Journées Équations aux dérivées partielles

Francis Nier

Formulation variationnelle de systèmes Schrödinger-Poisson en dimension $d \leq 3$

Journées Équations aux dérivées partielles (1992), p. 1-10
<http://www.numdam.org/item?id=JEDP_1992____A18_0>

Formulation Variationnelle de Systèmes Schrödinger-Poisson en Dimension $d \leq 3$

Francis Nier *

Résumé - *On présente ici quelques résultats obtenus pour des systèmes Schrödinger-Poisson non-linéaires. Ces systèmes modélisent l'équilibre thermodynamique et électrostatique de gaz d'électrons dans des dispositifs électroniques quantiques. On propose une formulation variationnelle qui s'adapte à différents cas.*

Abstract - *Here, we present some results about non-linear Schrödinger-Poisson systems. These systems model the thermodynamical and electrostatic equilibrium of electron gaz in quantum electronic devices. We propose a variational formulation which applies in several cases.*

1 Introduction-Définitions-Principaux résultats.

Nous ne détaillons pas la modélisation du problème physique et renvoyons pour cela à [6], [7], [8] et [12]. Les équations peuvent être posées sur un domaine borné avec conditions aux limites de Dirichlet, dans le cas périodique ou sur l'espace tout entier. On cherche le potentiel électrostatique V, solution d'un système qui couple le problème aux valeurs propres associé à l'opérateur de Schrödinger avec l'équation de Poisson.

• Sur un domaine borné Ω, le système s'écrit

$$\begin{cases} [-\Delta + (V_0 + V)]\,\psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad \text{dans}\,\Omega, \\ \psi_i|_{\partial\Omega} = 0,\ \int_\Omega |\psi_i|^2 = 1, \quad i = 1 \ldots \infty, \end{cases} \tag{1.1}$$

$$\begin{cases} -\Delta V = n - n_D \qquad \text{dans}\,\Omega, \\ V|_{\partial\Omega} = 0, \end{cases} \tag{1.2}$$

où le potentiel V_0 et la densité n_D sont des données du problème. La densité électronique n se calcule à l'équilibre thermodynamique en introduisant la fonction de distribution f et le niveau de Fermi ε_F :

$$n(x) = \sum_{i=1}^{\infty} f(\varepsilon_i - \varepsilon_F)|\psi_i(x)|^2\,, \quad x \in \Omega. \tag{1.3}$$

La fonction f est également connue et le niveau de Fermi peut être supposé nul dans ce cas.

• Dans le problème périodique, les données V_0 et n_D ont la périodicité du réseau $\mathcal{L} = \left\{n_1 a_1 + \cdots + n_d a_d,\ (n_1, \ldots, n_d) \in \mathbb{Z}^d\right\}$. La solution cherchée doit également vérifier cette périodicité. Le problème aux valeurs propres se décompose alors sur

*CMAP, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex (France), et Purdue University, West-Lafayette, IN 47907 (USA) de août 91 à mai 92.

$Q = \{t_1 a_1 + \cdots + t_d a_d,\ 0 < t_j < 1\}$ en une famille d'équations de Schrödinger stationnaires

$$\begin{cases} [-\Delta + (V_0 + V)]\,\psi_{i\theta} = \varepsilon_{i\theta}\psi_{i\theta} \quad \text{dans}\, Q, \\ \psi_{i\theta}(x + a_j) = e^{i\theta_j}\psi_{i\theta}(x)\ ,\ \nabla\psi_{i\theta}(x + a_j) = e^{i\theta_j}\nabla\psi_{i\theta}(x)\ , \\ \hfill x \in \partial Q,\ j = 1 \ldots d, \\ \int_Q |\psi_{i\theta}|^2 = 1 \quad ,\quad i = 1 \ldots \infty,\ \theta = (\theta_1 \ldots \theta_d) \in [0, 2\pi)^d\ . \end{cases} \tag{1.1}$$

L'équation de Poisson est posée sur le domaine Q avec des conditions aux limites périodiques

$$\begin{cases} -\Delta V = n - n_D \qquad \text{dans}\, Q, \\ V(x + a_j) = V(x)\ ,\ \nabla V(x + a_j) = \nabla V(x)\ ,\ x \in \partial Q\ ,\ j = 1 \ldots \infty. \end{cases} \tag{1.2}$$

La définition de la densité prend en compte tout le spectre de l'opérateur $-\Delta + V_0 + V$ sur $\mathbb{R}^d$ et vaut

$$n(x) = \int_{[0,2\pi)^d} \left[\sum_{i=1}^{\infty} f(\varepsilon_{i\theta} - \varepsilon_F)|\psi_{i\theta}(x)|^2\right] \frac{d\theta}{(2\pi)^d}\ ,\quad x \in Q\ . \tag{1.3.a}$$

De plus, le niveau de Fermi ε_F n'est plus donné dans ce problème. Il est imposé par la condition d'électroneutralité, $\int_Q n = \int_Q n_D$, qui s'écrit

$$\int_{[0,2\pi)^d} \left[\sum_{i=1}^{\infty} f(\varepsilon_{i\theta} - \varepsilon_F)\right] \frac{d\theta}{(2\pi)^d} = \int_Q n_D\ . \tag{1.3.b}$$

• Sur l'espace tout entier, il faut travailler avec le spectre continu de l'opérateur $-\Delta + V_0 + V$. Nous nous contentons pour l'instant d'une écriture formelle des équations

$$[-\Delta + (V_0 + V)]\,\psi_\varepsilon = \varepsilon\psi_\varepsilon \qquad \text{dans}\ \mathbb{R}^d, \tag{1.1}$$

$$-\Delta V = n - n_D \qquad \text{dans}\ \mathbb{R}^d, \tag{1.2}$$

avec

$$n(x) = \sum_\varepsilon f(\varepsilon - \varepsilon_F)|\psi_\varepsilon(x)|^2\ ,\quad x \in \mathbb{R}^d. \tag{1.3}$$

Comme sur un domaine borné, le niveau de Fermi ε_F est fixé et peut être considéré comme une donnée. Il est en fait déterminé par la condition $n(x) \sim n_D(x)$ quand $|x| \to \infty$, indépendante de V. Nous reviendrons sur cette condition ainsi que sur la définition de la densité en Section 4.

Notations : Nous utilisons les espaces fonctionnels usuels $L^p(E), 1 \le p \le \infty, \mathcal{C}^m(E)$ et $H^m(E), m \in \mathbb{N}, \mathcal{C}^\infty(E), \mathcal{C}_0^\infty(E)$ et $\mathcal{S}(E)$, E ouvert de $\mathbb{R}^d$. Dans le cas périodique, nous introduisons également les espaces $L^p(\mathbb{R}^d/\mathcal{L}), 1 \le p \le \infty$ et $H^1(\mathbb{R}^d/\mathcal{L})$. On a $L^p(\mathbb{R}^d/\mathcal{L}) = L^p(Q)$ et $H^1(\mathbb{R}^d/\mathcal{L}) \subset H^1(Q)$ à un isomorphisme près. En vue d'une présentation plus synthétique, les symboles L^p, $\mathcal{H}^1$ et $\mathcal{H}_0^1$ désignent suivant les cas - $L^p(\Omega)$, $H^1(\Omega)$ et $H_0^1(\Omega)$ - $L^p(\mathbb{R}^d/\mathcal{L})$, $H^1(\mathbb{R}^d/\mathcal{L})$ et $H^1(\mathbb{R}^d/\mathcal{L})\big/\mathbb{R}$ - ou - $L^p(\mathbb{R}^d)$ et $H^1(\mathbb{R}^d) = H_0^1(\mathbb{R}^d)$.

L'espace des opérateurs bornés sur L^2, $\mathcal{L}(L^2)$, est muni de sa norme $\|.\|$ et on désigne par $J_p, 1 \le p \le \infty$, les espaces d'opérateurs à trace avec leur norme $\|.\|_p$. Pour les cas du domaine borné et de tout l'espace, la forme linéaire notée Tr n'est autre que la trace usuelle tr, tandis que pour le cas périodique elle est définie par

$$\mathrm{Tr}(A) = \int_{[0,2\pi)^d} \mathrm{tr}(A_\theta)\frac{d\theta}{(2\pi)^d}\ ,\qquad si\quad A = \int_{[0,2\pi)^d}^{\oplus} A_\theta \frac{d\theta}{(2\pi)^d}\ .$$

Comme précédemment la notation $\mathcal{J}_p$ représente suivant les cas soit simplement l'espace J_p, soit l'espace $L^\infty\left([0,2\pi)^d, J_p\right)$ dans le cas périodique, et on note encore $\|.\|_p$ sa norme.

On suppose le domaine borné Ω suffisament régulier ($\mathcal{C}^2$ par exemple) et on fait les hypothèses suivantes sur les données du problème.

Hypothèse1 : a) $V_0 \in L^2$

b) Sur Ω ou Q : $n_D \in L^2$, $\quad n_D \geq 0$, $n_D \neq 0$

c) Sur $\mathbb{R}^d$: $n_D = n_+ + n_\infty$, $n_+ \in L^2$, n_∞ constante > 0.

Hypothèse2 : La fonction de distribution à l'équilibre thermodynamique f est positive, appartient à $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}) \cap \mathcal{S}(\mathbb{R}^+)$ et vérifie $f' < 0$.

On remarque que la primitive de f, $F(\varepsilon) = -\int_\varepsilon^\infty f(u)du$, appartient aussi à $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}) \cap \mathcal{S}(\mathbb{R}^+)$.

Si on note $n(V)$ la densité électronique associée à V par (1.1)(1.3), le système Schrödinger-Poisson se met sous la forme

$$-\Delta V = n(V) - n_D \ , \quad V \in \mathcal{H}_0^1 \ , \tag{1.4}$$

qui s'avère être l'équation d'Euler d'un problème variationnel.

Theorem 1.1 *L'équation (1.4) est équivalente au problème d'optimisation*

$$\mathop{Inf}_{V \in \mathcal{H}_0^1} J(V) \quad , \tag{1.5}$$

où la fonctionnelle J définie
soit par

$$J(V) = \frac{1}{2}\int_{\Omega ou Q} |\nabla V|^2 \ + \ \int_{\Omega ou Q} n_D(V - \varepsilon_F) \ - \ \mathrm{Tr}\left[F(H - \varepsilon_F)\right] \tag{1.6}$$

soit par

$$\begin{aligned} J(V) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^d} |\nabla V|^2 \ + \ \int_{\mathbb{R}^d} n_+ V \\ - \mathrm{Tr}\Big[F(-H - \varepsilon_F) - F(-\Delta - \varepsilon_F) - [\partial_V F(-H - \varepsilon_F)](-V_0).V\Big] \ , \\ \text{avec } H = -\Delta + V_0 + V \ , \end{aligned} \tag{1.7}$$

est Fréchet-$\mathcal{C}^\infty$ et convexe par rapport à $V \in \mathcal{H}_0^1$.

Nous résumons en trois points l'analyse développée dans [7] et [8]. Tout d'abord, nous rappelons quelques résultats de calcul fonctionnel. Ensuite, nous précisons la différentiabilité des termes à trace. Enfin, nous concluons par la formulation variationnelle et les résultats d'existence et d'unicité qui en découlent.

2 Rappels-Calcul fonctionnel

Pour simplifier, on peut supposer dans un premier temps $V_0 = 0$, ε_F fixé même dans le cas périodique, et travailler avec $V \in L^2$. Il est commode pour étudier la régularité de $F(-\Delta + V - \varepsilon_F)$ par rapport à V d'utiliser la formulation proposée par B. Helffer et J. Sjöstrand dans [5] et développée par C. Gérard dans [4],

$$\varphi(A) = \frac{i}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} \partial_{\bar{z}}\tilde{\varphi}(z)\ (z - A)^{-1} dz \wedge d\bar{z}\ , \tag{2.1}$$

pour un opérateur auto-adjoint A, où $\tilde{\varphi}$ est une extension "presque analytique" de φ, φ régulière et à décroissance suffisament rapide.

Rappelons d'abord quelques propriétés de l'hamiltonien $H = -\Delta + V$ quand $V \in L^2$. Les inégalités d'interpolations de [9] donnent l'estimation

$$\forall \psi \in H^2(E),\ \|U\psi\|_{L^2(E)} \le C\|U\|_{L^p}\|(\Delta + i)\psi\|^a_{L^2(E)}\|\psi\|^{(1-a)}_{L^2(E)} \tag{2.2}$$

avec $U \in L^p$, $a = \frac{d}{2p}, 0 \le a < 1$, et où le domaine E vaut suivant les cas : $E = \Omega$, $E = Q$ *ou* $\mathbb{R}^d$ dans le problème périodique, $E = \mathbb{R}^d$.
On note $B_M = \{V \in L^2 / \|V\|_{L^2} < M\}$ où M est une constante positive arbitrairement grande. Dans toute la suite, on indique par un indice la dépendance des quantité considérées par rapport à M. De façon classique, on déduit de (2.2) les résultats suivants.

Lemma 2.1 *a) L'opérateur V est $-\Delta$-borné avec la borne relative* 0, *et ce uniformément en* $V \in B_M$.

b) L'hamiltonien $H = -\Delta + V$ *est auto-adjoint avec le domaine* $D(H) = D(-\Delta)$.

c) Le spectre de H est borné inférieurement, uniformément en $V \in B_M$:

$$\sigma(H) \subset [-\sigma_M, \infty)\ ,\quad \sigma_M > 0\ . \tag{2.3}$$

d) Les normes $\|(\Delta + i)\|_{L^2}$ *et* $\|(H + i)\|_{L^2}$ *sont équivalentes sur* $D(H) = D(-\Delta)$, *uniformément en* $V \in B_M$:

$$\forall \psi \in D(H), C_M\|(\Delta + i)\psi\|_{L^2} \le \|(H + i)\psi\|_{L^2} \le C'_M\|(\Delta + i)\psi\|_{L^2}\ . \tag{2.4}$$

e) La résolvante $(z - H - \beta V_1)^{-1}$ *est analytique réelle par rapport à* $\beta \in \mathbb{R}$ *quand* $V, V_1 \in L^2$ *et* $Im z \neq 0$.

f) Dans le cas périodique, l'opérateur H est décomposable

$$H = \int^{\oplus}_{[0,2\pi)^d} H_\theta \frac{d\theta}{(2\pi)^d}\ ,$$

et les propriétés précédentes s'appliquent à H_θ *et* $-\Delta_\theta$ *avec des estimations (2.3)(2.4) uniformes en* $\theta \in [0, 2\pi)^d$.

<u>NB :</u> Dans le cas périodique, le domaine de H_θ et $-\Delta_\theta$ prend en compte les conditions aux limites de (1.1) et peut s'écrire

$$D(H_\theta) = \overline{\left\{ \begin{array}{r} \varphi \in C^\infty(Q)/\varphi(x + a_j) = e^{i\theta_j}\varphi(x)\ ,\ \nabla\varphi(x + a_j) = e^{i\theta_j}\nabla\varphi(x) \\ x \in \partial Q,\ j = 1 \dots d \end{array} \right\}}^{H^2(Q)}\ .$$

La propriété c) permet de construire une extension $\widetilde{F_M}$ de F adaptée à notre problème. Il s'agit d'une fonction $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{C})$ à support dans $\{z \in \mathbb{C} / |\mathrm{Im} z| \leq C < z >\}$, avec $< z >^2 = (1 + |z|^2)$, telle que

$$\bullet \widetilde{F_M}(x) = F(x)\,, \quad \forall x \in [-\sigma_M - \varepsilon_F,\, \infty)\,, \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned} \bullet \left|\widetilde{F_M}(z)\right| \leq C_{N\nu} < z >^{-\nu} |Imz|^N\,, \quad \forall z \in \mathbb{C},\ \mathrm{Im} z \neq 0, \\ \forall (N, \nu) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+\,. \end{aligned} \tag{2.6}$$

<u>NB :</u> On choisit de plus les extensions de F et $f = F'$ de façon que $\partial_z \widetilde{F_M}(z) = \widetilde{f_M}(z)$. On a alors

$$F(H - \varepsilon_F) = \frac{i}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} \partial_{\bar{z}} \widetilde{F_M}(z - \varepsilon_F)\ (z - H)^{-1} dz \wedge d\bar{z}, \tag{2.7}$$

où l'intégrale converge dans $\mathcal{L}(L^2)$ par (2.6) et $\|(z - H)^{-1}\| \leq \frac{1}{|Imz|}$.

Proposition 2.1 *L'application : $V \in B_M \ \rightarrow\ F(H - \varepsilon_F) \in \mathcal{L}(L^2)$, avec $H = -\Delta + V$, est Fréchet-$\mathcal{C}^\infty$ avec*

$$[\partial_V^n F(H - \varepsilon_F)]\,(V).V_1 \ldots V_1 = \frac{n! i}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} \partial_{\bar{z}} \widetilde{F_M}(z - \varepsilon_F)\ (z - H)^{-1} \Big[V_1 (z - H)^{-1}\Big]^n dz \wedge d\bar{z}\ . \tag{2.8}$$

Preuve : Pour $\|V_1\|_{L^2}$ suffisament petit $(V + V_1 \in L^2)$ et $Imz \neq 0$, on fait un développement de Taylor de la résolvante

$$\begin{aligned} (z - H - V_1)^{-1} = &\sum_{k=0}^{n} (z - H)^{-1} \left[V_1 (z - H)^{-1}\right]^k \\ &+ \int_0^1 (1 - \beta)^n (z - H - \beta V_1)^{-1} \left[V_1 (z - H - \beta V_1)^{-1}\right]^{n+1} d\beta\ . \end{aligned}$$

On multiplie cette égalité par $\partial_{\bar{z}} \widetilde{F_M}(z - \varepsilon_F)$ et on intègre sur $\mathbb{C}$. Les différents termes conduisent à des intégrales convergentes grâce à (2.6) et aux estimations

$$\left\|(z - H - \beta V_1)^{-1} \left[V_1 (z - H - \beta V_1)^{-1}\right]^k\right\| \ \leq\ C_M \frac{< z >^{k+1}}{|Imz|^{k+1}} \|V_1\|_{L^2}^k\,, \quad \beta \in [0, 1], \tag{2.9}$$

que l'on obtient comme suit. On décompose les facteurs $V_1 (z - H - \beta V_1)^{-1}$ en

$$\begin{aligned} V_1 (z - H - \beta V_1)^{-1} = &[V_1 (i + \Delta)^{-1}]\ [(i + \Delta)(i + H + \beta V_1)^{-1}] \\ &[(i + H + \beta V_1)(z - H - \beta V_1)^{-1}] \end{aligned} \tag{2.10}$$

et on utilise :

- $\|(V_1 (i + \Delta)^{-1}\| \ \leq\ C \|V_1\|_{L^2}$ par (2.2),
- $\|(i + \Delta)(i + H + \beta V_1)^{-1}\| \ \leq\ C_M$ par (2.4),
- $\|(i + H + \beta V_1)(z - H - \beta V_1)^{-1}\| = \|(i + z)(z - H - \beta V_1)^{-1} - I\| \ \leq\ C \frac{<z>}{|Imz|}$.

■

3 Régularité des termes Tr[...] par rapport à $V \in \mathcal{H}^1$.

On suppose toujours ε_F fixé mais $V_0 \in L^2$, V_0 quelconque, $V \in \mathcal{H}^1$, et on note $H = -\Delta + V_0 + V$. La "trace" Tr étant linéaire continue sur $\mathcal{J}_1$, la Fréchet-différentiabilité des termes Tr[...] résulte de la Fréchet-différentiabilté de $F(H - \varepsilon_F)$ ou de $F(H - \varepsilon_F) - F(-\Delta - \varepsilon_F) - [\partial_V F(H - \varepsilon_F)](-V_0).V$ dans $\mathcal{J}_1$. Comme dans la Proposition 2.1, on se ramène à des estimations de $V_1(z - H - \varepsilon_F)^{-1}$ dans $\mathcal{J}_1$ si cela est possible, ou dans $\mathcal{J}_p, 1 \leq p \leq \infty$, sachant que $\|AB\|_1 \leq \|A\|_p \|B\|_q$, $p^{-1} + q^{-1} = 1$. En notant également (2.10) et $\|AB\|_p \leq \|A\|_p \|B\|$, on voit que la seule difficulté technique réside dans l'estimation de $\|V_1(i + \Delta)^{-1}\|_p$.

• <u>Sur un domaine borné :</u> On utilise la répartition asymptotique des valeurs propres de $-\Delta, D(-\Delta) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, qui s'écrit $\varepsilon_i \sim Ci^{2/d}$, ainsi que l'inégalité (2.2) avec $\psi = \psi_i$ et $U = V_1$. On obtient

$$\|(\Delta + i)^{-1}\|_p \; < \; \infty \, , \quad p > \frac{d}{2}, \tag{3.1}$$

$$\|V_1(\Delta + i)^{-1}\|_2 \; \leq \; C\|V_1\|_{L^{6+\epsilon}} \quad si \; V_1 \in L^{6+\varepsilon}, \varepsilon > 0, \tag{3.2}$$

$$\|V_1(\Delta + i)^{-1}\|_\infty \; \leq \; C\|V_1\|_{L^2} \quad si \; V \in L^2. \tag{3.3}$$

Par interpolation, on tire de (3.2)(3.3)

$$\|V_1(\Delta + i)^{-1}\|_{2+\varepsilon'} \; \leq \; C\|V_1\|_{L^6} \quad si \; V_1 \in L^6, \tag{3.4}$$

avec $\varepsilon' > 0$ arbitrairement petit. Comme on prend $V_1 \in \mathcal{H}^1 \subset L^6$, on déduit de (3.1) et (3.4) que $(\Delta + i)^{-1}V_1(\Delta + i)^{-1}$ et donc $(z - H - \beta V_1)^{-1}V_1(z - H - \beta V_1)^{-1}$ sont dans $\mathcal{J}_1$, avec des estimations du type (2.9). Par conséquent, toutes les dérivées $[\partial_V^n F(H - \varepsilon_F)](V).V_1 \ldots V_1$, $n \geq 1$, sont dans $\mathcal{J}_1$. Pour $n = 0$, on intègre (2.7) par parties

$$F(H - \varepsilon_F) = \frac{i}{2\pi} \int_{\mathbf{C}} \partial_{\bar{z}} \widetilde{G_M}(z - \varepsilon_F) \; (z - H)^{-2} dz \wedge d\bar{z},$$

où $\widetilde{G_M}$, extension de $G(\varepsilon) = -\int_\varepsilon^\infty F(u)du$, vérifie les mêmes propriétés que $\widetilde{F_M}$ avec $\partial_z \widetilde{G_M} = \widetilde{F_M}$.

• <u>Le problème périodique</u> se traite de la même façon que le cas précédent en vérifiant que toutes les estimations sont uniformes en $\theta \in [0, 2\pi)^d$.

• <u>Sur l'espace tout entier $\mathbb{R}^d$:</u> On remarque d'abord que l'opérateur dont on calcule la trace dans (1.7),

$$\Big[F(-H - \varepsilon_F) - F(-\Delta - \varepsilon_F) - [\partial_V F(-H - \varepsilon_F)](-V_0).V\Big],$$

est le reste d'ordre 2 du développement de Taylor de $F(-H - \varepsilon_F)$ au point $V = -V_0$. On peut donc écrire toutes ses dérivées par rapport à V avec des intégrales ne contenant que des expressions de la forme $V_1(z - H)^{-1}V_2(z - H)^{-1}, V_1$ et $V_2 \in L^2$. Il suffit alors de vérifier $V_1(z - H)^{-1} \in \mathcal{J}_2$ quand $V_1 \in L^2$. Il s'agit d'un opérateur de la forme $f(x)g(i\nabla)$ (avec $f(x) = V_1(x)$ et $g(\xi) = (i - |\xi|^2)^{-1}$) pour lequel on conclut par

$$\|f(x)g(i\nabla)\|_2 \; \leq \; C\|f\|_{L^2}\|g\|_{L^2}. \tag{3.5}$$

On note Φ la fonctionnelle définie

• sur Ω ou pour le problème périodique (ε_F fixé pour l'instant) par

$$\Phi(V) = \mathrm{Tr}\,[F(H - \varepsilon_F)]\,, \tag{3.6.a}$$

• et sur $\mathbb{R}^d$ par

$$\Phi(V) = \mathrm{Tr}\Big[F(-H - \varepsilon_F) - F(-\Delta - \varepsilon_F) - [\partial_V F(-H - \varepsilon_F)](-V_0).V\Big]. \tag{3.6.b}$$

Proposition 3.1 *L'application $\Phi : V \in \mathcal{H}^1 \to \Phi(V) \in \mathbb{R}$ est Fréchet-$\mathcal{C}^\infty$ avec*

$$\partial_V^n \Phi(V).V_1 \ldots V_1 = \mathrm{Tr}\Big[\frac{(n-1)!i}{2\pi}\int_{\mathbb{C}} \partial_{\bar z}\widetilde{f_M}(z - \varepsilon_F)\ \big[V_1(z-H)^{-1}\big]^n\, dz \wedge d\bar z\Big], \tag{3.7}$$

pour $n \le 2$. De plus, la dérivée première de Φ est donnée

• *sur Ω ou pour le problème périodique (ε_F fixé pour l'instant) par*

$$\partial_V \Phi(V).V_1 = \mathrm{Tr}\,[V_1 f(H - \varepsilon_F)]\,, \tag{3.8.a}$$

• *et sur $\mathbb{R}^d$ par*

$$\partial_V \Phi(V).V_1 = \mathrm{Tr}\,[V_1 f(H - \varepsilon_F) - V_1 f(-\Delta - \varepsilon_F)]\,. \tag{3.8.b}$$

Preuve : Nous avons établit ci-dessus la différentiabilité de Φ. Il reste à préciser les expressions de ses dérivées. La dérivée n-ième de Φ, $n \ge 2$, vérifie

$$\begin{aligned} \partial_V^n \Phi(V).V_1 \ldots V_1 &= \mathrm{Tr}\Big[[\partial_V^n F(H - \varepsilon_F)](V).V_1 \ldots V_1\Big] \\ &= \frac{n!i}{2\pi}\int_{\mathbb{C}} \partial_{\bar z}\widetilde{f_M}(z - \varepsilon_F)\ \mathrm{Tr}\Big[(z-H)^{-1}\,\big[V_1(z-H)^{-1}\big]^n\Big] dz \wedge d\bar z\,. \end{aligned} \tag{3.9}$$

On utilise la commutativité de la trace, $\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$, quand $A \in \mathcal{J}_p, B \in \mathcal{J}_q$, $p^{-1} + q^{-1} = 1$, pour écrire

$$\mathrm{Tr}\Big[(z-H)^{-1}\,\big[V_1(z-H)^{-1}\big]^n\Big] = \frac{1}{n}\partial_z \mathrm{Tr}\,\Big[\big(V_1(z-H)^{-1}\big)^n\Big]\ ,$$

et on intègre (3.9) par parties avec $\partial_z \widetilde{F_M}(z) = \widetilde{f_M}(z)$. On obtient ainsi l'expression (3.7) et le cas $n = 1$ se traite de façon similaire. ∎

NB : Pour le cas de l'espace tout entier, on note que ce résultat est encore valable en prenant $\Phi : V \in L^2 \to \Phi(V) \in \mathbb{R}$.

4 La formulation variationnelle

Ici, nous nous plaçons exactement dans le cadre défini à la Section 1. En particulier le niveau de Fermi ε_F dépend de V dans le cas périodique. De plus, le problème variationnel (1.5) est posé dans $\mathcal{H}_0^1$ et nous devons donc restreindre le potentiel V à cet espace.
Nous concluons la preuve du Théorème 1.1 en deux étapes : La prémière consiste à identifier la dérivée $\partial_V \Phi(V)$ à l'aide de la densité $n(V)$; la seconde à établir la convexité de $J(V)$.

4.1 La densité $n(V)$

•Sur Ω, la densité $n(V)$ définie par (1.3) vérifie

$$\begin{aligned} \int_\Omega V_1 n(V) &= \int_\Omega V_1(x)\Big[\sum_{i=1}^\infty f(\varepsilon_i - \varepsilon_F)|\psi_i(x)|^2\Big]\, dx \\ &= \mathrm{Tr}\,[V_1 f(H - \varepsilon_F)] = \partial_V \Phi(V)\ , \quad \forall V,\ V_1 \in \mathcal{H}_0^1\,. \end{aligned} \tag{4.1}$$

En conséquence la dérivée $\partial_V \Phi(V)$, élément du dual $H^{-1}(\Omega)$ de $\mathcal{H}_0^1 = H_0^1(\Omega)$, n'est autre que la densité $n(V)$. On en conclut

$$\partial_v J(V) = -\Delta + n_D - n(V) \quad \text{dans } H^{-1}(\Omega)\,. \tag{4.2}$$

•Dans le cas périodique, le niveau de Fermi $\varepsilon_F(V)$ est défini par (1.3.b) qui s'écrit également

$$\mathrm{Tr}\,[f(H-\varepsilon_F)] = \int_Q n_D \tag{4.3}$$

Avec la Proposition 3.1 et le théorème des fonctions implicites, on établit que ε_F est Fréchet-$\mathcal{C}^\infty$ par rapport à $V \in \mathcal{H}^1$. On peut alors différentier l'application

$$\Phi_1 : V \in \mathcal{H}^1 \;\to\; \int_Q n_D(V - \varepsilon_F(V)) - \mathrm{Tr}\,[F(H - \varepsilon_F(V))]$$

et on obtient

$$\begin{aligned}
\partial_V \Phi_1(V).V_1 &= \int_Q n_D V_1 - \left(\int_Q n_D\right) \partial_V \varepsilon_F(V).V_1 - \partial_V \Phi(V).(V_1 - \partial_V \varepsilon_F(V).V_1) \\
&= \int_Q n_D V_1 - \left(\int_Q n_D\right) \partial_V \varepsilon_F(V).V_1 \\
&\qquad\qquad - \mathrm{Tr}\,[(V_1 - \partial_V \varepsilon_F(V).V_1)\, f(H - \varepsilon_F(V))] \\
&= \int_Q n_D V_1 - \mathrm{Tr}\,[V_1 f(H - \varepsilon_F(V))]\,.
\end{aligned}$$

Comme dans (4.1) on peut identifier la densité $n(V)$ et la forme linéaire $V_1 \in \mathcal{H}^1 \to \mathrm{Tr}\,[V_1 f(H - \varepsilon_F -)]$, dans le dual $H^{-1}(\mathbb{R}^d/\mathcal{L})$ de $\mathcal{H}^1 = H^1(\mathbb{R}^d/\mathcal{L})$. Cela conduit à $\partial_V \Phi_1(V) = n_D - n(V)$. L'égalité (4.3) implique que $\partial_V \Phi_1(V)$ est orthogonale aux constantes et en conséquence appartient au dual de $\mathcal{H}_0^1 = H^1(\mathbb{R}^d/\mathcal{L})/\mathbb{R}$. On en déduit que Φ_1 et J sont Fréchet-$\mathcal{C}^\infty$ sur $\mathcal{H}_0^1$ avec

$$\partial_V J(V) = -\Delta V + n_D - n(V) \quad \text{dans le dual de } \mathcal{H}_0^1. \tag{4.4}$$

•Sur l'espace tout entier $\mathbb{R}^d$, on peut montrer que l'opérateur $V_1 f(H - \varepsilon_F)$ est dans $\mathcal{J}_1$ quand $V_1 \in L^2_{comp}$. Pour cela, on intègre par parties (2.7)

$$V_1 f(H - \varepsilon_F) = \frac{i}{2\pi} \int_{\mathbb{C}} \partial_{\bar z} \widetilde{F_M}(z - \varepsilon_F)\; V_1 (z - H)^{-2} dz \wedge d\bar z\,.$$

On utilise le résultat donné dans [10] et [11] sur les opérateurs de la forme $f(x)g(i\nabla)$

$$\|f(x)g(i\nabla)\|_1 \;\leq\; C\| < x >^\nu f(x)\|_{L^2}\; \| < \xi >^\nu g(\xi)\|_{L^2}\,, \quad \nu > \frac{d}{2},$$

pour établir l'estimation

$$\|V_1(i+\Delta)^{-1}\|_1 \;\leq\; C_K \|V_1\|_{L^2}\,, \quad Supp\, V_1 \subset K,\; K \text{ compact.}$$

On définit alors la densité $n(V)$ de manière rigoureuse en utlisant la dualité entre L^2_{loc} et L^2_{comp}. Plus précisément, on remplace (1.3) par

$$\int_{\mathbb{R}^d} n(V) V_1 = \mathrm{Tr}\,[V_1 f(H - \varepsilon_F)] \quad \forall V_1 \in L^2_{comp}\,. \tag{4.5}$$

On peut vérifier l'équivalence entre (4.5) et la définition initiale (1.3) pour des potentiels à décroissance suffisament rapide en utilisant les fonctions propres généralisées [2].
Le niveau de Fermi qui ne dépend pas de V est déterminé par la condition $n(-V_0) = n_\infty$, c'est à dire

$$\mathrm{Tr}\,[V_1 f(-\Delta - \varepsilon_F)] = \int_{\mathbb{R}^d} n_\infty V_1, \quad \forall V_1 \in L^2_{comp} \,. \tag{4.6}$$

Les définitions (4.5) et (4.6) permettent d'écrire l'égalité

$$\partial_V \Phi(V) = n(V) - n_\infty \quad \mathrm{dans} L^2, \tag{4.7}$$

en observant que (3.8.b) est valable pour $V_1 \in L^2$. Par conséquent, on a

$$\begin{aligned} \partial_V J(V) &= -\Delta V + (n_+ + n_\infty) - n(V) \\ &= -\Delta V + n_D - n(V) \,, \end{aligned} \tag{4.8}$$

dans $H^{-1}(\mathbb{R}^d)$ le dual de $\mathcal{H}^1_0 = H^1(\mathbb{R}^d)$.
Notons que la définition de ε_F par (4.6) donne la seule valeur pour laquelle $n(V) - n_\infty \in L^2$, ce qui traduit la condition que nous avons écrite formellement en Section 1, $n(V)(x) \sim n_D(x)$ quand $|x| \to \infty$.

4.2 Convexité de $J(V)$

Elle repose sur la convexité de $-\Phi(V)$ sur $\mathcal{H}^1$.

•Sur Ω : On montre à partir de (3.7)

$$\partial^2_V \Phi(V).V_1.V_1 = \sum_{i,j=1}^{\infty} \frac{f(\varepsilon_j) - f(\varepsilon_i)}{\varepsilon_j - \varepsilon_i} |(\psi_j, V_1 \psi_i)_{L^2}|^2 \ , \forall V_1 \in \mathcal{H}^1 \ , \tag{4.9}$$

où par convention $\frac{f(\varepsilon_j)-f(\varepsilon_i)}{\varepsilon_j - \varepsilon_i} = f'(\varepsilon_i)$ si $\varepsilon_j = \varepsilon_i$. L 'hypothèse de décroissance de f assure la négativité de cette expression et entraine la convexité de $\Phi(V)$.

•Pour le problème périodique : La dérivée seconde de Φ_1 est reliée à celle de Φ par

$$\partial^2_V \Phi_1(V).V_1.V_1 = \partial^2_V \Phi(V).(V_1 - \partial_V \varepsilon_F.V_1).(V_1 - \partial_V \varepsilon_F.V_1) \,. \tag{4.10}$$

On termine en donnant une expression de $\partial^2_V \Phi(V)$ similaire à (4.9)

$$\partial^2_V \Phi(V).V_1.V_1 = \int_{[0,2\pi)^d} \sum_{i,j=1}^{\infty} \frac{f(\varepsilon_{j\theta}) - f(\varepsilon_{i\theta})}{\varepsilon_{j\theta} - \varepsilon_{i\theta}} |(\psi_{j\theta}, V_1 \psi_{i\theta})_{L^2}|^2 \frac{d\theta}{(2\pi)^d} \,. \tag{4.11}$$

•Sur l'espace tout entier $\mathbb{R}^d$: On résout la difficulté liée à la présence du spectre continu en remplaçant la résolvante $(z - H)^{-1}$ dans (3.7) par

$$g_N(z, H) = \sum_{-\alpha_N < \lambda_j < \alpha_N} \frac{1}{(z - \lambda_j)} E_{[\lambda_j, \lambda_{j+1})}$$

où $\lambda_j = \frac{j}{N+1}$, α_N est suffisament grand et $E_{[\lambda_j,\lambda_{j+1})}$ désigne la projection spectrale associée à H. On obtient alors une expression négative similaire à (4.9) et on passe à la limite quand $N \to \infty$.

4.3 Conclusion

La formulation variationnelle conduit au résultat d'existence et d'unicité suivant.

Proposition 4.1 *a) Sur un domaine borné Ω ou pour le problème périodique, le problème variationnel (1.5) et en conséquence le système Schrödinger-Poisson (1.4) admettent une solution unique dans $\mathcal{H}^1_0$.*
b) Sur l'espace tout entier $\mathbb{R}^d$, il y a unicité de la solution dans $\mathcal{H}^1_0$ pour (1.4) et (1.5).

La première assertion repose sur la coercivité de $\frac{1}{2}\int_{\Omega ou Q}|\nabla V|^2$ dans $\mathcal{H}_0^1$. Dans le cas de l'espace tout entier en revanche, la forme quadratique $\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^d}|\nabla V|^2$ n'est plus coercive sur $H^1(\mathbb{R}^d)$. L'unicité de la solution provient de la stricte convexité, toujours valable. On peut également démontrer un résultat d'existence à l'aide du théorème des fonctions implicites en partant de l'équilibre homogène, $V_0 = 0$ et $n_+ = 0$, pour lequel la solution est trivialement $V = 0$.

Proposition 4.2 *Il existe deux constantes positives C_f et C'_f dépendant de f telles que (1.4) et (1.5) admettent une solution quand $\|V_0\|_{L^2} \leq C_f$ et $\|n_+\|_{L^2} \leq C'_f$.*

Remerciements : Je tiens à remercier N. Ben Abdallah, Pr. P. Degond, Pr. J.C. Guillot et tout spécialement Pr. C. Gérard pour des discussions et une correspondance fructueuse.

Références

[1] A. Adams, Sobolev Spaces, Academic Press, New-York, (1975).

[2] S. Agmon, *Spectral Properties of Schrödinger Operators and Scattering Theory*, Ann. Scuola Normale di Pisa **2** 2 (1975), 151-218.

[3] J. Chazarain, A. Piriou, Introduction à la théorie des équations aux dérivées partielles linéaires, Gauthiers-Villars, Paris (1981).

[4] C. Gérard, *Sharp propagation estimates for N-particles systems*, Preprint-CMAT Ecole Polytechnique (1990).

[5] B. Helffer, J. Sjöstrand, *Equation de Harper*, Lect. Notes in Physics, Springer **345** (1989), 118-197.

[6] T. Kerkhoven, A. T. Galick, V. Ravaioli, J. H. Arends, Y. Saad, *Efficient numerical simulation of electrons states in quantum wires*, J. Appl. Phys. **68**(1990), 3461-3469.

[7] F. Nier, *A Variational Formulation of Schrödinger-Poisson Systems in Dimension $d \leq 3$*, Techn. Report # 136, Purdue University, Rapport interne du CMAP N 253, Ecole Polytechnique, submitted to Commun. in PDE.

[8] F. Nier, *Schrödinger-Poisson Systems in Dimension $d \leq 3$: the Whole-Space Case*, manuscript.

[9] L. Nirenberg, *On elliptic partial differential equations*, Ann. Scuola Sup. Pisa **13** (1959), 116-162.

[10] M. Reed, B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics, Academic Press, New-York, San Francisco, Londres (1975).

[11] B. Simon, Trace Ideals and Applications, Cambridge University Press (1978).

[12] B. Vinter, *Subbands and charge control in a two-dimensional electron gas field effect transistor*, Appl. Phy. Let. **44** (1987), P. 307.