

PHILIPPE KERDELHUÉ

Équation de Schrödinger en dimension 2, avec potentiel et champ magnétique périodiques. Cas d'un réseau triangulaire de puits

Journées Équations aux dérivées partielles (1990), p. 1-8

http://www.numdam.org/item?id=JEDP_1990___A11_0

© Journées Équations aux dérivées partielles, 1990, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Journées Équations aux dérivées partielles » (<http://www.math.sciences.univ-nantes.fr/edpa/>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

Equation de Schrödinger en dimension 2, avec potentiel et champ magnétique périodiques. Cas d'un réseau triangulaire de puits.

par P. Kerdelhué

Dépt de mathématiques et d'informatique
Ecole Normale Supérieure
45, rue d'Ulm
75005 Paris

Dépt de mathématiques
Université de Paris Sud
91405 Orsay

1. Introduction.

On s'intéresse ici à l'équation de Schrödinger en dimension 2, avec potentiel et champ magnétique périodiques et invariants par une rotation d'angle $\pi/3$, dans le cas où le potentiel n'atteint son minimum qu'une fois par cellule de périodicité. Le but de cet exposé est de montrer comment on ramène l'étude de la partie inférieure de spectre de ces opérateurs à celle d'opérateurs pseudo-différentiels; dans un travail à paraître, nous montrons que les mêmes techniques permettent de traiter ces opérateurs pseudo-différentiels.

Ce travail a été inspiré par les articles des physiciens M. Wilkinson [10]-[13], F.H. Claro et G.H. Wannier [2], et surtout de la série d'articles de B. Helffer et S. Sjöstrand [4]-[9], en particulier [7]-[9] qui traitent le cas d'un réseau carré.

Plus précisément, nous nous intéressons à l'opérateur $P_A(h) = (hD_{x_1} - A_1)^2 + (hD_{x_2} - A_2)^2 + V(x)$ défini sur $L^2(\mathbb{R}^2)$, avec $D_{x_j} = -i\partial_{x_j}$. Le champ magnétique B est donné par $B dx_1 \wedge dx_2 = d(A_1 dx_1 + A_2 dx_2)$, soit $B = \partial_{x_1} A_2 - \partial_{x_2} A_1$. Nous appelons κ la rotation de centre 0 et d'angle $\pi/3$, nous supposons que V et B sont analytiques, invariants par κ , et périodiques selon un réseau $\mathbb{Z}\vartheta_1 \oplus \mathbb{Z}\vartheta_2$, avec $\vartheta_1 \neq 0$, $\vartheta_2 = \kappa(\vartheta_1)$. Nous aurons également besoin de prendre $|B| \leq \varepsilon_0$ pour un ε_0 assez petit mais indépendant de $h \in]0, h_0]$.

Nous traiterons le cas où le potentiel V atteint son minimum (que l'on suppose égal à 0) une seule fois par cellule de périodicité, ce qui, compte tenu des symétries que l'on s'est imposé, revient à supposer que V s'annule aux points de $\mathbb{Z}\nu_1 \oplus \mathbb{Z}\nu_2$, et en ces points seulement. On suppose aussi que ce minimum est non dégénéré, c'est-à-dire que $V''(0)$ est définie positive.

2. Opérateurs commutant avec P .

Nous allons maintenant traduire les invariances de V et B par l'existence d'opérateurs commutant avec $P = P_A(\hbar)$.

L'hypothèse de périodicité de B par translation selon le réseau $\mathbb{Z}\nu_1 \oplus \mathbb{Z}\nu_2$ entraîne l'existence de deux fonctions réelles ψ_1 et ψ_2 telles que $A - \tau_j A = d\psi_j$, où τ_j est défini sur $L^2(\mathbb{R}^2)$ par $\tau_j u(x) = u(x - \nu_j)$. On montre alors que les "translations magnétiques" $T_1 = e^{i\psi_1/\hbar} \tau_1$ et $T_2 = e^{i\psi_2/\hbar} \tau_2$ commutent avec P ; elles ne commutent pas forcément entre elles et on a la relation: $T_1 T_2 = e^{i\Phi/\hbar} T_2 T_1$, où Φ désigne le flux de B à travers une cellule de périodicité: $\Phi = \int_{\mathcal{C}} B dx_1 dx_2$.

De même, l'invariance par rotation de B entraîne l'existence d'une fonction f réelle vérifiant $df = A - \kappa^* A$, et donc d'une "rotation magnétique" $\mathcal{F} = e^{if/\hbar} \kappa^*$ commutant avec P .

Quitte à ajouter une constante à f , on peut supposer $\mathcal{F}^6 = \text{Id}$. De même, en ajoutant des constantes à ψ_1 et ψ_2 , on peut avoir:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} T_2 &= T_1 \mathcal{F} \\ \mathcal{F}^2 T_1^{-1} &= T_2 \mathcal{F}^2 \end{aligned}$$

Avec ce choix de T_1, T_2 et \mathcal{F} on a les égalités:

$$\begin{aligned} T_1 T_3 &= e^{i\Phi/\hbar} T_3 T_1 = e^{i\Phi/2\hbar} T_2, \text{ où } T_3 \text{ est la rotation magnétique} \\ T_3 &= \mathcal{F}^{-1} T_2 \mathcal{F}. \end{aligned}$$

Ceci nous conduit à introduire \hbar' , plus petit réel strictement positif congru à $-\Phi/\hbar$ modulo 2π . Alors $e^{i\hbar'/2} = \pm e^{-i\Phi/2\hbar}$, et quitte à changer

tous les T_n en leurs opposés dans le cas où on a le signe $-$, on a les relations:

$$T_1 T_3 = e^{-ih'} T_3 T_1 = e^{-ih'/2} T_2$$

$$T_2 T_1 = e^{ih'} T_2 T_1.$$

Nous utiliserons donc ces translations sous la forme suivante: pour $\alpha \in \mathbb{Z}^2$, on pose $T^\alpha = e^{ih' \alpha_1 \alpha_2 / 2} T_1^{\alpha_1} T_2^{\alpha_2}$.

Ces opérateurs vérifient:

$$(T^\alpha)^{-1} = (T^\alpha)^* = T^{-\alpha}$$

$$T^\alpha T^\beta = e^{ih' \sigma(\alpha, \beta) / 2} T^{\alpha + \beta}, \text{ où } \sigma \text{ est la 2-forme canonique}$$

$$\sigma(\alpha, \beta) = \alpha_2 \beta_1 - \alpha_1 \beta_2$$

$$\mathfrak{F} T^\alpha = T^{r^{-1}(\alpha)} \mathfrak{F}, \text{ où } r \text{ est la "rotation" } r(\alpha) = (-\alpha_2, \alpha_1 + \alpha_2).$$

Nous allons maintenant montrer comment on ramène l'étude de la partie inférieure du spectre de P à celle d'un opérateur pseudo-différentiel $q(x, h'D)$.

3. Renormalisation.

On commence par se ramener à un problème plus simple (problème à un puits) en bouchant tous les puits sauf un.

Soit donc w une fonction positive, radiale, à support dans la boule de centre O et de rayon η , $\eta > 0$ étant choisi assez petit, et telle que $w(O) > 0$. On considère l'opérateur à un puits

$$P_0 = P + \sum_{\beta \in \mathbb{Z}^2 \setminus (0,0)} w(x - \beta_1 \nu_1 - \beta_2 \nu_2).$$

Pour ce type d'opérateurs, Helffer et Sjöstrand ont montré (voir [6]) que la première valeur propre $\lambda(h)$ est simple et qu'il existe deux constantes C_1 et C_2 , $0 < C_1 < C_2$ telles que $\lambda(h) = C_1 h + \mathcal{O}(h^2)$ et $\text{Sp}(P_0) \cap]-\infty, C_2 h] = \{\lambda(h)\}$.

Soit φ_0 un vecteur propre normalisé de P_0 associé à $\lambda(h)$. L'idée est d'utiliser φ_0 et ses translatés $\varphi_\alpha = T^\alpha \varphi_0$ pour construire une base de F , espace spectral de P associé à l'intervalle $]-\infty, C_2 h]$.

On a des inégalités d'Agmon sur ψ_0 :

$$|\psi_0| + |\nabla_A \psi_0| = O_\varepsilon(\exp(-d_V(0, x)(1-\varepsilon)/h + \varepsilon/h)) \text{ dans } L^2(\mathbb{R}^2)$$

$$\text{où } \nabla_A \psi_0 = ((\partial_{x_1} - iA_1)\psi_0, (\partial_{x_2} - iA_2)\psi_0)$$

et d_V est la distance d'Agmon, c'est-à-dire la distance associée à la métrique $\sqrt{dx^2}$.

On pose $\psi_\alpha = T^\alpha \psi_0$ pour $\alpha \in \mathbb{Z}^2$ et bien sûr:

$$|\psi_\alpha| + |\nabla_A \psi_\alpha| = O_\varepsilon(\exp(-d_V(x, \alpha_1 \nu_1 + \alpha_2 \nu_2)(1-\varepsilon)/h + \varepsilon/h)) \text{ dans } L^2(\mathbb{R}^2).$$

Soit Π_F le projecteur orthogonal sur F , alors on montre que $v_\alpha = \Pi_F \psi_\alpha$ est une base hilbertienne de F .

Les propriétés de décroissance des fonctions ψ_α permettent de montrer que la matrice V définie par $V_{\alpha, \beta} = (v_\alpha | v_\beta)$ s'écrit $V = I + O(\mathcal{O}^{(1)})$.

On a repris la notation de Helffer et Sjöstrand suivante: on dit que $A = O(\mathcal{O}^{(1)})$ si pour tout ε il existe $h(\varepsilon)$ tel que

$$|A_{\alpha, \beta}| \leq (d_{\alpha, \beta}^{(1)})^{1-\varepsilon} \text{ pour } h \leq h(\varepsilon), \text{ avec}$$

$$d_{\alpha, \beta}^{(1)} = \inf [d_V(\hat{\alpha}, \hat{\gamma}_1) + d_V(\hat{\gamma}_1, \hat{\gamma}_2) + \dots + d_V(\hat{\gamma}_{l-1}, \hat{\beta})].$$

$$l \geq 1, \gamma_1 \dots \gamma_{l-1} \in \mathbb{Z}^2$$

$$\alpha \neq \gamma_1 \neq \dots \neq \gamma_{l-1} \neq \beta$$

où, pour $\gamma \in \mathbb{Z}^2$, $\hat{\gamma} = \gamma_1 \nu_1 + \gamma_2 \nu_2$.

On introduit alors la base orthonormalisée des v_α :

$$e_\alpha = \sum_\beta v_\beta (V^{-\frac{1}{2}})_{\alpha, \beta}.$$

Le résultat de Carlsson, généralisé à B petit, mais non nul, permet de se ramener à l'étude d'une matrice infinie agissant sur $L^2(\mathbb{R}^2)$:

Théorème:

La matrice de $P_A(h)|_F$ dans la base des e_α est donnée par:

$$P_A|_F = \tilde{\lambda}(h)Id + w = \tilde{\lambda}(h)Id + \tilde{w} + O(\mathcal{O}(2)).$$

$$\text{avec } w_{\alpha,\beta} = ((P - \tilde{\lambda})e_\beta | e_\alpha)(1 - \delta_{\alpha,\beta})$$

$$\tilde{w}_{\alpha,\beta} = ((P - \tilde{\lambda})\varphi_\beta | \varphi_\alpha)(1 - \delta_{\alpha,\beta}).$$

$$|\tilde{\lambda}(h) - \lambda(h)| = \mathcal{O}(h^\infty).$$

(δ est le symbole de Kronecker.)

On peut lire sur W les invariances de P :

$$T^\alpha e_0 = e_\alpha, \text{ donc } w_{\alpha,\beta} = e^{ih'(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)/2} w_{\alpha-\beta,0}.$$

e_0 est vecteur propre de \mathcal{F} , donc $w_{r(\alpha),r(\beta)} = w_{\alpha,\beta}$.

On introduit alors la fonction $f(\alpha) = w_{\alpha,0}$. La dernière propriété écrite donne: $f \circ r = f$.

Comme de plus w est hermitienne, f est réelle. D'autre part, les inégalités d'Agmon permettent de montrer que f est à décroissance exponentielle: $|f(\alpha)| \leq e^{-|\alpha|/C}$ pour un certain $C > 0$.

On a donc montré:

Il existe une fonction f définie sur $\mathbb{Z}^2 \setminus 0$, réelle, à décroissance exponentielle, invariante par la rotation r , telle que

$$w_{\alpha,\beta} = e^{ih'(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)/2} f(\alpha - \beta).$$

On veut maintenant ramener l'étude de la matrice W à celle d'un opérateur pseudo-différentiel dont le symbole possède des symétries traduisant celles de w .

Remarquons tout d'abord que W est unitairement équivalente à la matrice \hat{w} définie par: $\hat{w}_{\alpha,\beta} = e^{ih'(\beta_1\beta_2 - \alpha_1\alpha_2)/2} w_{\alpha,\beta}$.

Cette matrice définit un opérateur sur $L^2(\mathbb{Z}^2)$:

$$\hat{w}u(\alpha) = \sum_\beta e^{-ih'(\alpha_1 + \beta_1)(\alpha_2 - \beta_2)/2} f(\alpha - \beta) u(\beta).$$

C' est un opérateur de convolution en la deuxième variable, qui par

transformée de Fourier est unitairement semblable à l'opérateur \tilde{w} défini sur $L^2(\mathbb{Z} \times [0, 2\pi])$ par:

$$\begin{aligned}\tilde{w}u(\alpha_1, \theta) &= \sum_{\beta} e^{-ih'(\alpha_1 + \beta_1)\beta_2/2} e^{i\beta_2\theta} f(\alpha_1 - \beta_1, \beta_2) u(\beta_1, \theta) \\ &= \sum_{\beta} f(\beta) e^{-ih'(2\alpha_1 - \beta_1)\beta_2/2} e^{i\beta_2\theta} u(\alpha_1 - \beta_1, \theta) \\ &= \sum_{\beta} e^{ih'\beta_1\beta_2/2} f(\beta) e^{-i\beta_2(h'\alpha_1 - \theta)} u(\alpha_1 - \beta_1, \theta)\end{aligned}$$

Cet opérateur a le même spectre que sa restriction à $\mathbb{Z} \times [0, h']$ et si on identifie $\mathbb{Z} \times [0, h']$ à \mathbb{R} par $x = h'\alpha_1 - \theta$, on trouve que w a le même spectre que l'opérateur w' agissant sur $L^2(\mathbb{R})$ par:

$$w'u(x) = \sum_{\beta} f(\beta) e^{ih'\beta_1\beta_2/2} e^{-i\beta_2x} u(x - h'\beta_1)$$

w' est le h' -quantifié de Weyl du symbole q , réel et 2π -périodique en x et ξ donné par:

$$(1) \quad q(x, \xi) = \sum_{(j, k) \in \mathbb{Z}^2} f(j, k) e^{-i(kx + j\xi)}$$

c'est-à-dire:

$$w'u(x) = (2\pi h')^{-1} \iint e^{i(x-y)\xi/h'} q((x+y)/2, \xi) u(y) dy d\xi$$

La propriété d'invariance de f par r se traduit par:

$$q(x, \xi) = q(\xi, \xi - x) = q \circ \rho^{-1}(x, \xi),$$

où ρ est la rotation de $\pi/3$ dans le repère $(0, \nu_1, \nu_3 = \kappa^2(\nu_1))$.

Sous l'hypothèse que, entre deux puits voisins, il existe une unique géodésique minimale pour la métrique d'Agmon $V(x)dx^2$, les résultats de [6] permettent de minorer l'effet tunnel entre les puits les plus proches:

$\forall \varepsilon > 0$, il existe $C_\varepsilon > 0$ tel que:

si $|(\alpha_1 - \beta_1)\nu_1 + (\alpha_2 - \beta_2)\nu_2| = |\nu_1|$, $|\tilde{w}_{\alpha, \beta}| > C_\varepsilon e^{-(D+\varepsilon)/h}$,
si $|(\alpha_1 - \beta_1)\nu_1 + (\alpha_2 - \beta_2)\nu_2| > |\nu_1|$, $|\tilde{w}_{\alpha, \beta}| < e^{-(D+\varepsilon_0)/h}$, pour un certain ε_0 .

D , qui dépend de V et B vérifie, pour $\sup(|B|)$ assez petit:

$$D > d_V(0, \nu_1), \quad D = d_V(0, \nu_1) + \mathcal{O}(|B|^2).$$

On obtient donc pour q , en séparant dans la somme (1) les termes correspondant aux interactions entre puits les plus proches, c'est-à-dire les termes en $\alpha = (\pm 1, 0)$, $(0, \pm 1)$, $(1, -1)$ et $(-1, 1)$:

$$q(x, \xi) = 2 f(1, 0) [q_0(x, \xi) + \tilde{q}(x, \xi)],$$

avec: $q_0(x, \xi) = \cos x + \cos \xi + \cos(x - \xi)$,

$$|\tilde{q}(x, \xi)| \leq e^{-\varepsilon_0/h} \text{ pour } |\operatorname{Im}(x, \xi)| \leq \varepsilon_0/h \text{ pour un certain } \varepsilon_0 > 0.$$

On a donc montré:

Théorème:

Il existe des constantes $h_0 > 0$, $C > 0$, C_1, C_2 avec $0 < C_1 < C_2$ telles que, pour $0 < h \leq h_0$:

$$\operatorname{Sp}(P_A(h)) \cap]-\infty, C_2 h] = \operatorname{Sp}[\tilde{\chi}(h) \operatorname{Id} + \operatorname{op}_h^{\mathbb{W}} q]$$

où $\tilde{\chi}(h) = C_1 h + \mathcal{O}(h^2)$, $q = e^{-a/h} [q_0 + \tilde{q}]$, avec $1/C < a < C$,

$$q_0(x, \xi) = \cos x + \cos \xi + \cos(x - \xi)$$

\tilde{q} est un symbole analytique, défini sur le domaine complexe $|\operatorname{Im}(x, \xi)| \leq 1/Ch$, vérifiant $|\tilde{q}(x, \xi)| \leq e^{-1/Ch}$ sur ce domaine.

De plus, \tilde{q} (et donc q) est réel sur le réel, 2π -périodique en x et ξ , et invariant par la rotation $\rho(x, \xi) = (x - \xi, x)$.

Ces invariances du symbole q sont très importantes, car elles se traduisent par l'existence d'opérateurs commutant avec $\operatorname{op}_h^{\mathbb{W}} q$, et de traiter certaines zones de spectre de cet opérateur comme nous venons de le faire pour l'équation de Schrödinger.

Références:

- [1] U. Carlson: An infinite number of wells in the semi-classical limit, preprint.
- [2] F.H. Claro et G.H. Wannier: Magnetic subband structure of electron in hexagonal lattices. Physical review B, volume 19, number 12 6068-6074.
- [3] D. Hofstadter: Energy level and wave functions for Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, Physical review B 14 (1976) 2239-2249.
- [4] B. Helffer et J. Sjöstrand: Multiple wells in the semi classical limit 1. Comm PDE, 9(4) (1984), 334-408.

- [5] B.Helffer et J.Sjöstrand: Multiple wells in the semi classical limit
2. Annales de l'IHP (section physique théorique), 49,n⁰2 (1985)
127-212.
- [6] B.Helffer et J.Sjöstrand: Effet tunnel pour l'équation de Schrödinger
avec champ magnétique, Annales Sc Ec Norm Sup, à paraître.
- [7] B.Helffer et J.Sjöstrand: Analyse semi classique pour l'équation de
Harper. Preprint (1987).
- [8] B.Helffer et J.Sjöstrand: Analyse semi classique pour l'équation de
Harper 2: comportement semi-classique près d'un rationnel.
Preprint.
- [9] B.Helffer et J.Sjöstrand: Semi classical analysis for Harper equation
3. Cantor structure of the spectrum. Mémoire de le SMF n⁰39.
Tome 117, fascicule 4 (1989).
- [10] M.Wilkinson: critical properties of electron eigenstates in
incommensurable system. Proc.R.Soc.London A391 (1984),
305-350.
- [11] M.Wilkinson: Von Neumann lattices of Wannier functions for Bloch
electrons in a magnetic field. Proc.R.Soc.London A403 (1986),
135-166.
- [12] M.Wilkinson: An exact effective Hamiltonian for a perturbed Landau
level. Journal of Phys.A, 20, n⁰7, 11 mai 1987, 1761-.
- [13] M.Wilkinson: An exact renormalisation group for Bloch electrons in a
magnetic field. Journal of Physics A, à paraître.