Séminaire de Théorie spectrale et géométrie

CHRISTIAN GÉRARD

Théorie des résonances pour des opérateurs de Schrödinger périodiques

Séminaire de Théorie spectrale et géométrie, tome 7 (1988-1989), p. 25-30
<http://www.numdam.org/item?id=TSG_1988-1989__7__25_0>

Séminaire de théorie spectrale et géométrie
CHAMBÉRY-GRENOBLE
1988–1989 (25–30)

THÉORIE DES RÉSONANCES POUR DES OPÉRATEURS DE SCHRÖDINGER PÉRIODIQUES

par *Christian GÉRARD*

I. Introduction

On s'intéresse dans ce travail aux propriétés analytiques de la résolvante $R(\lambda) = (H - \lambda)^{-1}$ pour des opérateurs de Schrödinger périodiques $H = -\Delta + V(x)$ sur R^n, où V est un potentiel local et T-périodique pour un certain réseau T de R^n.

L'existence et les propriétés du prolongement de $R(\lambda)$ sont importantes quand on s'intéresse au problème de la diffusion par des impuretés dans un cristal. Des impuretés localisées ou en faible concentration sont modélisées par un potentiel W à décroissance exponentielle.

En physique des solides, on s'intéresse aux singularités de $R'(\lambda) = (H+W-\lambda)^{-1}$ pour des énergies λ complexes. Les pôles réels de $R'(\lambda)$ situés entre les bandes sont des valeurs propres (responsables de la couleur de certains cristaux), les pôles complexes obtenus par prolongement à travers les bandes s'interprètent comme des résonances associées à des "quasiparticules". L'analogie avec les Hamiltoniens à deux corps est très grande, en particulier la densité d'états joue un rôle analogue à la phase de diffusion dans le scattering usuel.

II. Résultats

On considère un Hamiltonien de Schrödinger $H = -\Delta + V(x)$, où V est un potentiel local qui est Δ borné avec borne relative strictement inférieure à 1, et T périodique pour un réseau T de R^n.

II.1. Résultats généraux.

On s'intéresse aux deux problèmes suivants :

i) **problème d'extension locale** : pour un $\lambda_0 \in \sigma(H)$, étendre analytiquement $(H-\lambda)^{-1}$ dans un petit voisinage de λ_0 et décrire ses singularités.

ii) **problème d'extension globale** : étendre analytiquement $(H-\lambda)^{-1}$ à un ouvert donné de C et décrire ses singularités.

Les singularités sont différentes dans les deux problèmes.

Le résultat principal est le suivant :

THÉORÈME 1. — *Pour tout ouvert borné U de C, il existe un ensemble fini Γ de points de U, (appelés singularités de van Hove en physique des solides), et un fermé Γ_∞ de mesure nulle ne rencontrant pas Γ, tels qu'on ait les résultats suivants :*

i) problème d'extension locale : pour tout point λ_0 de $\sigma(H)$, il existe un voisinage V de λ_0 dans U tel que $(H-\lambda)^{-1}$ se prolonge holomorphiquement sur le revêtement universel $(V\backslash\Gamma)^*$ de $V\backslash\Gamma$ comme opérateur borné entre $L^2_a(R^n)$ et $H^2_{-a}(R^n)$ pour un $a>0$, arbitrairement petit.

ii) problème d'extension globale : $(H-\lambda)^{-1}$ se prolonge holomorphiquement sur le revêtement universel $(U\backslash\Gamma\cup\Gamma_\infty)^*$ de $U\backslash\Gamma\cup\Gamma_\infty$ comme opérateur borné entre $L^2_a(R^n)$ et $H^2_{-a}(R^n)$ pour un $a>0$, arbitrairement petit.

Ici $L^2_a(R^n)=\{u \mid ue^{a\langle x\rangle}\in L^2(R^n)\}$, et $H^2_{-a}(R^n)=\{u\mid ue^{-a\langle x\rangle}\in H^2(R^n)\}$. Les singularités de van Hove ont une interprétation géométrique qui les relient aux singularités des surfaces de Fermi : pour étudier un opérateur de Schrödinger périodique, on introduit classiquement la famille des opérateurs réduits de Floquet-Bloch : $H_p=(D_x+p)^2+V(x)$ sur $L^2(F_T)$, où F_T est une cellule fondamentale du réseau T . Le domaine de H_p est ici $H^2(F_T)$, où on munit F_T de sa structure de variété qui en fait un tore T^n. Le paramètre de Floquet p varie dans une cellule fondamentale F_{T^*} du réseau dual de T.

On introduit alors la **surface de Fermi** S_λ pour $\lambda\in R$: S_λ est l'ensemble des p tels que λ est une valeur propre de H_p. S_λ joue le rôle de la surface d'énergie $\xi^2+V(x)=\lambda$ et peut être considérée comme l'espace de configuration dans lequel se déplacent les électrons de Bloch. La **variété de Bloch** S est l'ensemble $\{(p,\lambda)|p\in S_\lambda\}$. La variété de Bloch s'étend à des énergies et des paramètres de Floquet complexes comme un ensemble analytique complexe.

Alors les singularités de van Hove sont les $\lambda\in U$ tels que S_λ n'est pas une union de sous variétés lisses de C^n (au sens que les fibres de la projection sur λ ne sont pas transverses à une des strates de la variété de Bloch). Une question intéressante est de savoir s'il existe des singularités de van Hove non réelles.

L'ensemble Γ_∞ correspond à des points où une composante de la surface de Fermi est tangente à une surface de niveau de $(Imp)^2$. Γ_∞ joue le rôle d'un spectre essentiel complexe et correspond à une frontière naturelle pour l'extension de $(H-\lambda)^{-1}$ entre des espaces L^2 à poids. On peut montrer d'autre part que Γ_∞ est inclus dans un ensemble sous analytique de mesure nulle.

On s'intéresse maintenant aux singularités de la résolvante au voisinage d'une singularité de van Hove. En utilisant des techniques de géométrie analytique, on peut démontrer que $(H - \lambda)^{-1}$ est une fonction de **détermination finie** près de toute singularités de van Hove. Sous des hypothèses supplémentaires sur la variété de Bloch, $(H - \lambda)^{-1}$ est à **croissance modérée** près des singularités de van Hove.

On peut résumer ce résultat en disant que $(H - \lambda)^{-1}$ est une fonction de classe de **Nilsson**. Ce résultat est toujours vrai sans hypothèses géométriques dans le cas d'un opérateur de Schrödinger discret sur Z^n. En effet, dans ce cas la variété de Bloch est une variété algébrique, et on peut utiliser le résultat originel de Nilsson [Ni].

II.2. Développements asymptotiques.

Sous des hypothèses plus fortes, on peut donner un développement asymptotique de $(H - \lambda)^{-1}$ au voisinage d'un point λ_0 de Γ (voir [Ge 1]). On montre en utilisant des résultats de Leray et Pham que les singularités de van Hove dans ces cas ne sont que du type $(\lambda - \lambda_0)^{\alpha/2}$ ou $(\lambda - \lambda_0)^\alpha \log(\lambda - \lambda_0)$ pour $\alpha \in Z$, et que la partie principale de $(H - \lambda)^{-1}$ en λ_0 et un opérateur de rang fini.

III. Applications

On donne maintenant quelques applications de ces résultats.

III.1. Lien avec la structure de bandes.

La première application concerne le lien entre les singularités de van Hove et la structure de bandes du spectre de H . Rappelons d'abord quelques définitions. Si on note $E_i(p)$, pour $i \in N$ les valeurs propres du Hamiltonien réduit H_p, on appelle n-ième bande de $\sigma(H)$ l'ensemble $B_n = \{E_n(p)\ ,\ p \in F_{T^*}\}$. Les B_n ne sont pas les composantes connexes de $\sigma(H)$ (les bandes physiques), mais sont plus significatives.

On dira que B_n est **simple** si $B_n \cap B_m = \emptyset$, $\forall n \neq m$.

On dira que B_n et B_m **s'intersectent effectivement** si $\exists p \in F_{T^*}$ tel que $E_n(p) = E_m(p)$.

On dira que B_n et B_m **s'intersectent artificiellement** si $B_n \cap B_m \neq \emptyset$ mais $E_n(p) \neq E_m(p)$, $\forall p \in F_{T^*}$. Si B_n est simple ou n'intersecte qu'artificiellement d'autres bandes, on sait que $E_n(p)$ est holomorphe dans un petit voisinage de F_{T^*}.

On dira que $\lambda_0 \in B_n$ est une **énergie critique** si λ_0 est une valeur critique de $E_n(p)$.

On a alors le résultat suivant :

THÉORÈME 4. — *Soit B_n une bande simple, alors :*

i) $\Gamma \cap B_n$ est l'ensemble des énergies critiques dans B_n noté Γ_n.

ii) si λ_0 est une énergie critique non dégénérée, associée à un unique point critique dans F_{T^*}, λ_0 est une vraie singularité de $(H-\lambda)^{-1}$.

Si B_n et B_m s'intersectent artificiellement, $\Gamma \cap (B_n \cup B_m) = \Gamma_n \cup \Gamma_m$.

Remarque 1. — On peut calculer la singularité de $(H-\lambda)^{-1}$ dans le cas *ii)* à l'aide du Théorème 3 et montrer qu'elle est du type $\log(\lambda-\lambda_0)$ en dimension 2 et $(\lambda-\lambda_0)^{1/2}$ en dimension 3, c'est-à-dire l'analogue exact de la singularité en 0 d'un opérateur de Schrödinger à deux corps. Dans le cas le plus simple d'intersection effective (qui se produit génériquement pour des valeurs isolées du paramètre de Floquet p en dimension 3) on peut vérifier que l'intersection des bandes ne crée pas de singularités sur la résolvante.

III.2. La densité d'états.

On s'intéresse aux propriétés de la densité d'états de H, qui est définie de la façon suivante : $\sigma(\lambda) = \partial_\lambda \rho(\lambda)$, où $\rho(\lambda)$ est la densité d'états intégrée définie par : $\rho(]-\infty,\lambda]) = 2/\mu_T \mathrm{Tr}(X_T E_{]-\infty,\lambda]})$, et E_Ω est la projection spectrale sur Ω, et μ_T la mesure de la cellule fondamentale de V et X_T la fonction caractéristique de F_T . (On utilise ici l'invariance par translation de H). $\rho(\lambda)$ joue un rôle analogue à la fonction de comptage dans le cas du spectre discret et à la phase de diffusion dans les problèmes à deux corps. On a le résultat suivant :

THÉORÈME 5. — *On suppose que $n=2$ ou 3 et que $\partial_i V$ et $\partial^2_{ij} V$ sont bornés de $H^2(R^n)$ dans $L^2(R^n)$. Alors la densité d'états $\sigma(\lambda)$ est analytique en dehors des singularités de van Hove réelles.*

III.3. Perturbations par des impuretés localisées.

On s'intéresse maintenant à définir les résonances engendrées par des impuretés. L'effet d'impuretés localisées est décrit par un potentiel réel W à décroissance exponentielle. Cette hypothèse est en fait assez réaliste, car les potentiels créés par des impuretés (a priori Coulombiens) sont amortis exponentiellement par un effet d'écran du aux électrons du cristal (voir [Ca]).

On considère donc un potentiel local W tel que $\exists \alpha > 0$ tel que $e^{\alpha\langle x \rangle} W(-\Delta+i)^{-1}$ soit compact, et on note H_i le Hamiltonien $-\Delta + V(x) + W(x)$ de domaine $H^2(R^n)$. On a le résultat suivant :

THÉORÈME 6. — *Soit U un ouvert borné de C. Alors on a les résultats suivants :*

i) problème d'extension locale : pour tout point λ_0 de $\sigma(H)$, il existe un voisinage V de λ_0 dans U tel que $(H-\lambda)^{-1}$ se prolonge méromorphiquement *sur le revêtement* *universel* $(V\backslash\Gamma)^*$ *de* $V\backslash\Gamma$ *comme opérateur borné entre* $L^2_a(R^n)$ *et* $H^2_{-a}(R^n)$ *pour un* $a > 0$, *arbitrairement petit.*

ii) problème d'extension globale : $(H - \lambda)^{-1}$ *se prolonge* **méromorphiquement** *sur le revêtement universel* $(U\backslash\Gamma \cup \Gamma_\infty)^*$ *de* $U\backslash\Gamma \cup \Gamma_\infty$ *comme opérateur borné entre* $L^2_a(R^n)$ *et* $H^2_{-a}(R^n)$ *pour un* $a > 0$, *arbitrairement petit.*

Les pôles de $(H - \lambda)^{-1}$ *sur* $(V\backslash\Gamma)^*$ *et sur* $(U\backslash\Gamma \cup \Gamma_\infty)^*$ *ont des résidus de rang fini et sans points d'accumulation en dehors de* $\Gamma \cup \Gamma_\infty$.

Les pôles de $(H_i - \lambda)^{-1}$ sont appelés **résonances** de H_i.

Par des arguments standard, on peut montrer que $\sigma_{sing}(H_i) = \emptyset$, et que les valeurs propres de H_i ne peuvent s'accumuler qu'aux singularités de van Hove réelles.

Dans le cas considéré dans la remarque 1, on peut montrer que le nombre de résonances sur chaque feuille de la surface de Riemann locale près de $\lambda_0 \in \Gamma$ est fini.

Bibliographie

[Ca] CALLAWAY J. — *Quantum theory of the solid state*, Academic Press, 1974.

[F-K] FUKUDA T., KOBAYASHI T. — *A local isotopy lemma*, Tolyo J. Math., 5 (1) (1982), 31–36.

[Ge 1] GÉRARD C. — *Resonance theory for periodic Schrödinger operators*, preprint.

[Ge 2] GÉRARD C. — *Resonance theory in atom-surface scattering*, To appear in Comm. in Math. Phys..

[K] KOBAYASHI T. — *On the singularities of the solution to the Cauchy problem with singular data in the complex domain*, Math. Ann., 269 (1984), 217–234.

[Me] MERCIER D.J. — *Théorèmes de régularité de type Nilsson*, Thèse de doctorat de l'Université de Nice, 1984.

[Ni] NILSSON N. — *Some growth and ramification properties of certains integrals on algebraic manifolds*, Arkiv för Math., 5(32) (1964), 463–476.

[Ph] PHAM F. — *Introduction à l'étude topologique des singularités de Landau*, Mémorial des sciences mathématiques n° 164, Gauthier-Villars, Paris, 1967.

[Sk] SKRIGANOV M.M. — *Geometric and arithmetic methods in the spectral theory of multidimensional periodic operators*, Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics n° 2, 1987.

[Va] VAILLANT J. — *Ramification d'intégrales holomorphes*, J. Math. Pures et Appl., 65 (1986), 343–402.

Christian GÉRARD
Centre de Mathématiques
Ecole Polytechnique
91128 PALAISEAU Cedex (France)