon^{1/2-3\gamma} - ic_0\varepsilon^{-\gamma} \left(\dot{\xi}(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}\tau_\varepsilon) - 1 \right) y}{6} \\
&\quad - \frac{iy^2}{\xi_0} + \frac{ic^2}{2\xi_0} \log \left| \frac{-c_0\varepsilon^{-\gamma}\xi_0 + y}{\sqrt{\xi_0}} \right|
\end{aligned}$$

Then, using the relation between the coordinates in each basis, we find

$$\begin{aligned}
\beta_1(y) &= A(\eta)\alpha_1(y) - \bar{B}(\eta)\alpha_2(y) = A(\eta)u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y)e^{i\theta^\varepsilon(y)} \\
\beta_2(y) &= B(\eta)\alpha_1(y) + A(\eta)\alpha_2(y) = B(\eta)u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}, y)e^{i\theta^\varepsilon(y)}.
\end{aligned}$$

Besides, using

$$\rho_2^{s^-} \left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}} \right) = g_2^{s^-} \left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}} \right) - e^{-i\Lambda \left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}}, y \right)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

and the fact that $(g_1^{s^-}, g_2^{s^-})$ is an orthonormal basis, we have $|\rho^{s^-}|_{\mathbf{C}^2} \leq 2$. Moreover, for all $y \in \mathbf{R}$, ρ^{s^-} tends to zero when ε tends to zero. Then, thanks to mass-conservation of u_δ and using Lebesgue's Dominated Convergence Theorem, one can deduce that

$$u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma}\xi_0, y) \rho^{s^-} \left(\frac{\xi_0 s + y}{\sqrt{\xi_0}} \right) = o(1) \text{ in } L^2.$$

The same argument holds for other terms containing ρ^{s^\pm} . So, the L^2 -norms for each coordinates, at time $-s^\varepsilon$ and s^ε can be computed, using that $\|\alpha_2\|_{L^2} = \|a\|_{L^2}$:

$$\begin{aligned}
\|f_1(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 &= 0, & \|f_2(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 &= \|a\|_{L^2}^2 + o(1), \\
\|f_1(c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 &= |B(\eta)|^2 \|a\|_{L^2}^2 + o(1), & \|f_2(c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2}^2 &= |A(\eta)|^2 \|a\|_{L^2}^2 + o(1),
\end{aligned}$$

and the proof is complete. \square

Since the function f depends on ε because of its data, we have to study its derivatives in order to understand if it implies a loss of power of ε .

Proof of Lemma 4.2.8. We proceed by induction. Using (4.7), it is easily seen that

$$\frac{d}{ds} \|f\|_{L^2}^2 = 2 \operatorname{Im} \langle f | i\partial_s f \rangle = 0.$$

So for all $s \in [-c_0\varepsilon^{-\gamma}, c_0\varepsilon^{-\gamma}]$ we have

$$\|f(s)\|_{L^2} = \|f(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2} = \|u_\delta(-c_0\varepsilon^{1/2-\gamma})\|_{L^2} = C_0.$$

The following step poses no problem, since $\partial_y f$ satisfies:

$$i\partial_s(\partial_y f) - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} \partial_y f = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} f,$$

and

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} \|\partial_y f\|_{L^2}^2 &= 2 \operatorname{Im} \langle \partial_y f | i\partial_s \partial_y f \rangle \\
&\leq C \|\partial_y f\|_{L^2},
\end{aligned}$$

and so

$$\|\partial_y f(s)\|_{L^2} \leq C|s| + \|\partial_y f(-c_0\varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2},$$

for $|s| \leq c_0 \varepsilon^{-\gamma}$ and where

$$\begin{aligned} \partial_y f(-c_0 \varepsilon^{-\gamma}) &= \partial_y \left(u_\delta(s, y) e^{\frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(y)} \right) \\ &= \left(\partial_y u_\delta(s, y) + \frac{d}{dy} \left(\frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(y) \right) u_\delta(s, y) \right) e^{\frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(y)}. \end{aligned}$$

Using (4.37) we deduce

$$\|\partial_y f(s)\|_{L^2} \leq C_1 \varepsilon^{-\gamma}.$$

Now for $k \geq 1$, an easy computation shows that $\partial_y^k f$ satisfies

$$i \partial_s (\partial_y^k f) - \begin{pmatrix} y + s \xi_0 & c \\ c & -(y + s \xi_0) \end{pmatrix} \partial_y^k f = k \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \partial_y^{k-1} f,$$

and that

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \|\partial_y^k f\|_{L^2}^2 &= 2 \operatorname{Im} \langle \partial_y^k f | i \partial_s \partial_y^k f \rangle \\ &\leq \tilde{C}_k \|\partial_y^k f\|_{L^2} \|\partial_y^{k-1} f\|_{L^2} \\ &\leq \tilde{C}_k \|\partial_y^k f\|_{L^2} \varepsilon^{-(k-1)\gamma}, \end{aligned}$$

where we have used the induction hypothesis. Then, since $\phi^\varepsilon(y)$ is linear in y (see (4.32)) we then easily notice that for all $k \in \mathbf{N}$

$$\partial_y^k \left(u_\delta(s, y) e^{\frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(s, y)} \right) = \sum_{j=0}^k C_j \partial_y^j u_\delta(s, y) e^{\frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon} \left(\frac{d}{dy} \frac{i}{\varepsilon} \phi^\varepsilon(y) \right)^{k-j}.$$

So using (4.37), we deduce for $|s| \lesssim \varepsilon^{-\gamma}$

$$\|\partial_y^k f(s)\|_{L^2} \leq \|\partial_y^k f(-c_0 \varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2} + \tilde{C}_k |s| \varepsilon^{-(k-1)\gamma} \leq C_k \varepsilon^{-k\gamma},$$

which completes the proof. \square

The last step is to check the validity of the approximation on the interval we consider.

4.5.4 Validity of the inner approximation and conclusion

We now prove Theorem 4.2.9. To shorten notations, we will only write the computations for nonnegative κ , but the proof for the other case is easily performed, considering $|\kappa|$.

We use

$$i \partial_s r^\varepsilon + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 r^\varepsilon - \begin{pmatrix} y + s \xi_0 & c \\ c & -(y + s \xi_0) \end{pmatrix} r^\varepsilon = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 f + \kappa \sqrt{\varepsilon} |r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f)$$

to compute

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2}^2 &= 2 \operatorname{Im} \left\langle \overline{r^\varepsilon} \left| \frac{-\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 r^\varepsilon + V_\delta(s \xi_0 + y) r^\varepsilon \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 f + \kappa \sqrt{\varepsilon} |r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f) \right\rangle. \end{aligned}$$

We check that the first and second terms give no contribution since they are real-valued when one computes the scalar products with r^ε . For the remaining terms, we observe

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Im} \left\langle \overline{r^\varepsilon} \left| \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2 f \right\rangle &\leq \sqrt{\varepsilon} \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \|\partial_y^2 f\|_{L^2} \\ 2 \operatorname{Im} \left\langle \overline{r^\varepsilon} \left| \sqrt{\varepsilon} |r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f) \right\rangle &\lesssim \kappa \sqrt{\varepsilon} (\|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|f\|_{L^\infty}^2) \|f\|_{L^2} \|r^\varepsilon\|_{L^2}. \end{aligned}$$

We perform a bootstrap argument with the following assumption

$$\|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 \leq \varepsilon^{-\alpha}, \quad (4.40)$$

with $\alpha = (1 - 3\gamma)/2$. Besides, we use Gagliardo-Nirenberg inequality and Lemma 4.2.8 to write

$$\|f\|_{L^\infty} \lesssim \|f\|_{L^2}^{1/2} \|\partial_y f\|_{L^2}^{1/2} \lesssim \varepsilon^{-\gamma/2}.$$

These points allow us to write

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} &\lesssim \sqrt{\varepsilon} \|\partial_y^2 f\|_{L^2} + \kappa \sqrt{\varepsilon} (\|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|f\|_{L^\infty}^2) \|f\|_{L^2} \\ &\leq C \left[\varepsilon^{1/2-2\gamma} + \kappa \varepsilon^{1/2-\alpha} + \kappa \varepsilon^{1/2-\gamma} \right] \\ &\leq C \left[\varepsilon^{1/2-2\gamma} + \kappa \varepsilon^{3\gamma/2} \right]. \end{aligned}$$

Integrating these terms, we obtain for $s \in [-c_0 \varepsilon^{-\gamma}, c_0 \varepsilon^{-\gamma}]$

$$\begin{aligned} \|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} &\leq \|r^\varepsilon(-c_0 \varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2} + \tilde{C} \left[\varepsilon^{1/2-3\gamma} + \kappa \varepsilon^{\gamma/2} \right] \\ &\leq C_1 \varepsilon^\gamma + C \varepsilon^{1/2-3\gamma} + C \kappa \varepsilon^{\gamma/2} \\ &\leq C \kappa \varepsilon^{\gamma/2}, \end{aligned} \quad (4.41)$$

where C_1 is given by (4.30), κ does not depend on ε , C is uniform in κ and where we only keep the worst contributions since other powers of ε are at larger than $\gamma/2$.

We now wish to prove the validity of the bootstrap assumption (4.40). Thus, we look for the weighted derivative of r^ε , which satisfies

$$\begin{aligned} i\partial_s(\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon) + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \partial_y^2(\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon) - \begin{pmatrix} y + s\xi_0 & c \\ c & -(y + s\xi_0) \end{pmatrix} (\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon) = \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \sqrt{\varepsilon} r^\varepsilon + \frac{\varepsilon}{2} \partial_y^3 f + \kappa \varepsilon \partial_y (|r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f)). \end{aligned}$$

We first notice that

$$\partial_y (|r^\varepsilon + f|^2 (r^\varepsilon + f)) = (r^\varepsilon + f)^2 (\overline{\partial_y r^\varepsilon} + \overline{\partial_y f}) + 2|r^\varepsilon + f|^2 (\partial_y r^\varepsilon + \partial_y f).$$

Proceeding in the same way as before, and thanks to (4.40), (4.41) and Lemma 4.2.8, we see that

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon\|_{L^2} &\lesssim \sqrt{\varepsilon} \|r^\varepsilon\|_{L^2} + \varepsilon \|\partial_y^3 f\|_{L^2} + \kappa \sqrt{\varepsilon} [\|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 + \|f\|_{L^\infty}^2] [\|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon\|_{L^2} + \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y f\|_{L^2}] \\ &\lesssim \kappa \varepsilon^{1/2+\gamma/2} + \varepsilon^{1-3\gamma} + \kappa \varepsilon^{1-\alpha-\gamma} + \kappa \varepsilon^{1-2\gamma} + \left(\kappa \varepsilon^{1/2-\alpha} + \kappa \varepsilon^{1/2-\gamma} \right) \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon\|_{L^2} \\ &\lesssim \kappa \varepsilon^{1/2+\gamma/2} + \varepsilon^{1-3\gamma} + \left(\kappa \varepsilon^{3\gamma/2} + \kappa \varepsilon^{1/2-\gamma} \right) \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon\|_{L^2}. \end{aligned}$$

We then find by integration, for $|s| \leq c_0 \varepsilon^{-\gamma}$

$$\begin{aligned} \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon(s)\|_{L^2} &\leq \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon(-c_0 \varepsilon^{-\gamma})\|_{L^2} + C \left[\varepsilon^{1-4\gamma} + \kappa \varepsilon^{1/2-\gamma/2} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-c_0 \varepsilon^{-\gamma}}^s \left(\kappa \varepsilon^{3\gamma/2} + \varepsilon^{1/2-\gamma} \right) \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon(z)\|_{L^2} dz \right], \end{aligned}$$

and using Gronwall Lemma, we deduce for $0 < \gamma < 1/6$

$$\begin{aligned} \|\sqrt{\varepsilon}\partial_y r^\varepsilon(s)\|_{L^2} &\leq \left(C_2 \varepsilon^\gamma + C \left[\varepsilon^{1-4\gamma} + \kappa \varepsilon^{1/2-\gamma/2} \right] \right) e^{C(\varepsilon^{1/2-2\gamma} + \kappa \varepsilon^{\gamma/2})} \\ &\leq C_2 \varepsilon^\gamma, \end{aligned} \quad (4.42)$$

where C_2 is given by (4.31), where we have only kept the worst term and since $C\varepsilon^{1/2-\gamma} + \kappa\varepsilon^{3\gamma/2} \leq 1$, for ε sufficiently small, the exponential term is bounded independently of ε on the time interval we consider. Then, Gagliardo Nirenberg inequality gives us

$$\begin{aligned} \|r^\varepsilon\|_{L^\infty}^2 &\leq 2\|r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \|\partial_y r^\varepsilon(s)\|_{L^2} \\ &\leq \tilde{C}\kappa\varepsilon^{\gamma/2}\varepsilon^{\gamma-1/2} \leq \tilde{C}\kappa\varepsilon^{\frac{3\gamma-1}{2}}, \end{aligned}$$

where \tilde{C} is independent of ε and the bootstrap assumption (4.40) holds as long as

$$\tilde{C}\kappa\varepsilon^{\frac{3\gamma-1}{2}} \leq \varepsilon^{\frac{3\gamma-1}{2}} \Leftrightarrow \tilde{C}\kappa \leq 1,$$

and for a small coefficient $\kappa < 1/\tilde{C}$, the inequality is true and the proof of Theorem 4.2.9 is complete.

4.6 Transition between the modes

In this section, we prove Corollary 4.1.6 to conclude.

By definition of v^ε , we have

$$\psi^\varepsilon(t^\varepsilon, x) = \varepsilon^{-1/4} v^\varepsilon \left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) e^{i\frac{\xi_0^2 t^\varepsilon}{2\varepsilon} + i\frac{\xi_0(x - t^\varepsilon \xi_0)}{\varepsilon}}$$

and from Theorem 4.2.9 we infer the following estimate in L^2 :

$$\begin{pmatrix} \psi_1^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \\ \psi_2^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \end{pmatrix} = \varepsilon^{-1/4} \begin{pmatrix} f_1 \left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \\ f_2 \left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \frac{x - t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \end{pmatrix} e^{i\frac{\xi_0^2 t^\varepsilon}{2\varepsilon} + i\frac{\xi_0(x - t^\varepsilon \xi_0)}{\varepsilon}} + \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma/2}),$$

where the last term contains the L^2 - norm of r^ε . We then write

$$\psi_\pm^\varepsilon(t^\varepsilon, x) = \langle \psi^\varepsilon(t^\varepsilon, x) | \chi_\delta^\pm(x) \rangle,$$

and using Section 4.4.2:

$$\begin{aligned} \psi_+^\varepsilon(t^\varepsilon, x) &= \psi_1^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \cos \left(\Phi \left(\frac{x}{\delta} \right) \right) + \psi_2^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \sin \left(\Phi \left(\frac{x}{\delta} \right) \right) \\ \psi_-^\varepsilon(t^\varepsilon, x) &= \psi_1^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \sin \left(\Phi \left(\frac{x}{\delta} \right) \right) - \psi_2^\varepsilon(t^\varepsilon, x) \cos \left(\Phi \left(\frac{x}{\delta} \right) \right), \end{aligned}$$

where Φ is given by $\Phi \left(\frac{x}{\delta} \right) = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{\delta}{x} \right)$.

For ψ_+^ε , we have

$$\begin{aligned} \|\psi_+^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 &= \int_{y \in \mathbf{R}} \left| f_1 \left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, y \right) \cos \left(\frac{1}{2} \arctan \left(\frac{c}{y + \frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} \xi_0} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. + f_2 \left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, y \right) \sin \left(\frac{1}{2} \arctan \left(\frac{c}{y + \frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} \xi_0} \right) \right) \right|^2 dy + \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma/2}) \\ \|\psi_-^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 &= \int_{y \in \mathbf{R}} \left| f_2 \left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, y \right) \cos \left(\frac{1}{2} \arctan \left(\frac{c}{y + \frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} \xi_0} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. - f_1 \left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, y \right) \sin \left(\frac{1}{2} \arctan \left(\frac{c}{y + \frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} \xi_0} \right) \right) \right|^2 dy + \mathcal{O}(\varepsilon^{\gamma/2}). \end{aligned}$$

We split up the integrals into:

$$\int_{y \in \mathbf{R}} \dots dy = \int_{|y| \geq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon} \dots + \int_{|y| \leq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon} \dots$$

for $0 < \tau < 1$ and we use the same arguments as in Section 4.5.1.

- For $|y| \geq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon$, we have $|y| \sqrt{\varepsilon}/(\xi_0 t^\varepsilon) \geq \tau$ and with Corollary 4.2.7 we have

$$\begin{aligned} \int_{|y| \geq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon} \dots &\lesssim \int_{|y| \geq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon} |f_1|^2 + |f_2|^2 dy \\ &\lesssim \int_{|y| \geq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon} |u_\delta(-t^\varepsilon, y)|^2 \times \frac{\varepsilon |y|^2}{\xi_0^2 (t^\varepsilon)^2} \times \frac{\xi_0^2 (t^\varepsilon)^2}{\varepsilon |y|^2} dy \\ &= \mathcal{O}\left(\left(\frac{t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}\right)^2\right) = \mathcal{O}(\varepsilon^{2\gamma}) \end{aligned}$$

- For $|y| \leq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon$, we have

$$\left| y + \frac{\tau t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right| \geq \frac{\tau t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} - |y| \geq (1 - \tau) \frac{\xi_0 t^\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad \text{where } \tau \in]0, 1[.$$

We deduce $\left| y + \frac{\tau t^\varepsilon \xi_0}{\sqrt{\varepsilon}} \right|^{-1} \leq \mathcal{O}(\varepsilon^\gamma)$ and so we can use the same asymptotics as in Section 4.5.1 and write

$$\arctan\left(\frac{c}{y + c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}}\right) = \frac{c}{y + c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{c}{y + c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}}\right)^3\right),$$

which gives

$$\sin\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{c}{y + c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}}\right)\right) = \mathcal{O}(\varepsilon^\gamma),$$

and

$$\cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{c}{y + c_0 \xi_0 \varepsilon^{-\gamma}}\right)\right) = 1 + \mathcal{O}(\varepsilon^{2\gamma}).$$

We then compute for ψ_+^ε :

$$\begin{aligned} \int_{|y| \leq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon} \dots &= \int_{|y| \leq \tau \xi_0 \sqrt{\varepsilon}/t^\varepsilon} |b(c/\sqrt{\xi_0})|^2 |u_\delta(-t^\varepsilon, y)|^2 (1 + \mathcal{O}(\varepsilon^{3\gamma})) dy \\ &= (1 + \mathcal{O}(\varepsilon^{3\gamma})) |b(c/\sqrt{\xi_0})|^2 \|a\|_{L^2}^2, \end{aligned}$$

$$\text{and since } \|\psi_-^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 = \|a\|_{L^2}^2 - \|\psi_+^\varepsilon(t^\varepsilon)\|_{L^2}^2 = \left(e^{-\frac{\pi \varepsilon^2}{\xi_0}} + \mathcal{O}(\varepsilon^{3\gamma})\right) \|a\|_{L^2}^2$$

and Corollary 4.1.6 is proved. We can then infer that the propagation through an avoided crossing point of this type generates transition of energy between both levels.

Bibliographie

- [1] A. Aftalion, X. Blanc, and F. Nier, *Lowest Landau level functional and Bargmann spaces for Bose-Einstein condensates*, J. Funct. Anal. **241** (2006), no. 2, 661–702.
- [2] A. Aftalion and F. Nier, *Adiabatic approximation for a two-level atom in a light beam*, Annales de la Faculté des Sciences de Toulouse **Série 6 22** (2013), no. 1, 43–131.
- [3] M. H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Science **269** (1995).
- [4] A. Athanassoulis, T. Paul, F. Pezzotti, and M. Pulvirenti, *Semiclassical propagation of coherent states for the Hartree equation*, Ann. Henri Poincaré **12** (2011), no. 8, 1613–1634.
- [5] J. E. Avron and A. Elgart, *Adiabatic theorem without a gap condition*, Communications in Mathematical Physics **203** (1999), no. 2, 445–463.
- [6] D. Bambusi, S. Graffi, and T. Paul, *Long time semiclassical approximation of quantum flows: a proof of the Ehrenfest time*, Asymptotic Analysis **21** (1999), no. 2, 149 – 160.
- [7] ———, *Normal forms and quantization formulae*, Communications in Mathematical Physics **207** (1999), no. 1, 173–195.
- [8] W. Bao, *Ground states and dynamics of multicomponent Bose-Einstein condensates*, Multiscale Model. Simul. **2** (2004), no. 2, 210–236.
- [9] ———, *Analysis and efficient computation for the dynamics of two-component Bose-Einstein condensates*, Stationary and time dependent Gross-Pitaevskii equations, Contemp. Math., vol. 473, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2008, pp. 1–26.
- [10] W. Bao and Y. Cai, *Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation*, Kinet. Relat. Models **6** (2013), no. 1, 1–135.
- [11] W. Bao, Y. Cai, and H. Wang, *Efficient numerical methods for computing ground states and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates*, J. Comput. Phys. **229** (2010), no. 20, 7874–7892.
- [12] W. Bao, H. Li, and Y. Zhang, *Dynamics of rotating two-component Bose-Einstein condensates and its efficient computation*, Phys. D **234** (2007), no. 1, 49–69.
- [13] W. Bao and F. Y. Lim, *Analysis and computation for the semiclassical limits of the ground and excited states of the Gross-Pitaevskii equation*, Hyperbolic problems: theory, numerics and applications, Proc. Sympos. Appl. Math., vol. 67, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2009, pp. 195–215.
- [14] W. Biao and N. Qian, *Nonlinear Landau-Zener tunneling*, Phys. Rev. A **61** (2000), 023402.
- [15] M. Born and V. Fock, *Beweis des adiabatenatzes*, Zeitschrift für Physik **51** (1928), no. 3-4, 165–180.
- [16] M. Born and R. Oppenheimer, *Zur quantentheorie der molekeln*, Annalen der Physik **389** (1927), no. 20, 457–484.

- [17] A. Bouzouina and D. Robert, *Uniform semiclassical estimates for the propagation of quantum observables*, Duke Math. J. **111** (2002), no. 2, 223–252.
- [18] R. Brummelhuis and J. Nourrigat, *Scattering amplitude for Dirac operators*, Comm. Partial Differential Equations **24** (1999), no. 1-2, 377–394.
- [19] P. Cao and R. Carles, *Semi-classical wave packet dynamics for Hartree equations*, Rev. Math. Phys. **23** (2011), no. 9, 933–967.
- [20] R. Carles, *Remarques sur les mesures de wigner*, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics **332** (2001), no. 11, 981 – 984.
- [21] R. Carles, *Semi-classical analysis for nonlinear Schrödinger equations*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, 2008.
- [22] ———, *Nonlinear Schrödinger equation with time dependent potential*, Comm. Math. Sci. **9** (2011), no. 4, 937–964.
- [23] R. Carles, *Interaction of coherent states for Hartree equations*, Arch. Ration. Mech. Anal. **204** (2012), no. 2, 559–598.
- [24] ———, *On Fourier time-splitting methods for nonlinear Schrödinger equations in the semiclassical limit*, SIAM J. Numer. Anal. **51** (2013), no. 6, 3232–3258.
- [25] R. Carles and C. Fermanian Kammerer, *A nonlinear adiabatic theorem for coherent states.*, Nonlinearity **24** (2011), no. 8, 2143–2164.
- [26] ———, *Nonlinear coherent states and Ehrenfest time for Schrödinger equation*, Comm. Math. Phys. **301** (2011), no. 2, 443–472.
- [27] ———, *A nonlinear Landau-Zener formula*, Journal of Statistical Physics **152** (2013), no. 4, 619–656.
- [28] R. Carles, C. Fermanian Kammerer, N. J. Mauser, and H.P. Stimming, *On the time evolution of Wigner measures for Schrödinger equations*, Communications on Pure and Applied Analysis **8** (2009), no. 2, 559 – 585.
- [29] R. Carles and H. Hajaiej, *Complementary study of the standing wave solutions of the gross-pitaevskii equation in dipolar quantum gases.*, preprint (2014).
- [30] R. Carles and J. D. Silva, *Large time behavior in nonlinear schrodinger equation with time dependent potential*, preprint <http://arxiv.org/abs/1305.4089> (2013).
- [31] R. Carles and C. Sparber, *Nonlinear dynamics of semiclassical coherent states in periodic potentials*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **no. 45** (2012), no. 244032.
- [32] ———, *Semiclassical wave packet dynamics in schrödinger equations with periodic potentials*, Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B **17** (2012), no. 3, 759–774.
- [33] T. Cazenave, *Semilinear Schrödinger equations*, Courant Lecture Notes in Mathematics, vol. 10, New York University Courant Institute of Mathematical Sciences, New York, 2003.
- [34] Y. Colin de Verdière, *The level crossing problem in semi-classical analysis. I. The symmetric case*, Proceedings of the International Conference in Honor of Frédéric Pham (Nice, 2002), vol. 53, 2003, pp. 1023–1054.
- [35] ———, *The level crossing problem in semi-classical analysis. II. The Hermitian case*, Ann. Inst. Fourier (Grenoble) **54** (2004), no. 5, 1423–1441, xv, xx–xxi.
- [36] J.-M. Combes, P. Duclos, and R. Seiler, *The born-oppenheimer approximation*, in : Rigorous Atomic and Molecular Physics, eds-G. Velo, A. Wightman **Plenum : New-York** (1981), 185–212.

- [37] M. Combes and D. Robert, *Semiclassical spreading of quantum wave packets and applications near unstable fixed points of the classical flow*, *Asymptot. Anal.* **14** (1997), no. 4, 377–404.
- [38] ———, *A phase-space study of the quantum Loschmidt echo in the semiclassical limit*, *Ann. Henri Poincaré* **8** (2007), no. 1, 91–108.
- [39] M. Combes and D. Robert, *Coherent states and applications in mathematical physics*, *Theoretical and Mathematical Physics*, Springer, Dordrecht, 2012.
- [40] S. Descombes and M. Thalhammer, *The Lie-Trotter splitting for nonlinear evolutionary problems with critical parameters: a compact local error representation and application to nonlinear Schrödinger equations in the semiclassical regime*, *IMA J. Numer. Anal.* **33** (2013), no. 2, 722–745.
- [41] C. Emmrich and A. Weinstein, *Geometry of the transport equation in multicomponent WKB approximations*, *Comm. Math. Phys.* **176** (1996), no. 3, 701–711.
- [42] Erwan Faou, Vasile Gradinaru, and Christian Lubich, *Computing semiclassical quantum dynamics with Hagedorn wavepackets*, *SIAM J. Sci. Comput.* **31** (2009), no. 4, 3027–3041.
- [43] C. Fermanian Kammerer, *Semi-classical analysis of a Dirac equation without adiabatic decoupling*, *Monatsh. Math.* **142** (2004), no. 4, 281–313.
- [44] C. Fermanian Kammerer and P. Gérard, *Mesures semi-classiques et croisement de modes*, *Bull. Soc. Math. France* **130** (2002), no. 1, 123–168.
- [45] ———, *Mesures semi-classiques et croisement de modes*, *Bull. Soc. Math. France* **130** (2002), no. 1, 123–168.
- [46] ———, *A Landau-Zener formula for non-degenerated involutive codimension 3 crossings*, *Ann. Henri Poincaré* **4** (2003), no. 3, 513–552.
- [47] C. Fermanian Kammerer and C. Lasser, *Wigner measures and codimension two crossings*, *J. Math. Phys.* **44** (2003), no. 2, 507–527.
- [48] C. Fermanian Kammerer and C. Lasser, *Propagation through generic level crossings: a surface hopping semigroup*, *SIAM J. Math. Anal.* **40** (2008), no. 1, 103–133.
- [49] ———, *Single switch surface hopping for molecular quantum dynamics.*, *Journal of Mathematical Chemistry* **50** (2012), no. 3, 620–635.
- [50] C. Fermanian Kammerer and V. Rousse, *Resolvent estimates and matrix-valued Schrödinger operator with eigenvalue crossings; application to Strichartz estimates*, *Comm. Partial Differential Equations* **33** (2008), no. 1-3, 19–44.
- [51] D. Fujiwara, *A construction of the fundamental solution for the Schrödinger equation*, *J. Anal. Math.* **35** (1979), 41–96.
- [52] ———, *Remarks on the convergence of the Feynman path integrals*, *Duke Math. J.* **47** (1980), no. 3, 559–600.
- [53] P. Gérard and E. Leichtnam, *Ergodic properties of eigenfunctions for the Dirichlet problem*, *Duke Math. J.* **71** (1993), no. 2, 559–607.
- [54] P. Gérard, P.A. Markowich, N.J. Mauser, and F. Poupaud, *Homogenization limits and Wigner transforms*, *Comm. Pure Appl. Math.* **50** (1997), no. 4, 323–379.
- [55] J. Ginibre and G. Velo, *Generalized Strichartz inequalities for the wave equation*, *J. Funct. Anal.* **133** (1995), no. 1, 50–68.
- [56] R. T. Glassey, *On the blowing up of solutions to the Cauchy problem for nonlinear Schrödinger equations*, *J. Math. Phys.* **18** (1977), no. 9, 1794–1797. MR 0460850 (57 #842)

- [57] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, sixth ed., Academic Press Inc., San Diego, CA, 2000, Translated from the Russian, Translation edited and with a preface by Alan Jeffrey and Daniel Zwillinger.
- [58] G. A. Hagedorn, *A time dependent Born-Oppenheimer approximation*, Comm. Math. Phys. **77** (1980), no. 1, 1–19.
- [59] ———, *Proof of the Landau-Zener formula in an adiabatic limit with small eigenvalue gaps*, Comm. Math. Phys. **136** (1991), no. 3, 433–449.
- [60] G. A. Hagedorn, *Molecular propagation through electron energy level crossings*, Mem. Amer. Math. Soc. **111** (1994), no. 536, vi+130.
- [61] G. A. Hagedorn and A. Joye, *Landau-Zener transitions through small electronic eigenvalue gaps in the Born-Oppenheimer approximation*, Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor. **68** (1998), no. 1, 85–134.
- [62] ———, *Molecular propagation through small avoided crossings of electron energy levels*, Rev. Math. Phys. **11** (1999), no. 1, 41–101.
- [63] ———, *Exponentially accurate semiclassical dynamics: propagation, localization, Ehrenfest times, scattering, and more general states*, Ann. Henri Poincaré **1** (2000), no. 5, 837–883.
- [64] ———, *A time-dependent Born-Oppenheimer approximation with exponentially small error estimates*, Comm. Math. Phys. **223** (2001), no. 3, 583–626.
- [65] G.A. Hagedorn, *Classification and normal forms for avoided crossings of quantum-mechanical energy levels*, J. Phys. A **31** (1998), no. 1, 369–383.
- [66] D. S. Hall, M. R. Matthews, J. R. Ensher, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Dynamics of component separation in a binary mixture of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998), 1539–1542.
- [67] D. S. Hall, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Measurements of relative phase in two-component Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998), 1543–1546.
- [68] ———, *Measurements of relative phase in two-component Bose-Einstein condensates [phys. rev. lett. 81, 1543 (1998)]*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998), 4532–4532.
- [69] L. Hari, *Coherent states for systems of L^2 -supercritical nonlinear Schrödinger equations*, Comm. Partial Differential Equations **38** (2013), no. 3, 529–573.
- [70] ———, *Propagation of semiclassical wave packets through avoided eigenvalue crossings in nonlinear schrödinger equations*, preprint (2014).
- [71] T. Jecko, *Non-trapping condition for semiclassical Schrödinger operators with matrix-valued potentials*, Math. Phys. Electron. J. **11** (2005), no. 2, Paper 2, 38 pp. (electronic).
- [72] T. Jecko, *Erratum to the paper: “Non-trapping condition for semiclassical Schrödinger operators with matrix-valued potentials”*, Math. Phys. Electron. J. **13** (2007), Paper 3, 4.
- [73] M. Jona-Lasinio, O. Morsch, M. Cristiani, N. Malossi, J. H. Müller, E. Courtade, M. Anderlini, and E. Arimondo, *Asymmetric Landau-Zener tunneling in a periodic potential*, Phys. Rev. Lett. **91** (2003), 230406.
- [74] ———, *Erratum: Asymmetric Landau-Zener tunneling in a periodic potential [phys. rev. lett.prltao0031-9007 91, 230406 (2003)]*, Phys. Rev. Lett. **93** (2004), 119903.
- [75] A. Joye, *Proof of the Landau-Zener formula*, Asymptotic Anal. **9** (1994), no. 3, 209–258.
- [76] T. Kato, *On the adiabatic theorem of quantum mechanics*, Journal of the Physical Society of Japan **5** (1950), no. 6, 435–439.

- [77] M. Keel and T. Tao, *Endpoint Strichartz estimates*, Amer. J. Math. **120** (1998), no. 5, 955–980.
- [78] R. Khomeriki and S. Ruffo, *Nonadiabatic Landau-Zener tunneling in waveguide arrays with a step in the refractive index*, Phys. Rev. Lett. **94** (2005), 113904.
- [79] M. Klein, A. Martinez, R. Seiler, and X. P. Wang, *On the Born-Oppenheimer expansion for polyatomic molecules*, Comm. Math. Phys. **143** (1992), no. 3, 607–639.
- [80] J. Krieger, Y. Martel, and P. Raphaël, *Two-soliton solutions to the three-dimensional gravitational Hartree equation*, Comm. Pure Appl. Math. **62** (2009), no. 11, 1501–1550.
- [81] L. D. Landau, *Collected papers of L. D. Landau*, Edited and with an introduction by D. ter Haar. Second printing, Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1967.
- [82] C. Lasser, *Conical crossings in molecular dynamics*, Ph.D. thesis, Technische Universität München, June 2004.
- [83] C. Lasser and T. Swart, *Single switch surface hopping for a model of pyrazine*, J.Chem.Phys **129** (2008), no. 034302, 1–8.
- [84] P.-L. Lions and T. Paul, *Sur les mesures de Wigner*, Rev. Mat. Iberoamericana **9** (1993), no. 3, 553–618.
- [85] Christian Lubich, *From quantum to classical molecular dynamics: reduced models and numerical analysis*, Zurich Lectures in Advanced Mathematics, European Mathematical Society (EMS), Zürich, 2008.
- [86] ———, *On splitting methods for Schrödinger-Poisson and cubic nonlinear Schrödinger equations*, Math. Comp. **77** (2008), no. 264, 2141–2153.
- [87] A. Martinez and V. Sordoni, *Twisted pseudodifferential calculus and application to the quantum evolution of molecules*, Mem. Amer. Math. Soc. **200** (2009), no. 936, vi+82.
- [88] F. Méhats and R. El Hejj, *Analysis of models for quantum transport of electrons in graphene layers*, preprint (2013).
- [89] D. Robert, *Propagation of coherent states in quantum mechanics and applications*, Partial differential equations and applications, Sémin. Congr., vol. 15, Soc. Math. France, Paris, 2007, pp. 181–252.
- [90] S. Roman, *Formula of Faa di Bruno*, Amer. Math. Monthly **87** (1980), 805–809.
- [91] V. Rousse, *Approximation de born-oppenheimer en présence de (presque) croisement de surfaces d'énergie*, Ph.D. thesis, Université Joseph-Fourier - Grenoble I, June 2004.
- [92] ———, *Landau-Zener transitions for eigenvalue avoided crossings in the adiabatic and Born-Oppenheimer approximations*, Asymptot. Anal. **37** (2004), no. 3-4, 293–328.
- [93] A. Sacchetti, *Universal critical power for nonlinear Schrödinger equations with a symmetric double well potential*, Phys. Rev. Lett. **103** (2009), 194101.
- [94] R. Schubert, O. Vallejos, R., and F. Toscano, *How do wave packets spread? time evolution on ehrenfest time scales*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **45** (2012), no. 215307.
- [95] I. Segal, *Space-time decay for solutions of wave equations*, Advances in Math. **22** (1976), no. 3, 305–311.
- [96] H. Spohn and S. Teufel, *Adiabatic decoupling and time-dependent Born-Oppenheimer theory*, Comm. Math. Phys. **224** (2001), no. 1, 113–132, Dedicated to Joel L. Lebowitz. MR 1868994 (2002j:81287)
- [97] R. S. Strichartz, *Restrictions of Fourier transforms to quadratic surfaces and decay of solutions of wave equations*, Duke Math. J. **44** (1977), no. 3, 705–714.

- [98] T. Tao, *Nonlinear dispersive equations*, CBMS Regional Conference Series in Mathematics, vol. 106, Published for the Conference Board of the Mathematical Sciences, Washington, DC, 2006, Local and global analysis.
- [99] S. Teufel, *Adiabatic perturbation theory in quantum dynamics*, Lecture Notes in Mathematics, vol. 1821, Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [100] H. Triebel, *Spaces of distributions with weights. Multipliers in L^p -spaces with weights*, Math. Nachr. **78** (1977), 339–355.
- [101] Y. Tsutsumi, *L^2 -solutions for nonlinear Schrödinger equations and nonlinear groups*, Funkcial. Ekvac. **30** (1987), no. 1, 115–125.
- [102] K. Yajima, *Smoothness and non-smoothness of the fundamental solution of time dependent Schrödinger equations*, Comm. Math. Phys. **181** (1996), no. 3, 605–629.
- [103] K. Yajima and G. Zhang, *Smoothing property for Schrödinger equations with potential superquadratic at infinity*, Comm. Math. Phys. **221** (2001), no. 3, 573–590.
- [104] ———, *Local smoothing property and Strichartz inequality for Schrödinger equations with potentials superquadratic at infinity*, J. Differential Equations **202** (2004), no. 1, 81–110.
- [105] C. Zener, *Non-adiabatic crossing of energy levels*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A **137** (1932), no. 833, 696–702.