

# SÉMINAIRE DE THÉORIE SPECTRALE ET GÉOMÉTRIE

BERNARD HELFFER

## Sur l'équation de Schrödinger avec champ magnétique

*Séminaire de Théorie spectrale et géométrie*, tome 5 (1986-1987), p. 159-164

[http://www.numdam.org/item?id=TSG\\_1986-1987\\_\\_5\\_\\_159\\_0](http://www.numdam.org/item?id=TSG_1986-1987__5__159_0)

© Séminaire de Théorie spectrale et géométrie (Chambéry-Grenoble), 1986-1987, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Séminaire de Théorie spectrale et géométrie » 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/>

## SUR L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER AVEC CHAMP MAGNÉTIQUE

par *Bernard HELFFER* (Université de Nantes)

On présente quelques résultats récents ([HE], [HE–SJ 3,4,5]) sur l'équation de Schrödinger avec champ magnétique dans un ouvert  $\Omega \subset \mathbf{R}^n$  et qui mettent en évidence le rôle spécifique de la circulation le long de chemins fermés du potentiel vecteur magnétique.

On s'intéresse ici à deux situations caractéristiques :

### Situation 1.

On considère dans un ouvert  $\Omega$  régulier de  $\mathbf{R}^n$  l'équation de Schrödinger avec un champ magnétique :

$$P_{A,V} = \sum_{j=1}^n (D_{x_j} - A_j)^2 + V$$

$$(1) \quad V \in C^\infty, \quad V \xrightarrow[|x| \rightarrow \infty]{} \infty, \quad A_j \in C^\infty$$

$\omega_A = \sum_{j=1}^n A_j dx_j$  désigne la 1-forme potentiel magnétique.

Le théorème suivant est une clarification d'un résultat essentiellement dû à Lavine et O'Carroll [LA–O'CA] :

**THÉORÈME 1** (cf. [HE], [LA–O'CA]). — *On suppose que  $\Omega$  est connexe et on désigne par  $\lambda_A^\Omega$  (resp.  $\lambda_0^\Omega$ ) la première valeur propre de la réalisation de Dirichlet de  $P_{A,V}$  (resp.  $P_{0,V}$ ). Les propriétés suivantes sont équivalentes :*

- (i)  $\lambda_A^\Omega = \lambda_0^\Omega$
- (ii) (a)  $d\omega_A = 0$ .

(b) Pour tout chemin fermé  $\gamma$  dans  $\Omega$ ,  $\frac{1}{2\pi} \int_{\gamma} \omega_A \in \mathbf{Z}$ .

Esquisons la démonstration de (i)  $\Rightarrow$  (ii). On part de l'identité suivante de [LA-O'CA].

$$(*) \quad \|(\nabla - iA - (\nabla u_0/u_0))\varphi\|^2 = \langle P_{A,V}\varphi, \varphi \rangle - \lambda_0^\Omega \|\varphi\|^2 \quad \forall \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$$

où  $u_0$  désigne la première fonction propre positive, de norme 1, de  $P_{0,V}^\Omega$ .

(\*) montre immédiatement par le principe du minimax :  $\lambda_A^\Omega - \lambda_0^\Omega \geq 0$  qui résulte aussi de l'inégalité de Kato. Si  $u_A$  est un vecteur propre normalisé de  $P_A^\Omega$ , on peut trouver une suite  $\varphi_n \in C_0^\infty(\Omega)$  telle que

$$\langle P_{A,V}\varphi_n, \varphi_n \rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \lambda_A^\Omega$$

$$\|\varphi_n\| = 1$$

$$\varphi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} u_A \text{ dans } L^2.$$

On obtient ainsi l'égalité :

$$(\nabla - iA - \nabla u_0/u_0)u_A = 0 \text{ dans } \mathcal{D}'$$

qui permet de montrer (ii).

Compte-tenu du théorème 1, il est intéressant de mesurer plus précisément  $\lambda_A^\Omega - \lambda_0^\Omega$  lorsque (ii)(a) est vérifiée, mais pas (ii)(b).

On a proposé dans [HE] un modèle où ce calcul est possible dans un cadre semi-classique (modèle qui a des liens étroits avec l'effet de Aharonov-Bohm [AH-BO]).

On prend comme ouvert  $\Omega : \mathbf{R}^2 \setminus B(0, \delta)$  ( $\delta > 0$ ) et on considère un opérateur dépendant du paramètre  $h \in ]0, h_0]$  :

$$P_{A,V}(h) = \sum_{j=1}^n (hD_{x_j} - A_j)^2 + V.$$

On suppose outre (1) que

$$(2) \quad d\omega_A = 0 \text{ dans } \Omega$$

(3)  $V$  admet un unique minimum non dégénéré dans  $\Omega$  au point  $y = (1, 0)$  avec  $V(y) = 0$ .

Rappelons que la métrique d'Agmon  $Vdx^2$  munit  $\bar{\Omega}$  d'une distance  $d_V$  et on introduit :

$$(4) \quad S_0 = d_V(y, \partial\Omega)$$

$$(5) \quad S_1 = \inf_{\gamma \in \Gamma} (\text{longueur}(\gamma))$$

où  $\Gamma$  est l'ensemble des chemins fermés passant par  $y$  dans  $\Omega$  non homotopes à 0 et longueur ( $\gamma$ ) est calculée pour la distance d'Agmon.

L'hypothèse importante est maintenant :

$$(6) \quad S_1 < 2S_0$$

qui assure que  $V$  crée une barrière suffisamment grande entre  $y$  et  $\partial\Omega$ . Sous quelques hypothèses supplémentaires techniques que nous omettons, on obtient alors le

THÉORÈME 2. — Avec (1), (2), (3), (6), on a

$$(7) \quad \lambda_A^\Omega(h) - \lambda_0^\Omega(h) = h^{1/2} \left[ 1 - \cos \frac{\Phi}{h} \right] a(h) \cdot e^{-S_1/h} + O(e^{-(S_1+\varepsilon_0)/h})$$

où  $a(h) \sim \sum_j a_j h^j$ ,  $a_0 > 0$ ,  $\varepsilon_0 > 0$

$$(8) \quad \Phi = \int_{\gamma_0} \omega_A \quad (\gamma_0 \text{ est un chemin entourant } B(0, \delta)) .$$

On mesure ainsi quantitativement le fait que  $\Phi/2\pi h \notin \mathbf{Z}$ . Les techniques de démonstration sont très voisines de celles développées dans [HE-SJ 1], [OU] et sont données dans [HE]. On compare avec un problème défini sur le revêtement de  $\Omega$ .

### Situation 2.

On considère l'équation de Schrödinger avec champ magnétique et potentiel périodique. On suppose donc au lieu de (1) que l'on travaille avec  $\Omega = \mathbf{R}^2$  et que :

$$(9) \quad \begin{cases} V(x_1 + a_1, x_2) = V(x_1, x_2) \\ V(x_1, x_2 + a_2) = V(x_1, x_2) \end{cases}$$

$$(10) \quad \begin{cases} \text{Avec } B(x_1, x_2) \text{ défini par } d\omega_A = B dx_1 \wedge dx_2 \\ B(x_1 + a_1, x_2) = B(x_1, x_2) \\ B(x_1, x_2 + a_2) = B(x_1, x_2) \end{cases}$$

On s'intéresse à l'étude du spectre de l'opérateur :

$$P_{tA,V}(h) = \sum_j (hD_{x_j} - tA_j)^2 + V(x)$$

où  $V$  est supposé n'avoir qu'un minimum non dégénéré par cellule (par exemple, aux points  $(\alpha_1 a_1, \alpha_2 a_2)$ ,  $\alpha \in \mathbf{Z}^2$ ),  $V(\alpha_1 a_1, \alpha_2 a_2) = 0$  et  $h \in ]0, h_0]$ ,  $t \in ]-t_0, t_0[$ .

Dans le cas où  $t = 0$ , il est bien connu par la théorie de Floquet [RE-SI] que le spectre est constitué de bandes (se recouvrant éventuellement), et les travaux

de Simon [SI], Outassourt [OU] permettent de montrer que près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique.

$$-h^2 \Delta_y + \frac{1}{2}(V''(0)y, y)$$

le spectre est constitué d'une première bande dont la largeur est donnée comme en (7) par une expression du type

$$(11) \quad \begin{cases} h^{1/2} a(h) e^{-S/h} \\ \text{où } S = \inf_{\alpha \in \mathbb{Z}^2 \setminus (0,0)} d_V[\alpha a, 0] . \end{cases}$$

Dès que  $t \neq 0$ , la situation apparaît beaucoup plus compliquée.

On peut tenter d'appliquer la théorie de Floquet en cherchant un substitut aux opérateurs de translations  $\tau_1$  et  $\tau_2$  :

$$(\tau_1 u)(x) = u(x_1 - a_1, x_2), \quad (\tau_2 u)(x) = u(x_1, x_2 - a_2),$$

qui commutent avec  $P_{0,V}$  et qui permettaient de réduire le problème à l'intégrale hilbertienne de problème  $P_{0,V}^{\mathcal{O}}(h)$  ( $\mathcal{O} \in [0, 2\pi]^2$ ) défini par :

$$u \longrightarrow P_{0,V}^{\mathcal{O}}(h)u = P_{0,V}(h)u$$

pour  $u \in D(P_{0,V}^{\mathcal{O}}) = \{u \in H_{\text{loc}}^2, (T_j u) = e^{i\mathcal{O}j} u, j = 1, 2\}$ .

On trouve, certes, deux opérateurs unitaires  $T_1$  et  $T_2$  de la forme :

$$T_j = e^{it\varphi_j/h} \cdot \tau_j \quad (j = 1, 2)$$

qui commutent avec  $P_{tA,V}(h)$ , mais, si  $\tau_1$  commutait avec  $\tau_2$ , on a cette fois-ci :

$$T_1 T_2 = e^{it\Phi/h} T_2 T_1$$

où  $\Phi$  est le flux de  $(d\omega_A)$  à travers une cellule de base.

Le spectre de  $P_{tA,V}(h)$  près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique en fond de puits (donné ici par

$$(hD_{y_1} - \frac{t}{2}B(0,0)y_2)^2 + (hD_{y_2} + \frac{t}{2}B(0,0)y_1)^2 + \frac{1}{2}(V''(0)y, y)$$

dépend de manière essentielle des propriétés arithmétiques de  $t\Phi/h$ . Si  $t\Phi/h = 2k\pi$  ( $k \in \mathbb{Z}$ ), on est (modulo l'étude faite dans [HE-SJ 2]) dans la situation étudiée par B. Simon [SI] et A. Outassourt [OU] : près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique, on a une bande dont on peut mesurer asymptotiquement la largeur.

Si  $t\Phi/h = 2\pi p/q$  ( $p$  et  $q$  entiers), on peut adapter l'approche précédente en remarquant que  $T_1^q T_2 = T_2 T_1^q$ . La cellule de base devient  $[-\frac{a_1}{2}, q \cdot \frac{a_1}{2}] \times [-\frac{a_2}{2}, \frac{a_2}{2}]$  et on se ramène à l'étude d'une famille de problèmes sur le tore  $\mathbb{T}^2$  pour une équation de Schrödinger à  $q$  puits, encore étudiable avec les techniques de [HE-SJ 1].

Si on ajoute les symétries :

$$(12) \quad V(x_1, x_2) = V(-x_2, x_1), \quad B(+x_1, x_2) = B(-x_2, x_1),$$

les  $q$  premières valeurs propres du problème de Floquet :

$$u \longrightarrow P_{tA,V}^{\mathcal{O}}(h)u = P_{tA,V}(h)u$$

pour  $u \in D(P_{tA,V}^{\mathcal{O}}(h)) = \{u \in H_{\text{loc}}^2, T_1^q u = e^{iq\mathcal{O}_1} u, T_2 u = e^{i\mathcal{O}_2} u\}$  sont toutes proches de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique et données modulo  $0(e^{-(S+\varepsilon_0)/h})$  par celles d'une matrice  $q \times q$  de la forme

$$(13) \quad \mathcal{M}(h, \mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2) \cong \mu(h)I + a(h).M_{p,q}(\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2).e^{-S/h} + 0(e^{-(s+\varepsilon_0)/h})$$

avec

$$(14) \quad M_{p,q}(\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2) = e^{i\mathcal{O}_1} J + e^{-i\mathcal{O}_1} J^* + e^{i\mathcal{O}_2} K + e^{-i\mathcal{O}_2} K^*$$

$$\text{avec } J = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ O & O & 1 \\ 1 & O & 0 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} 1 & O \\ O & \omega_{p,q} \\ O & \omega_{p,q}^{q-1} \end{pmatrix}, \quad \omega_{p,q} = e^{2i\pi p/q}.$$

Le spectre près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique est décrit par les bandes parcourues par les valeurs propres  $\lambda_j(h, \mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2)$  de  $\mathcal{M}(h, \mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2)$  ( $j = 1, \dots, q$ ) en faisant varier  $(\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2)$ .

On est en particulier amené à utiliser le fait que les ensembles décrits par les valeurs propres  $\lambda_j(\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2)$  de la matrice  $M_{p,q}(\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2)$  peuvent être également obtenus comme la réunion sur  $\mathcal{O}$  des spectres de l'équation de Harper  $H_{\mathcal{O}}$  :

$$(15) \quad l_2(\mathcal{Z}) \ni (u_n)_n \longrightarrow \frac{1}{2}(u_{n+1} + u_{n-1}) + \cos[\alpha n + \mathcal{O}]u_n$$

avec  $\alpha = t\Phi/h$ .

Dans le cas où  $t\Phi/h$  est irrationnel, l'approche précédente ne marche plus, mais, par une technique où on considère plus directement un problème à une infinité de puits (cf. Carlson [CA]), on trouve que le spectre près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique est donné par une matrice infinie opérant sur  $l^2(\mathcal{Z}^2)$  dont le spectre est de nature très proche de la réunion des spectres de  $H_{\mathcal{O}}$ .

Cette étude est menée dans ce travail en préparation avec J. Sjöstrand [HE-SJ 3] dont on trouvera des présentations dans [HE-SJ 4,5] et qui justifie des travaux de Physiciens (en particulier, Azbel [AZ] et M. Wilkinson [WI]). Elle met en évidence la nature cantorienne du spectre dans ce cas (en liaison avec des travaux heuristiques de Hofstadter [HOF]). Les démonstrations s'appuient sur l'étude semi-classique de l'opérateur pseudodifférentiel  $(\cos \alpha D_x + \cos x)$  lorsque  $\alpha \rightarrow 0$ . Nous sommes encore loin d'avoir élucidé complètement la nature du spectre pour toutes les valeurs de  $\alpha = t\Phi/h$  (cf. l'article de Bellissard-Simon [BE-SI]).

## Références

- [AH-BO] AHARONOV — BOHM. — *Significance of Electromagnetic Potentials in the quantum theory*, Phys. Rev., vol. 115, 3, 1959.
- [AZ] YA AZBEL. — *Energy spectrum of a conduction electron in a magnetic field*, Soviet Phys. JETP, vol. 19, 3, 1964.
- [BE-SI] J. BELLISSARD, B. SIMON. — *Cantor Spectrum for the Almost Mathieu Equation*, J. Funct. Anal., vol. 48, 3, 1982.
- [CA] U. CARLSSON. — *Travail en préparation*.
- [HE] B. HELFFER. — *Sur l'équation de Schrödinger avec champ magnétique*, Exposé n° 10 au Séminaire EDP de l'Ecole polytechnique, 86-87.
- [HE-SJ 1] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Multiple wells in the semi-classical limit I*, Comm. Partial Differential Equations, 9, 4 (1984), 337-408.
- [HE-SJ 2] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Effet tunnel pour l'équation de Schrödinger avec champ magnétique*, Preprint de l'Ecole polytechnique, 1986.
- [HE-SJ 3] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *en préparation*.
- [HE-SJ 4] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Analyse semi-classique de l'équation de Harper*, Séminaire EDP de l'Ecole polytechnique, exposé 10, 86-87.
- [HE-SJ 5] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Proceedings du colloque de St-Jean-de-Monts, Juin, 1987*.
- [HO] D. HOFSTADTER. — *Energy Levels and Wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*, Phys. Rev. B, 1 (1976), 2239-2249.
- [LA-O'CA] R. LAVINE ET M.O'CARROLL. — *Ground state properties and lower bounds on energy levels of a particle in a uniform magnetic field and external potential*, J. Math. Phys., 18 (1977), 1908-1912.
- [OU] A. OUTASSOURT. — *Analyse semi-classique pour des opérateurs de Schrödinger avec potentiel périodique*, J. Funct. Anal., vol. 72, 1, 1987.
- [RE-SI] M. REED, B. SIMON. — *Methods of modern Mathematical Physics*, Academic Press, 1979.
- [SI] B. SIMON. — *Semi-classical Analysis of low lying eigenvalues III, Width of the ground state band in strongly coupled solids*, Ann Physics, 158 (1984), 415-420.
- [WI 1] M. WILKINSON. — *Critical properties of electron eigenstates in incommensurate systems*, Proc. Roy. Soc. London Ser. A, 391 (1984), 305-350.
- [WI 2] M. WILKINSON. — *An example of phase holonomy in WKB theory*, J. Phys. A, 17 (1984), 3459-3476.
- [WI 3] M. WILKINSON. — *Von Neumann lattices of Wannier functions for Bloch electrons in a magnetic field*, Proc. Roy. Soc. London Ser. A, 403 (1986), 135-166.
- [WI 4] M. WILKINSON. — *An exact Effective Hamiltonian for A perturbed Landau Level*, à paraître au J. Phys. A, .
- [WI 5] M. WILKINSON. — *An exact renormalisation Group for Bloch Electrons in a Magnetic fields*, à paraître au J. Phys. A, .