Journées Équations aux dérivées partielles

Bernard Helffer
Johannes Sjöstrand

Équation de Schrödinger avec champ magnétique et équation de Harper

Journées Équations aux dérivées partielles (1987), p. 1-9
<http://www.numdam.org/item?id=JEDP_1987____A6_0>

© Journées Équations aux dérivées partielles, 1987, 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/legal.php). 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 avec champ magnétique et équation de Harper.

par

B.Helffer et J.Sjöstrand

Dépt. de Mathématiques, Université de Nantes, 2,Chemin de la Houssinière, F-44072 Nantes, FRANCE

Dépt. de Mathématiques, Université de Paris Sud (et CNRS) F-91405 Orsay, FRANCE,

On s'intéresse ici à certains phénomènes quasipériodiques qui apparaissent en liaison avec l'équation de Schrödinger périodique en présence d'un champ magnétique périodique. Ces phénomènes sont bien connus des physiciens, mais peu de résultats ont été démontrés rigoureusement. Nous avons éte beaucoup inspirés d'une part par des travaux de M.Wilkinson [15-18] et moins directement par un travaux antérieur de Azbel [2], qui tentent une approche semiclassique, d'autre part par le travail numérique de Hofstadter [10]. La partie de cet exposé, qui ne se trouve pas déjà dans l'exposé [9] correspond en gros à la section 9 dans un travail qui existe maintenant sous forme de manuscrit.

Rappelons d'abord ce qui se passe pour l'équation de Schrödinger périodique sans champ magnétique:

(1) $P=-h^2\Delta+V(x)$, $V\in C^\infty(\mathbf{R}^2;\mathbf{R})$, $\tau_{\nu_j}V=V$, $j=1,2$,

où τ_{ν_j} designe translation par le vecteur $\nu_j=a_je_j$, $a_j>0$, $e_1=(1,0)$, $e_2=(0,1)$. Alors P commute avec les τ_{ν_j} et la théorie de Floquet permet d'affirmer que le spectre de P est une réunion de bandes qui peuvent se superposer. La j:ème bande est l'ensemble des $\lambda_j(\theta_1,\theta_2)$, pour $\theta\in\mathbf{T}^2$, où λ_j désigne la j:ème valeur propre de P_θ, qui par définition est la réalisation de P dans l'espace des fonctions u, localement dans L^2, qui vérifient la condition de Floquet; $\tau_{\nu_j} u=e^{i\theta_j} u$. On peut aussi dans certains cas étudier la largeur des bandes qui apparaissent dans la limite quand $h\to 0$. Plus précisement, la largeur d'une bande qui se trouve près du niveau d'énergie E_0 peut souvent être decrite en termes de la distance d'Agmon (-Jacobi) entre les "puits" les plus proches, où les puits par définition sont les composantes connexes de l'ensemble des $x\in\mathbf{R}^2$ tels que $V(x)\leq E_0$. Ainsi B.Simon [13] a obtenu un équivalent du logarithme de la largeur de la première bande (qui est exponentiellement petite), pendant que Outassourt [11] a obtenu des résultats plus précis aussi pour des bandes supérieures.

Considérons maintenant l'opérateur de Schrödinger magnétique,

(2) $P_A=-h^2\Delta_A+V(x)= \sum_{j=1,2} (hD_{x_j}-A_j(x))^2 +V(x),\ D_{x_j}=i^{-1}\partial/\partial_{x_j}$

où V est périodique comme ci-dessus, et $A_j\in C^\infty(\mathbf{R}^2,\mathbf{R})$. Le champ magnétique associé est alors donné par $B=dA$, où $A=A_1dx_1+A_2dx_2$. On suppose que B est periodique avec les mêmes périodes ν_j que V. Cette hypothèse s'exprime aussi par $A- \tau_{\nu_j}A=d\varphi_j$, et on montre alors que P_A commute avec les opérateurs unitaires,

(3) $T_j=e^{i\varphi_j/h}\,\tau_{\nu_j}$.

Cependant, T_1 et T_2 ne commutent pas toujours entre eux, car on a,

(4) $T_1T_2=e^{i\Phi/h}T_2T_1$, où $\Phi= \int_C B$, $C=[0,a_1]\times [0,a_2]$,

Si $\Phi/h=2\pi p$, $p\in\mathbf{Z}$, on peut appliquer la théorie de Floquet, et le spectre est de nouveau une réunion de bandes, dont on peut (sous des hypothèses convenables) étudier la largeur. (Plus généralement la théorie de Floquet marche encore si $\Phi/h=2\pi p/q$, $p,q\in\mathbf{Z}$, car dans ce cas les opérateurs T_1^q et

T_2 commutent, et on peut traiter P_A comme un opérateur périodique avec les périodes $q\nu_1$ et ν_2. Ce cas mène naturellement à l'étude de certaines matrices très intéressantes, que nous discuterons dans des exposés futurs.)

Pour traiter le cas général, on peut heureusement appliquer un travail récent de U.Carlsson [4], qui dans le cas A=0 donne une généralisation substantielle au cas d'un nombre infini de puits des résultats de [6,7]. Il se trouve que les résultats de Carlsson se généralisent très facilement au cas magnétique et que son resultat reste valable si V vérifie les mêmes hypothèses que dans son travail et si $A\in C^\infty$. Pour le voir, il suffit de remarquer que le Théorème 1.1 dans [8] donne des inégalités L^2 à poids dans le cas magnétique qui sont aussi bonnes que celles que l'on a dans le cas habituel. Dans notre cas particulier les hypothèses de cette extension (de routine) des résultats de Carlsson sont très largement satisfaites, si on fait les hypothèses supplémentaires cidessous. Pour pouvoir appliquer aussi les résultats de [8] on remplace P_A par P_{tA} avec $t>0$ petit, et on suppose,

(5) où bien (a) V et B sont analytiques et $0\leq t\leq \varepsilon_0$ où ε_0 est suffisamment petit, mais indépendant de h, ou bien (b) V et B sont C^∞ et $0\leq t\leq h^\delta$, pour un $\delta>1/2$.

Pour simplifier l'exposé on se concentre sur le fond du spectre et on suppose,

(6) $V\geq 0$ avec égalité exactement sur $\mathbf{Z}\nu_1\oplus\mathbf{Z}\nu_2$, et de plus $V''(0,0)$ est défini positif.

Les puits de potentiel sont alors $U_\alpha=\{(\alpha_1 a_1,\alpha_2 a_2)\}$, pour $\alpha\in\mathbf{Z}^2$. Soit $\eta>0$ petit, et soit $0\leq\theta_0\in C^\infty$ à support dans la boule de rayon η, vérifiant $\theta_0(0)>0$, et posons $P_\alpha=P+\sum_{\beta\neq\alpha}\theta_\beta= T_\alpha P_0 T_\alpha^{-1}$, où $T_\alpha=T_1^{\alpha_1}T_2^{\alpha_2}$, et où nous avons écrit P à la place de P_{tA}, et $\theta_\alpha=\tau_{\alpha_1\nu_1}+\alpha_1\nu_1\theta_0$. Alors ([8]) la première valeur propre $\mu_0=\mu_0(t,h)$ de P est simple et de la forme $C_t h+O(h^2)$ (et admet un développement asymptotique en puissances de h), avec $C_t>0$. Si μ_1 désigne la deuxième valeur propre de P on sait en plus que $2a(h)=\mu_1-\mu_0$ est du même ordre de grandeur que h (uniformement en t). Soit φ_0 une fonction propre normalisée associée à μ_0, et posons $\varphi_\alpha=T_\alpha\varphi_0$, de façon à avoir $(P_\alpha-\mu_0)\varphi_\alpha=0$. Alors $(P-\mu_0)\varphi_\alpha=r_\alpha=-\sum_{\beta\neq\alpha}\theta_\beta\varphi_\alpha=T_\alpha r_0$ (,avec $P=P_{tA}$). On sait aussi que $e^{(1-\varepsilon)d(U_0,x)/h}\varphi_0=O(e^{\varepsilon/h})$ dans $L^2(\mathbf{R}^2)$ pour tout $\varepsilon>0$ et de même pour $hd\varphi_0/i-t\varphi_0A$. Appliquant le travail de Carlsson, on trouve alors;

Théorème 1. Pour $h>0$ assez petit en fonction de η, θ_0, il existe $C>0$ tel que:

(i) $Sp(P)\cap]-\infty,\mu_0+a(h)]$ est contenu dans l'intervalle $[\mu_0+e^{-1/Ch},\mu_0-e^{-1/Ch}]$. Soit $\pi_F: L^2(\mathbf{R}^2)\to F$ le projecteur spectral associé à cette partie du spectre.

(ii) Les $v_\alpha=\pi_\alpha\varphi_\alpha$ forment une base hilbertienne dans F. Soit u_α la base othonormalisée: $u_\alpha=\sum(V^{-1/2})_{\alpha,\beta}v_\beta$, où $V=((v_\alpha|v_\beta))$.

(iii) Dans la base des u_α, la matrice de la restriction de P à F prend la forme $\mu I+W=\mu I+W'+O^*(D^{(2)})$, où $\mu-\mu_0$ est exponentiellement petit, $W'=((1-\delta_{\alpha,\beta})((\varphi_\alpha|r_\beta)+(r_\alpha|\varphi_\beta))/2)$, et δ designe le "δ" de Kronecker. Ici on dit que $A=(a_{\alpha,\beta})=O^*(D^{(1)})$, si pour $h>0$ assez petit :

$|a_{\alpha,\beta}|=O(1)e^{(\varepsilon(\eta)-(1-\varepsilon(\eta))\delta^{(1)}(\alpha,\beta))/h}$, avec $\varepsilon(\eta)\to0$, quand $\eta\to0$, ici on a posé $\delta^{(1)}(\alpha,\beta)=\min\{d_V(\alpha,\gamma_1)+d_V(\gamma_1,\gamma_2)+\ldots+d_V(\gamma_{l'-1},\beta)\ ;\ l'\geq1,$

$\alpha\neq\gamma_1\neq\gamma_2\neq\ldots\neq\beta\}$, et $d_V(\alpha,\beta)=d_V(U_\alpha,U_\beta)$ désigne la distance entre U_α et U_β pour la métrique Vdx^2.

On pose $d_1=d_V(U_0,U_{(1,0)})$, $d_2=d_V(U_0,U_{(0,1)})$ et on suppose que $d_1\leq d_2<d_V(U_0,U_\alpha)$, si $|\alpha|=|\alpha_1|+|\alpha_2|\geq 2$. Comme nous l'avons vû dans [8], il peut y avoir des annulations un peu inattendues de l'effet tunnel pour Schrödinger magnétique quand deux puits sont reliés par au moins deux géodesiques minimales. Pour éviter ce phénomène (intéressant en soi) on suppose,

(7) Entre (0,0) et (1,0) il passe une seule géodesique minimale (pour Vdx^2), qui en plus est non-dégénérée au sens explicité dans [6]. On fait la même hypothèse pour ((0,0),(0,1)).

Il résulte alors de l'analyse dans [8] que si $W=(w_{\alpha,\beta})$, alors pour tout $\varepsilon>0$, on a $C_\varepsilon^{-1}\exp(-d_1(t)/h-\varepsilon/h)\leq|w_{(1,0),(0,0)}|\leq C_\varepsilon\exp(-d_1(t)/h+\varepsilon/h)$ où $d_1(t)=d_1+O(t^2)\geq d_1$, et on a un encadrement analogue pour $w_{(0,1),(0,0)}$. (On a même des développements asymptotiques pour ces quantités.) Remarquons aussi que $W=O^*(D^{(1)})$.

Si on utilise l'invariance par les opérateurs T_α, on trouve avec $t\Phi/h=2\pi k-h'$, $k\in\mathbf{Z}$, $0\leq h'<2\pi$,

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

Comme W est hermitien, on a aussi,

(9) $f(-\alpha)=e^{ih'\alpha_1\alpha_2}\overline{f(\alpha)}$.

Si $h'=0$, on a dejà observé que l'on peut travailler directement avec la théorie de Floquet. Dans ce cas nous voyons de (8) que W est une convolution sur $\mathbf{Z}^2$ et le spectre de W est alors une bande donné par les valeurs de la fonction réelle $\sum f(\alpha)e^{i\theta\alpha}$. Dans cette somme, les termes avec $|\alpha|=1$ dominent, et on en déduit que la largeur de la bande est

$2(|f(1,0)|+|f(0,1)|)(1+O(e^{-\varepsilon/h}))$, pour un $\varepsilon>0$.

Supposons maintenant que $h'>0$. Conjugant W par la matrice unitaire; $\mathrm{diag}(e^{ih'\alpha_1\alpha_2})$ on obtient une nouvelle matrice que l'on notera désormais par W (et qui à le même spectre), donnée par,

(10) $\quad w_{\alpha,\beta}=e^{-ih'\alpha_1(\alpha_2-\beta_2)}f(\alpha-\beta)$,

qui est donc une convolution dans les variables α_2. On arrive alors à l'opérateur unitairement équivalent; $W':L^2(\mathbf{Z}\times S^1)\to L^2(\mathbf{Z}\times S^1)$, de la forme

(11) $\quad W'u(\alpha_1,\theta)=(K_\theta u(.,\theta))(\alpha_1)$,

où K_θ est donné par le "noyau",

(12) $\quad k(\alpha_1,\beta_1,\theta)=g(\alpha_1-\beta_1,\theta-h'\alpha_1)$,

où,

(13) $\quad g(\alpha_1,\theta)=\sum_{\alpha_2}f(\alpha)e^{i\theta\alpha_2}$.

Le spectre de W' est égal à celui de sa restriction à $\mathbf{Z}\times[0,h'[$, et par la substitution; $x=-(\theta-h'\alpha_1)$ on peut identifier cette restriction de W' à l'opérateur Q: $L^2(\mathbf{R})\to L^2(\mathbf{R})$, donné par

(14) $\quad Q=\sum_{k\in\mathbf{Z}}g(k,-x)\tau_{kh'}=\sum_{k\in\mathbf{Z}}g(k,-x)e^{-ikh'D}$.

A l'aide de (3.4) on trouve que Q est le h'-quantifié de Weyl du symbole réel,

(15) $\quad Q(x,\xi)=\sum\sum f(j,k)\, e^{-ijkh'/2}e^{i(kx+j\xi)}$,

c.à.d. que

(16) $\quad Qu(x)=\iint e^{i(x-y)\theta/h'}Q((x+y)/2,\theta)u(y)dyd\theta/2\pi$.

On suppose maintenant en plus, que V et B sont conservés par rotation de $\pi/2$, c.à.d. par l'appliquation $\boldsymbol{\kappa}$, donnée par $\boldsymbol{\kappa}(x_1,x_2)=(x_2,-x_1)$. On obtient alors,

(17) $\quad f(\alpha)=e^{ih'\alpha_1\alpha_2}f(\boldsymbol{\kappa}(\alpha))$,

ce qui donne avec (9) que $f(1,0)=f(0,-1)=f(-1,0)=f(0,-1)\in\mathbf{R}$. Au niveau des symboles on trouve alors

(18) $Q \circ \kappa = Q$.

A l'aide des estimations qu'on a trouvées pour W, on obtient aussi,

(19) $Q(x,\xi)=2f(1,0)(Q_0(x,\xi)+R(x,\xi))$,

où R est holomorphe et $= \mathcal{O}(e^{-1/C_0h})$ dans $|\mathrm{Im}(x,\xi)|\leq 1/C_0h$, pour un $C_0>0$ assez grand, et

(20) $Q_0(x,\xi)=\cos(\xi)+\cos(x)$.

Le h'-quantifié de Q_0 est alors $Q_0= \cos(h'D)+\cos x$, ce qui est une variante de l'opérateur de Harper. On peut aussi remarquer que le symbole Q est 2π-périodique en x et en ξ. Les points critiques de Q coïncident avec ceux de Q_0 (grâce à (18)) et on a les valeurs critiques $m_Q= Q(\pi,\pi)= -2+\mathcal{O}(e^{-1/C_0h})$, $M_Q= Q(0,0)= 2+\mathcal{O}(e^{-1/C_0h})$, $c_Q= Q(\pi,0)= Q(0,\pi)= \mathcal{O}(e^{-1/C_0h})$.Les surfaces d'énergie, Q=E dans les cas $E\in\{m_Q\}$, $]m_Q,c_Q[$, $\{c_Q\}$, $]c_Q,M_Q[$, $\{M_Q\}$, ont la même structure que celles de $Q_0=E'$ dans les cas correspondants (obtenues, en remplaçant m_Q, c_Q, M_Q par -2, 0, 2). En particulier, pour $E\in]c_Q,M_Q]$, la surface d'énergie ; Q=E , est la réunion des composantes connexes $U_\alpha=U_\alpha(E)$, où U_α est une courbe de Jordan qui entoure $2\pi\alpha$ si $\mu<M_Q$ et $U_\alpha=\{2\pi\alpha\}$ si $\mu=M_Q$. Pour $E\in[m_Q,c_Q[$, on a une situation analogue. Suivant Wilkinson, on peut donc considerer les U_α comme des puits microlocaux, et dans notre travail en préparation, déjà mentionné, nous avons démontré qu'on peut effectivement donner un traitement de Q , qui est analogue à celui que nous avons esquissé pour P_{tA}, à condition que h'>0 est suffisament petit et à condition que le paramêtre spectral évite un petit voisinage de c_Q. (Voir aussi l'exposé [9].) Dans le cas où $t\Phi/2\pi h$ est un nombre irrationnel, on obtient ainsi le

Théorème 2. On fixe $\varepsilon_0>0$. Il existe alors $C_0>0$, tel que si $2\pi h/t\Phi\in\mathbf{R}\backslash\mathbf{Q}$ admet le developpement en fractions continues: $\pm 1/(q_0\pm 1/(q_1\pm 1/(q_2\pm\ldots)))$, avec $q_j\in\mathbf{N}^*$, $1/h$, $q_j\geq C_0$, $j=1,2,\ldots$, on a:

Le plus petit intervalle fermé qui contient $K=(2f(1,0))^{-1}Sp((P-\mu)|_F)$ est de la forme $J=[-2+\mathcal{O}(e^{-1/C_0h}+1/q_1),2+\mathcal{O}(e^{-1/C_0h}+1/q_1)]$.

$K\cap J\subset\cup_{N_-\leq j\leq N_+}J_j$, où J_j sont des intervalles fermés de longeur $\neq 0$, avec $\partial J_j\subset K$. J_{j+1} se trouve à droite de J_j à une distance $\sim 1/q_1$. J_0 est de longeur $2\varepsilon_0+\mathcal{O}(1/q_1)$, contenant 0 à une distance $\mathcal{O}(1/q_1)$ de son centre. Les autres bandes sont de largeur $e^{-C(j)q_1}$, avec $C(j)\sim 1$. Pour $j\neq 0$, soit κ_j la fonction affine croissante, qui transforme J_j en $[-2,2]$. On a alors $\kappa_j(J_j)\cap K\subset\cup_k J_{j,k}$, où les $J_{j,k}$ ont les mêmes propriétés (avec q_1 remplacé par q_2) et.c.. Ici $a\sim b$ signifie que a/b et b/a sont majorés par une constante qui ne depend que de ε_0.

Références.

1.S.Aubry,C.André,Proc.Israel Phys.Soc.,ed.C.G.Kuper 3(Adam Hilger, Bristol, 1979), 133-.

2.M.Ya.Azbel, Energy spectrum of a conduction electron in a magnetic field, Zh.Eksp.Teor.Fiz.46,(1964),939-,Sov.Phys. JETP19,(1964),634-.

3.J.Bellisard,B.Simon,Cantor spectrum for the almost Mathieu equation, J. Funct.Anal.,48(3),408-419.

4.U.Carlsson, Travail en préparation.

5.B.Helffer,D.Robert,Puits de potentiel généralisés et asymptotique semi-classique, Ann. de l'IHP,41(3)(1984),291-331.

6.B.Helffer,J.Sjöstrand, Multiple wells in the semi-classical limit I. Comm. in PDE, 9(4)(1984),337-408.

7.B.Helffer,J.Sjöstrand,Puits mulptiples..II,Intéraction moléculaire, symétries, perturbation.Ann. de l'IHP,42(2)(1985),127-212.

8.B.Helffer,J.Sjöstrand, Effet tunnel pour l'équation de Schrödinger avec champ magnétique.Préprint de l'Ecole Polytechnique,Déc.1986.

9.B.Helffer,J.Sjöstrand, Analyse semi-classique pour l'équation de Harper, Sém. des E.D.P.,Ecole Polytechnique,Exposé n^{0}17,(24 Mars 1987).

10.D.R.Hofstadter,Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, Phys. Rev. B, 14(6),15Sept. 1976.

11.A.Outassourt, Comportement semi-classique pour l'opérateur de Schrödinger à potentiel périodique, J. of Func. Anal.,72(1)(1987),65-93.

12.B.Simon, Almost periodic Schrödinger operators. A review, Adv.Appl.Math. 3,(1982),463-490.

13.B.Simon, Semiclassical analysis of low lying eigenvalues III. Width of the ground state band in a strongly coupled solid, Ann. Phys.,158(2)(1984), 415-420.

14.J.Sokoloff, Unusual band structure, wave functions and electrical conductance in crystals with incommensurate periodic potentials, Physics reports (Review section of Physics letters), 126(4)(1985), 189-244.

15.M.Wilkinson, Critical properties of electron eigenstates in incommensurate systems, Proc.R.Soc.Lond., A 391,(1984),305-350.

16.M.Wilkinson, An example of phase holonomy in WKB theory, J. Phys. A, 17(1984),3459-3476.

17.M.Wilkinson, Von Neumann lattices of Wannier functions for Bloch electrons in a magnetic field, Proc. R. Soc. Lond., A 403,(1986),135-166.

18.M.Wilkinson, An exact renormalisation group for Bloch electrons in a magnetic field, J. Phys. A., à paraître.