

Astérisque

JEAN BELLISSARD

Le papillon de Hofstadter

Astérisque, tome 206 (1992), Séminaire Bourbaki, exp. n° 745, p. 7-39

http://www.numdam.org/item?id=SB_1991-1992__34__7_0

© Société mathématique de France, 1992, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la collection « Astérisque » (<http://smf4.emath.fr/Publications/Asterisque/>) 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/>

LE PAPILLON DE HOFSTADTER
[d'après B. Helffer et J. Sjöstrand]

par Jean BELLISSARD

1. ÉLECTRONS DE BLOCH EN CHAMP MAGNÉTIQUE

Le papillon de Hofstadter auquel est consacrée cette contribution, est lié à la description du mouvement d'un électron cristallin plongé dans un champ magnétique uniforme. Ce problème est l'un de ceux qui a mobilisé le plus de physiciens du solide durant ce siècle, au point qu'une bibliographie devrait comporter un minimum de 200 articles essentiels, signés par les plus grands noms de ce domaine. Il n'est pas question d'en donner ici la liste, encore que l'histoire du sujet vaille sans doute la peine d'être écrite. Néanmoins, il est utile d'en retenir quelques points.

La première contribution à cette question est due à Landau [LA], qui, en 1930, donna pour la première fois le calcul du spectre d'énergie d'un électron libre dans un champ magnétique uniforme. Ce fut Peierls [PE] en 1933 qui jeta les bases de la théorie des électrons cristallins dans un métal soumis à un champ magnétique uniforme, et qui montra que la contribution des électrons de conduction à la susceptibilité magnétique était diamagnétique. Dans un cristal de dimension D , en l'absence de champ magnétique et en négligeant les interactions coulombiennes, les électrons de conduction sont décrits comme des particules indépendantes dont l'énergie est donnée par une ou plusieurs fonctions $E(\vec{k})$ du vecteur "quasi-moment" $\vec{k}$, périodique par rapport au groupe de symétrie du réseau réciproque du cristal considéré. Le quasi-moment représente, à une constante physique

près, la quantité de mouvement de la particule. Ces fonctions sont appelées “fonctions de bande”. Des considérations liées à la statistique de Fermi-Dirac montrent que seuls les porteurs de charges d’énergie proche du niveau de Fermi contribuent au transport de courant. Ainsi dans les cas les plus simples une seule fonction de bande suffit, tandis qu’en général, il en faudra un nombre fini, rarement supérieur à trois. Sachant que les champs magnétiques créés en laboratoire sont toujours beaucoup trop faibles pour produire des effets importants, Peierls proposa de décrire le mouvement de l’électron en présence d’un champ magnétique uniforme au moyen de l’opérateur Hamiltonien H obtenu en substituant au quasi-moment $\vec{k}$ dans la fonction de bande, l’opérateur $\vec{K} = (\vec{P} - e\vec{A})/\hbar$, expression dans laquelle $\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$ représente l’opérateur d’impulsion, tandis que $\vec{A}$ représente le potentiel vecteur magnétique relié au champ magnétique $\vec{B}$ par $\text{rot}(\vec{A}) = \vec{B}$.

La première justification de cette substitution fut l’objet d’un article de Luttinger [LU] en 1950, qui adapta à ce problème une méthode développée par Slater pour traiter les impuretés dans un cristal. Cet article fut le début d’une production abondante de travaux durant les années cinquante, consacrés à la construction de Hamiltoniens effectifs plus ou moins réalistes tenant compte de l’influence du champ magnétique. Parmi ces contributions, celle de Harper [HA], parue en 1955, propose un modèle simplifié susceptible de fournir une description qualitativement correcte du mouvement des porteurs de charge. Sachant que seul le mouvement perpendiculaire au champ magnétique est affecté par ce dernier, Harper se restreint à un problème bidimensionnel dans lequel $\vec{K} = (K_1, K_2)$. En outre, il ne retient dans la fonction de bande que les termes d’ordre les plus bas de son développement de Fourier. Pour un cristal carré, il obtient donc le Hamiltonien suivant:

$$(1) \quad H = 2t\{\cos(K_1) + \cos(K_2)\}$$

où t , appelé “transfert” ou “intégrale d’échange”, représente l’énergie nécessaire à l’électron pour son transfert d’un site à l’autre du cristal. Le point remarquable, dans cette expression, est que cet opérateur, ainsi d’ailleurs que tout autre modèle construit par cette méthode, ne dépend que des

“translations magnétiques” [ZA], à savoir les deux opérateurs unitaires $U_i = e^{iK_i}$ ($i=1,2$) qui satisfont aux relations de commutation:

$$(2) \quad U_1 U_2 = e^{2i\pi\alpha} U_2 U_1 \quad \alpha = \frac{\phi}{\phi_0}$$

où $\phi_0 = \frac{h}{e}$ est le quantum du flux magnétique, h étant la constante de Planck, et e la charge de l'électron. Ces relations sont les relations de commutation canoniques à condition de remplacer la constante de Planck $\hbar$ par le flux normalisé $2\pi\alpha$. Or, pour un cristal réaliste comportant une maille élémentaire de quelques Å plongé dans un champ de quelques Teslas, ce flux normalisé est de l'ordre de 10^{-7} à 10^{-9} . Nous travaillerons dans ce cas dans le régime semi-classique avec une excellente approximation.

La justification mathématique de la substitution de Peierls a été apportée par [BE1, HS0] qui ont pu montrer que les électrons d'énergie proche du niveau de Fermi, sont décrits exactement par un Hamiltonien effectif construit comme une matrice de dimension finie dont les coefficients sont des séries convergentes de monômes dans les translations magnétiques. Ainsi, le modèle de Harper ne constitue-t-il que l'approximation à une bande la plus simple du Hamiltonien effectif décrivant les électrons de conduction.

Le calcul du spectre du modèle de Harper a lui-même une longue histoire. En effet, la présence du champ magnétique brise l'invariance par translation, interdisant le recours au théorème de Bloch pour son calcul. Les méthodes semi-classiques furent utilisées dès la fin des années cinquante pour décrire l'influence du réseau cristallin sur les niveaux de Landau. Cependant, les physiciens avaient aussi remarqué que lorsque le flux normalisé était un rationnel, le Hamiltonien redevenait périodique, si bien que l'on pouvait utiliser la théorie de Bloch dans ce cas. Alors en approximant α par une suite convenable de rationnels il devenait possible de calculer le spectre avec une précision croissante. Ce programme fut mis en oeuvre pour la première fois par Chambers [CH] en 1965, mais il ne calcula le spectre que pour un tout petit nombre de valeurs du flux estimant qu'il n'était pas nécessaire d'aller plus loin, ratant ainsi l'aspect le plus spectaculaire de ce problème, à savoir le caractère fractal du spectre comme fonction du flux. Il fallut attendre 1976, et la thèse de Hofstadter [HO] pour en apercevoir pour la première fois la structure (cf. Fig. 1)...en forme de papillon...fractal.

Il est remarquable de constater que le modèle de Harper ou ses dérivés furent redécouverts et employés dans des situations physiques très variées par plusieurs autres physiciens. En 1978, Aubry [AU] l'utilisa pour décrire la physique des chaînes unidimensionnelles spontanément modulées par le phénomène appelé "transition de Peierls". Dans les années quatre-vingts, à la suite de travaux dus à de Gennes [GE] et Alexander [AL] sur les réseaux de supraconducteurs, Rammal et plusieurs de ses collaborateurs montrèrent théoriquement et expérimentalement que le modèle de Harper permettait de décrire la courbe de transition métal normal-supraconducteur d'un réseau carré de fils supraconducteurs. En particulier la quantification du flux aux valeurs rationnelles du quantum de flux fut mise en évidence expérimentalement [PCR]. Ce modèle fut aussi utilisé pour comprendre la théorie de l'effet Hall quantique [TKN2] découvert en 1981 par von Klitzing et al. [KL]. Enfin tout récemment, ce modèle et ses dérivés sont devenus un passage obligé pour comprendre la théorie de la supraconduction à haute température dans les oxydes de cuivre supraconducteurs [RB1]. Le lecteur intéressé pourra trouver quelques informations dans [BE2].

2. PROPRIÉTÉS ÉLÉMENTAIRES DU MODÈLE DE HARPER

Dans ce paragraphe, nous considérons maintenant le modèle de Harper modifié comme suit:

$$(3) \quad H(\alpha, \mu) = U_1 + U_1^{-1} + \mu(U_2 + U_2^{-1})$$

où les opérateurs U_i sont unitaires et satisfont à l'équation (2) avec $\alpha = \frac{\phi}{\phi_0}$, et μ un nombre réel. Ce modèle sera désigné sous le nom de "Mathieu discret" dans la suite. Celui de Harper correspond à $\mu = 1$. Rappelons que le spectre d'un opérateur H est l'ensemble des nombres complexes z tels que $(z - H)$ n'admette pas d'inverse borné. Le spectre est un sous ensemble fermé du plan complexe. Pour un opérateur quelconque (resp. autoadjoint, unitaire), le spectre est contenu dans $\mathbf{C}$ (resp. dans $\mathbf{R}$, dans le cercle unité) et nous conviendrons d'appeler "gap" les composantes connexes du complémentaire du spectre dans $\mathbf{C}$ (resp. dans $\mathbf{R}$, dans le cercle unité).

Rappelons aussi qu'un ensemble de Cantor est un fermé nulle part dense sans point isolé.

Les résultats suivants résument les propriétés les plus simples de ce modèle.

THÉORÈME 2.1 (*Dualité d'Aubry, cf. [AA, AU, BE3]*). *Les spectres de $H(\alpha, \mu)$ de $\mu H(\alpha, \frac{1}{\mu})$, de $H(\alpha, -\mu)$ et de $H(1 \pm \alpha, \mu)$ sont égaux.*

THÉORÈME 2.2 (*cf. [BES, vM, CEY]*). *Si $\alpha = \frac{p}{q}$ est rationnel et si $\mu \neq 0$, le spectre de $H(\alpha, \mu)$ est formé de q bandes séparées par des gaps. Si q est impair, tous les gaps sont ouverts. Si q est pair, tous les gaps sauf le gap central correspondant à l'énergie nulle, sont ouverts.*

THÉORÈME 2.3 (*cf. [BES, vM, CEY]*). *Il existe dans $[0, 1]$ un G_δ dense Ω tel que si $\alpha \in \Omega$ et si $\mu \neq 0$, le spectre de $H(\alpha, \mu)$ est un ensemble de Cantor.*

THÉORÈME 2.4 (*Formule d'Aubry, cf. [AA, TH, AMS]*). *Si α est irrationnel, et si $\mu \neq 1$ la mesure de Lebesgue de $H(\alpha, \mu)$ est égale à $4|1 - \mu|$.*

THÉORÈME 2.5 (*cf. [SI]*). *Il existe $\mu_c > 0$ tel que si $\mu \geq \mu_c$, le spectre de $H(\alpha, \mu)$ est un ensemble de Cantor pour presque tout α .*

3. ASPECTS ALGÈBRIQUES

3.1. L'introduction des unitaires U_1 et U_2 dans le §1 permet de donner une description de l'opérateur de Harper et de ses dérivés en termes purement algébriques. En effet, un très grand nombre de résultats concernant le spectre comme ensemble ne dépendent que de la relation de commutation (2), et pas du tout du modèle considéré. Cette remarque a été exploitée dans [RB2, BE3] de façon systématique.

Désignons par $\mathcal{P}_\alpha$ l'algèbre complexe engendrée par deux unitaires U_1 et U_2 satisfaisant aux relations de commutation (2). Si nous posons

$$(4) \quad W(m) = U_1^{m_1} U_2^{m_2} e^{-i\pi \alpha m_1 m_2},$$

pour $m = (m_1, m_2) \in \mathbf{Z}^2$, cette algèbre est formée des polynômes de la forme

$$(5) \quad a = \sum_{m \in \mathbf{Z}^2} a_m W(m),$$

où $a_m \in \mathbf{C}$ seront appelés “coefficients de Fourier” de a et $a_m = 0$ sauf pour un nombre fini de termes. Les coefficients de Fourier du produit ab sont donnés par la formule

$$(6) \quad (ab)_m = \sum_{m' \in \mathbf{Z}^2} a_{m'} b_{m-m'} e^{i\pi \alpha m' \wedge m},$$

où l’on a posé $m' \wedge m = m'_1 m_2 - m'_2 m_1$, tandis que ceux de l’adjoint a^* de a sont donnés par:

$$(7) \quad (a^*)_m = \overline{a_{-m}}.$$

L’opérateur identité est alors donné par la série de Fourier $1_m = \delta_{m,0}$, tandis que les unitaires U_1 et U_2 sont donnés par les séries $\delta_{m,(1,0)}$ et $\delta_{m,(0,1)}$ respectivement.

La construction même de $\mathcal{P}_\alpha$ montre que cette algèbre est isomorphe à $\mathcal{P}_{\alpha+1}$, ce qui nous permettra de restreindre l’ensemble des valeurs de α à l’intervalle $[0, 1]$.

Nous pourrions aussi voir α comme une variable, en considérant, pour chaque compact I de $\mathbf{R}$, l’algèbre $\mathcal{P}(I)$ obtenue comme précédemment au moyen des séries de Fourier finies dont les coefficients sont maintenant des fonctions continues de la variable α sur I , et dont le produit et l’adjoint sont définis par les formules (6) et (7). Nous retrouvons l’algèbre $\mathcal{P}_\alpha$ si $I = \{\alpha\}$.

Il existe alors un homomorphisme naturel $\eta_\alpha : \mathcal{P}(I) \rightarrow \mathcal{P}_\alpha$ qui consiste à évaluer les coefficients de Fourier au point α .

Nous définissons une forme linéaire τ par la formule:

$$(8) \quad \tau(a) = a_0,$$

qui prend ses valeurs dans l’espace $\mathcal{C}(I)$ des fonctions continues sur I . Cette forme est une “trace”, c’est-à-dire qu’elle satisfait aux propriétés suivantes:

$$(9) \quad \tau(a^*a) \geq 0, \quad \tau(ab) = \tau(ba), \quad a, b \in \mathcal{P}(I).$$

3.2. Une représentation π de $\mathcal{P}(I)$ est la donnée d'un espace de Hilbert $\mathcal{H}_\pi$ et d'un homomorphisme noté $\pi : \mathcal{P}(I) \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_\pi)$ tel que $\pi(a^*) = \pi(a)^*$. Ici $\mathcal{B}(\mathcal{H}_\pi)$ désigne l'algèbre des opérateurs bornés sur $\mathcal{H}_\pi$. Nous ne distinguerons pas entre deux représentations unitairement équivalentes. Dans ce cas les classes d'équivalence unitaire forment un ensemble noté $\mathbf{Rep}(\mathcal{P}(I))$. Une norme de C^* -algèbre est alors définie sur $\mathcal{P}(I)$ par:

$$(10) \quad \|a\| = \sup_{\pi \in \mathbf{Rep}(\mathcal{P}(I))} \|\pi(a)\|.$$

L'algèbre $\mathcal{A}(I)$ est obtenue comme la complétion de $\mathcal{P}(I)$ par rapport à cette norme. Il est alors facile de montrer que la trace, l'homomorphisme η_α ainsi que toutes les représentations de $\mathcal{P}(I)$ se prolongent par continuité de façon unique à $\mathcal{A}(I)$ [BE3].

Une famille de représentations π est dite "fidèle" si l'intersection des noyaux de chacun de ses éléments est réduit à zéro. Si la famille est réduite à un élément π , nous dirons que π est fidèle. L'intérêt de telles familles réside dans la propriété suivante:

LEMME 3.1 (cf. [PED]). *Soit $\{\pi_s\}_{s \in S}$, une famille fidèle de représentations de $\mathcal{A}(I)$ indexée par un ensemble S . Alors, pour tout $a \in \mathcal{A}(I)$, le spectre de a est la fermeture de la réunion sur S des spectres des opérateurs $\pi_s(a)$, à savoir :*

$$(11) \quad Sp(a) = \overline{\bigcup_{s \in S} Sp(\pi_s(a))}.$$

De plus, la norme de a est donnée par:

$$(12) \quad \|a\| = \sup_{s \in S} \|\pi_s(a)\|.$$

Les représentations suivantes de $\mathcal{A}_\alpha$ sont les plus utilisées.

(i)- La représentation de champ magnétique définie au §1, $\pi_{M,\alpha}$, agit sur l'espace $L^2(\mathbf{R}^2)$ par les relations :

$$(13) \quad \pi_{M,\alpha}(U_i) = e^{iK_i}, \quad K_i = \frac{\delta}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} - eA_i \right),$$

où e est la charge de l'électron, $\mathbf{A} = (A_1, A_2)$ est le potentiel vecteur donné par le champ magnétique B au moyen de la relation $\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1 = B = \text{const.}$, et où δ est une longueur représentant la période du réseau considéré. Dans ce cas, α est le rapport du flux dans la cellule carrée de côté δ et du quantum de flux h/e (cf. éq. (2)). Cette représentation est fidèle [BE3].

(ii)- π_{GNS} est définie sur l'espace $l^2(\mathbf{Z}^2)$ par les relations (où $\psi \in l^2(\mathbf{Z}^2)$) :

$$(14) \quad \pi_{GNS}(U_i)\psi(m) = e^{i\pi\alpha e_i \wedge m} \psi(m - r_i), \quad m \in \mathbf{Z}^2,$$

où $r_i (i = 1, 2)$ sont les deux vecteurs de la base canonique de $\mathbf{Z}^2$. π_{GNS} aussi, est fidèle. Le nom de GNS se rapporte à Guelfand-Naïmark-Segal, qui associèrent à tout état sur une C^* -algèbre une représentation naturelle [PED]. Dans notre cas, l'état considéré est la trace. En outre cette représentation correspond à ce que les physiciens appellent "la représentation de liaison forte", dans laquelle les porteurs de charge sont considérés comme des particules sur le réseau $\mathbf{Z}^2$ au lieu de se mouvoir dans l'espace continu.

(iii)- La famille $\{\pi_{\alpha,x}; x \in \mathbf{R}/\mathbf{Z}\}$ agit sur l'espace $l^2(\mathbf{Z})$ par (où $\varphi \in l^2(\mathbf{Z})$) :

$$(15) \quad \pi_{\alpha,x}(U_1)\varphi(n) = \varphi(n-1), \quad \pi_{\alpha,x}(U_2)\varphi(n) = e^{2i\pi(x-n\alpha)}\varphi(n), \quad n \in \mathbf{Z},$$

En particulier, l'opérateur de Mathieu discret $H(\mu)$ (cf. eq. (3)) agit dans cette représentation comme suit:

$$(16) \quad \pi_{\alpha,x}(H(\mu))\varphi(n) = \varphi(n+1) + \varphi(n-1) + 2\mu \cos 2\pi(x - n\alpha)\varphi(n).$$

C'est sous cette forme que Harper [HA] avait donné initialement son équation dans le cas $\mu = 1$. Cette famille est fidèle pour tout α . De plus, si α est irrationnel, chacune des représentations $\pi_{\alpha,x}$ est fidèle, ce qui n'est plus vrai par contre, si α est rationnel.

(iv)- La représentation de Weyl $\pi_{W,\alpha}$ est définie sur l'espace $L^2(\mathbf{R})$ au moyen de (où $f \in L^2(\mathbf{R})$) :

$$(17) \quad \pi_{W,\alpha}(U_1)f(x) = f(x + 2\pi\alpha), \quad \pi_{W,\alpha}(U_2)f(x) = e^{ix}f(x), \quad x \in \mathbf{R}.$$

Cette représentation est fidèle. C'est en fait celle qu'utilisent les experts du calcul pseudo-différentiel comme Helffer et Sjöstrand.

Les représentations précédentes fournissent aussi des représentations de $\mathcal{A}(I)$ en les composant avec l'homomorphisme η_α . Les familles obtenues en faisant varier α dans I sont, dans chacun des cas, des familles fidèles de représentations de $\mathcal{A}(I)$.

3.3. L'algèbre $\mathcal{A}_\alpha$ possède une structure assez simple, qui la rend particulièrement intéressante à utiliser. Dans les cas où α est irrationnel, nous obtenons la :

PROPOSITION 3.2 (cf. [BE3]). *Si α est un nombre irrationnel, l'algèbre $\mathcal{A}_\alpha$ est simple. En particulier, toute représentation de $\mathcal{A}_\alpha$ est fidèle.*

Dans le cas pour lequel $\alpha = p/q \in \mathbf{Q}$, où p et q sont des entiers premiers entre eux, nous obtenons la représentation suivante :

PROPOSITION 3.3 (cf. [BE3]). *Si $\alpha = p/q \in \mathbf{Q}$, où p et q sont des entiers premiers entre eux, l'algèbre $\mathcal{A}_\alpha$ est isomorphe à la sous-algèbre des fonctions continues définies sur le 2-tore $\mathbf{T}^2 = (\mathbf{R}/\mathbf{Z})^2$ à valeurs dans l'espace des matrices complexes $q \times q$, engendrée par les deux fonctions suivantes*

$$(18) \quad U_i(k) = e^{ik_i} u_i, \quad k = (k_1, k_2) \in \mathbf{T}^2, \quad i = 1, 2,$$

où les u_i sont des matrices unitaires $q \times q$ définies par

$$(19) \quad u_i^q = \mathbf{1}, \quad u_1 u_2 = e^{2i\pi \frac{p}{q}} u_2 u_1.$$

Nous pouvons choisir par exemple pour les u_i les matrices suivantes:

$$(20a) \quad u_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 \dots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \dots & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(20b) \quad u_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \dots & 0 & 0 \\ 0 & e^{2i\pi \frac{p}{q}} & 0 \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{2i\pi \frac{2p}{q}} \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 \dots & e^{2i\pi \frac{(q-2)p}{q}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \dots & 0 & e^{2i\pi \frac{(q-1)p}{q}} \end{pmatrix}.$$

Cette représentation est particulièrement pratique pour le calcul numérique du spectre d'un élément H de $\mathcal{A}_{p/q}$. En effet, H devient une fonction de la variable k à valeurs matricielles. Pour chacune des valeurs de k , il suffit donc de diagonaliser une matrice de dimension finie, ce que l'on peut faire relativement aisément avec un ordinateur usuel. Chaque valeur propre définit ainsi une fonction $E_r(k)$ de k ($r \in [0, q-1]$), et le spectre s'obtient en prenant la réunion de toutes ces valeurs possibles lorsque k varie dans le 2-tore. En fait, l'image de ce tore par E_r définit ce que l'on appelle une "bande", dont il suffit de connaître les extrémités. Dans la plupart des cas étudiés dans la littérature, cette remarque permet de réduire le calcul à la diagonalisation d'un nombre relativement petit de matrices. C'est par exemple le cas pour le modèle de Harper sur un triangle (cf. Fig. 2).

3.4. Il est remarquable de constater, au vu des figures 1 & 2 montrant des spectres obtenus pour des valeurs rationnelles de α par la méthode précédente, que lorsque α varie, ceux-ci prennent une forme fractale qui laisse à penser que dans le cas irrationnel, il s'agirait d'ensembles de Cantor. Cependant pour que cette conclusion soit correcte, il est nécessaire de s'assurer que le cas irrationnel est bien approximé par les cas rationnels. L'approche algébrique permet en effet de montrer que le spectre d'un élément de $\mathcal{A}(I)$ est continu par rapport à α :

PROPOSITION 3.4 (cf. [BE3]). *Si H est un élément normal de $\mathcal{A}(I)$ (i.e. $HH^* = H^*H$), les bords des gaps du spectre de $\eta_\alpha(H)$ sont des fonctions continues de α .*

Nous verrons dans les paragraphes suivants que l'étude du spectre pour des valeurs de α proches de zéro est possible par une analyse semi-classique.

Comme l'avait remarqué dès 1981 Sokoloff [SO], il est possible d'en déduire la forme du spectre au voisinage de n'importe quel rationnel. En effet, l'utilisation de la substitution de Peierls, d'une part et de la représentation de l'algèbre, dans le cas rationnel par des matrices dépendant de $k \in \mathbb{T}^2$ conduit à la représentation suivante de $\mathcal{A}_{p/q+\alpha}$:

PROPOSITION 3.5 (cf. [BE9]). *L'algèbre $\mathcal{A}_{p/q+\alpha}$ est isomorphe à la sous-algèbre de $\mathcal{A}_\alpha \otimes M_q$ engendrée par les éléments*

$$(21) \quad \hat{U}_i = U_i \otimes u_i, \quad i = 1, 2.$$

Ce dernier résultat permet donc de réaliser une analyse semi-classique au voisinage des rationnels, le prix à payer étant cependant d'avoir à travailler avec des opérateurs matriciels.

4. ANALYSE SEMI-CLASSIQUE

4.1. Le Groupe de Renormalisation, selon Wilkinson

Dans sa thèse [WI] Wilkinson a développé de façon systématique une méthode fondée sur l'analyse semi-classique, qui permet de comprendre pourquoi le spectre de Hofstadter se reproduit à toute échelle. Nous remarquons en effet que la relation de commutation (2) n'est autre qu'un cas particulier des relations de Weyl, à condition de remplacer la constante de Planck $\hbar$ par $2\pi\alpha$. Ainsi la limite $\alpha \rightarrow 0$ n'est-elle autre que la limite semi-classique. Examinons tout d'abord la situation dans laquelle α est petit.

Suivant alors la méthode de Bohr & Sommerfeld, nous considérerons d'abord le problème classique associé. Pour cela, soit I un intervalle de la forme $[0, \varepsilon]$ et soit $H \in \mathcal{A}(I)$ un élément auto-adjoint. Pour simplifier l'étude nous supposerons que la série de Fourier de H décroît aussi rapidement qu'il sera nécessaire, et que les coefficients de Fourier sont des fonctions de α aussi régulières qu'il sera nécessaire. Nous associons à H la

fonction de Hamilton classique $\mathcal{H}$ définie sur le 2-tore $\mathbf{T}^2$ par:

$$(22) \quad \mathcal{H}(k) = \sum_{m \in \mathbf{Z}^2} H_m e^{ik \cdot m},$$

où les composantes de k seront désignées par $k = (x, \xi)$ pour se conformer aux notations de Hörmander utilisées en analyse micro-locale, tandis que $k \cdot m = xm_1 + \xi m_2$ désigne le produit scalaire. Nous obtenons donc un problème de Mécanique Classique à un seul degré de liberté. L'espace des phases est ici $\mathbf{R}^2$, mais la périodicité de $\mathcal{H}$ par rapport aux deux variables (x, ξ) permet de ramener l'étude à une seule cellule de période. Par conséquent, les orbites classiques dans l'espace des phases sont les composantes connexes des courbes de niveau de $\mathcal{H}$ qui forment des ensembles invariants par les translations multiples entières de 2π . Dans le cas du modèle de Harper (avec $\mu = 1$ par conséquent), $\mathcal{H}(x, \xi) = \cos x + \cos \xi$ et les courbes de niveau sont de deux sortes (cf. Fig.3) :

- (i)- Les orbites homotopes à un cercle centré sur un translaté de $(0, 0)$ ou de (π, π) . Ces orbites entourent donc un maximum ou un minimum respectivement.
- (ii)- Les séparatrices, à savoir les droites de la forme $x \pm \xi = \pi \pmod{2\pi}$. Ces droites se croisent aux points de selle de $\mathcal{H}$, situés en $(0, \pi)$ et $(\pi, 0) \pmod{2\pi}$. Les orbites sont alors les différents segments reliant deux points de selle voisins sur l'une de ces droites.

Remarquons que cette structure ne change pas à homotopie près si l'on considère un élément H_1 proche de H , à condition que les symétries de H soient préservées, à savoir par exemple, la symétrie de rotation de $\frac{\pi}{2}$ dans l'espace des phases. Pour un autre modèle la structure des orbites peut devenir plus compliquée. Nous ne nous en occuperons pas ici.

La quantification de Bohr-Sommerfeld consiste à ne retenir que les orbites de la forme Γ satisfaisant à la formule :

$$(23) \quad \oint_{\Gamma} \xi dx = (n + \frac{1}{2})2\pi\alpha.$$

La valeur de $\mathcal{H}$ sur une telle orbite dépend de n et sera notée E_n qui sera désignée sous le nom d'énergie propre. Elle ne dépend pas de la composante

connexe considérée, en raison de l'invariance par translation. Ces valeurs sont alors les valeurs propres de l'opérateur H à l'ordre le plus bas en puissances de α . La méthode WKB usuelle permet alors de calculer un développement asymptotique de ces valeurs propres en puissances de α , ce qui permet de les connaître modulo $O(\alpha^\infty)$.

Un cas particulier intéressant concerne les orbites proches des maxima ou des minima (fonds de puits). Elles sont en effet presque des cercles, ce qui permet de calculer explicitement le développement des énergies propres sous la forme

$$(24) \quad E_n = \mathcal{H}(k_0) \mp 2\pi\alpha\left(n + \frac{1}{2}\right)\sqrt{\det \partial_i \partial_j \mathcal{H}(k_0)} + O(\alpha^2),$$

où le choix du signe $\mp$ est $+$ pour un minimum et $-$ pour un maximum, tandis que k_0 désigne la position de l'extremum considéré, et n est un entier, le nombre quantique.

Dans la représentation de Weyl, chacune de ces orbites donne lieu à une fonction propre $\phi_{n,m}$ dans $L^2(\mathbf{R})$, où $m \in \mathbf{Z}^2$ numérote le centre de la cellule de période dans laquelle se trouve l'orbite considérée, si bien que chaque valeur propre E_n est infiniment dégénérée. Cette fonction propre approchée peut aussi être calculée par la méthode WKB. En raison de l'effet tunnel, l'intégrale de recouvrement $(\phi_{n,m}|\phi_{n,m'})$ décroît comme $e^{-const. \frac{|m-m'|}{\alpha}}$, si bien que la famille $\{\phi_{n,m}; m \in \mathbf{Z}^2\}$ est orthonormale modulo une erreur exponentiellement petite en α .

En raison même de l'effet tunnel entre les orbites de même énergie situées dans différentes cellules de période, la dégénérescence de la valeur propre E_n sera levée, ce qui va donner lieu à une bande $\mathcal{B}_n$ dont la largeur est de l'ordre de la perturbation créée par cet effet tunnel, donc exponentiellement petite en α . Chacune de ces bandes permet de définir un projecteur spectral de H par la formule de Cauchy :

$$(25) \quad \Pi_n = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{(z - H)},$$

expression dans laquelle $\mathcal{C}$ désigne un cercle dans le plan complexe, centré sur E_n de rayon suffisamment grand pour entourer la bande $\mathcal{B}_n$ et suffisamment petit pour exclure les autres bandes ainsi calculées. Ce projecteur

peut être calculé modulo une erreur exponentiellement petite en α comme le projecteur sur l'espace engendré par la famille $\{\phi_{n,m}; m \in \mathbb{Z}^2\}$. Il s'ensuit que l'on peut aussi calculer la restriction de H à cette bande en considérant la matrice de H dans la base $\{\phi_{n,m}; m \in \mathbb{Z}^2\}$. Supposant que nous sommes capables en outre, de contrôler les erreurs commises à chaque étape de ce raisonnement, nous obtenons une description de chaque bande ainsi définie par un opérateur effectif H_n donné par une matrice infinie indexée par les points du réseau $\mathbb{Z}^2$ numérotant les différentes cellules de période.

Une des remarques essentielles de Wilkinson consiste à montrer que cette matrice est de la forme :

$$(26) \quad H_{n;m,m'} = \tilde{E}_n(\alpha) \delta_{m,m'} + C(\alpha) e^{i\pi\alpha' m \wedge m'} \tilde{H}_{n;m'-m},$$

où $\tilde{E}_n(\alpha) = E_n + O(\alpha^2)$, α' est la partie fractionnaire de $\frac{1}{\alpha}$, $C(\alpha)$ est une constante exponentiellement petite en α , et $\tilde{H}_m$ est une suite décroissant exponentiellement vite par rapport à $\frac{m}{\alpha}$. Nous reconnaissons là l'expression de la matrice d'un élément $\tilde{H}$ de l'algèbre $\mathcal{A}_{\alpha'}$ dans la représentation GNS. De plus, le Hamiltonien de sous-bande hérite des mêmes symétries que H , et si α est petit, on peut approximer $\tilde{H}$, modulo une erreur exponentiellement petite en α , par les éléments de matrices correspondant aux plus proches voisins, si bien qu'à cette approximation, $\tilde{H}$ est de nouveau égal au modèle de Harper. Ainsi le Hamiltonien de chacune des sous-bandes ainsi calculées est-il donné par:

$$(27) \quad \tilde{H}_n = H(\alpha', \mu = 1) + O(e^{-\frac{const.}{\alpha}}),$$

montrant que le spectre de H dans la sous-bande se calcule comme celui de H à condition de "renormaliser" les paramètres de transfert (ici la constante $C(\alpha)$) et le flux normalisé α , et de modifier cet opérateur par une perturbation exponentiellement petite en α .

Comme nous l'avons indiqué dans les précédents paragraphes, il est possible de généraliser cette stratégie à l'analyse du spectre près d'un rationnel p/q . Pour cela, la constante de Planck effective est maintenant égale à la différence $\delta = \alpha - p/q$, et le Hamiltonien classique associé est maintenant une fonction de $\mathcal{H}(x, \xi)$ à valeurs dans l'espace des matrices

$q \times q$. Dans le cas du modèle de Harper, cette matrice est tridiagonale, ce qui rend sa diagonalisation familière à n'importe quel physicien. Les valeurs propres $e_i(x, \xi)$ de cette matrice, à savoir les fonctions de bandes, vont alors jouer un rôle analogue à celui de la fonction de Hamilton classique précédente. En particulier, les “fonds de puits” pour ces fonctions, correspondent aux bords de la bande en question. Il faut cependant ajouter une correction dite de “courbure”, car les vecteurs propres de cette matrice définissent un fibré en droite périodique au dessus de l'espace des phases, ou, si l'on préfère, un fibré au dessus du 2-tore. Ce fibré est en général non trivial, et ses classes de Chern ont pu être reliées à la quantification de la conductivité Hall [TKN2]. Ce calcul conduit à un développement explicite des énergies propres près des bords de bandes, analogue à la formule (24) sous la forme [BE1, BE2, BE3, HS3, RB2]:

$$(28) \quad \begin{aligned} E_{i,n} = e_i(k_0) \mp 2\pi \left| \alpha - \frac{p}{q} \right| \left(n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\det \partial_i \partial_j e_i(k_0)} + \sigma 2\pi \left(\alpha - \frac{p}{q} \right) \\ + O\left(\left(\alpha - \frac{p}{q} \right)^2 \right), \end{aligned}$$

où le choix du signe $\mp$ est $+$ pour un minimum et $-$ pour un maximum, tandis que k_0 désigne la position de l'extremum considéré, que n est un nombre quantique, et que σ désigne l'expression suivante

$$(29) \quad \sigma = \text{tr} \left(\mathcal{P}_i(k_0) \{ \partial_x \mathcal{P}_i(k_0) \partial_\xi \mathcal{H}(k_0) - \partial_\xi \mathcal{P}_i(k_0) \partial_x \mathcal{H}(k_0) \} \right),$$

où $\mathcal{P}_i(x, \xi)$ désigne le projecteur spectral associé à la valeur propre $e_i(x, \xi)$ de la matrice $\mathcal{H}(x, \xi)$. Cette formule, appelée “formule de Wilkinson-Rammal” a été démontrée et généralisée dans [BE1, BE2, HS2, RB2] au cas d'un Hamiltonien quelconque dans l'algèbre $\mathcal{A}(I)$.

4.2. La contribution d'Helffer et Sjöstrand

Les arguments de Wilkinson précédemment exposés forment l'armature de la stratégie de Helffer et Sjöstrand pour une preuve mathématiquement rigoureuse. Deux difficultés sont néanmoins passées sous silence dans cette argumentation: la première concerne le contrôle des erreurs en terme de

la constante de Planck effective, la seconde concerne le calcul du spectre au voisinage des séparatrices. La contribution d'Helffer et Sjöstrand est d'avoir comblé ces deux lacunes.

L'analyse microlocale est un outil mathématique qui permet de résoudre la première difficulté. Et c'est là un apport méthodologique essentiel de la contribution de Helffer et de Sjöstrand. Dans leur premier travail [HS1], ils examinent le cas α petit. Leur second article [HS2] concerne l'analyse près d'un rationnel.

La seconde difficulté est en fait rédibitoire. En effet divers travaux numériques ont permis de se rendre compte que l'essentiel du spectre est concentré au voisinage de l'énergie nulle, énergie qui correspond précisément aux orbites classiques proches de la séparatrice. Dans leurs deux premiers articles sur le papillon de Hofstadter [HS1, HS2], Helffer et Sjöstrand avaient évité la discussion de ce point délicat. C'est dans leur troisième article [HS3] qu'ils fournissent une solution à ce problème, s'inspirant en cela d'un travail ancien d'Azbel [AZ]. Ce résultat est sans doute la partie la plus originale, y compris par rapport aux travaux numériques ou théoriques des physiciens. En effet, l'analyse WKB près des séparatrices avait échappé jusqu'alors à la plupart des travaux antérieurs. Même les résultats d'Azbel ne sont pas exempts d'imprécisions sur ce point.

Pour résumer, donnons les résultats les plus importants auxquels on aboutit par cette méthode:

THÉORÈME 4.1 (*cf. [HS3]*). *Il existe un entier $C \geq 1$ tel que si α est un irrationnel admettant une décomposition en fraction continue $[a_1, a_2, \dots, a_n, \dots]$ pour laquelle $a_n \geq C, \forall n \geq 1$, le spectre de $H(\alpha, \mu = 1)$ est un ensemble de Cantor de mesure nulle.*

Ce théorème ne fournit pas la totalité des résultats. En effet, on peut aussi extraire de ce travail de nombreuses autres informations quant à la structure du spectre. C'est ainsi que la décomposition en fraction continue de α permet de définir une hiérarchie entre les bandes comme suit: étant donné une bande au voisinage d'une valeur propre approchée du type Bohr-Sommerfeld, on peut lui associer un opérateur renormalisé qui est soit du

type “Harper perturbé près de $\alpha = 0$ ”, soit du type “Harper perturbé près de $\alpha = 1/2$ ” et dans lequel il faut changer α en $\alpha' = \{1/\alpha\}$ (ici $\{x\}$ désigne la partie fractionnaire de x). Cet opérateur possède le même spectre que le Hamiltonien précédent sur cette bande. On peut donc décrire la hiérarchie complètement en itérant cette règle. Par ailleurs, chaque sous-bande de Bohr-Sommerfeld est séparée de ses voisines par une distance d’ordre $O(\alpha)$.

Notons cependant que ce problème est exemplaire en ceci qu’il permet de bien cerner les limites de la méthode. En effet, les erreurs ne sont jamais contrôlées que par des expressions implicites dont on ne connaît que le comportement asymptotique à petite constante de Planck. Pour pouvoir conclure, il est nécessaire de supposer que cette constante est “suffisamment petite”. Or la stratégie du groupe de renormalisation est récursive, en particulier, en passant d’une étape de la récurrence à la suivante, le flux renormalisé α change en $\alpha' = \{1/\alpha\}$, expression dans laquelle $\{x\}$ désigne la partie fractionnaire de x . Si l’on itère cette relation, on engendre le développement en fraction continue de α , à savoir:

$$(30) \quad \alpha = \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \dots \frac{1}{a_n + \dots}}}.$$

Sachant qu’à chaque étape il est nécessaire de supposer que α est “suffisamment petit” pour pouvoir passer à l’étape suivante, ceci revient à prouver le résultat désiré pour des α dont la fraction continue satisfait à:

$$(31) \quad \exists C > 0, \quad a_n \geq C, \quad \forall n \geq 1.$$

Or, si $C > 1$, cette condition restreint l’ensemble des valeurs de α pour lesquelles le résultat s’applique à un ensemble de mesure de Lebesgue nulle! De plus, sont exclus de ce résultat la plupart des nombres auxquels se sont intéressés les physiciens, comme par exemple le nombre d’or. En d’autres termes, l’analyse micro-locale fournit certainement une approche qualitativement correcte et puissante, mais elle ne permet pas encore de fournir un résultat quantitativement optimal.

Parmi les conséquences de cette analyse, deux effets spectaculaires décrits soit dans les articles originaux [HS3], soit dans des articles ultérieurs [GH] permettent d'en illustrer la puissance prédictive. Le premier est la résolution d'un paradoxe issu d'une part du théorème 2.2, et d'autre part de la prédiction de Wilkinson selon laquelle le Hamiltonien effectif décrivant chaque sous bande est à nouveau celui de Harper. En effet, le théorème 2.2 prédit que si α est rationnel, tous les gaps sont ouverts sauf le gap central à énergie nulle. Soit donc p/q un rationnel de fraction continue $[a_1, a_2, \dots, a_n]$, et désignons par p'/q' un rationnel proche, de fraction continue $[a_1, a_2, \dots, a_n, 2b]$, où $b \geq 1$. Considérons une bande $\mathcal{B}$ qui ne contienne pas l'énergie nulle dans le spectre du modèle de Harper correspondant à $\alpha = p/q$, et soit $\mathcal{B}(\alpha)$ la bande obtenue par déformation de $\mathcal{B}$ lorsque α varie dans un petit voisinage de p/q . Le flux normalisé correspondant, apparaissant dans le Hamiltonien effectif, est égal au réel positif α' tel que $\alpha = [a_1, a_2, \dots, a_n + \alpha']$. Ainsi pour le nombre p'/q' nous obtenons $\alpha' = 1/2b$. $\mathcal{B}' = \mathcal{B}(p'/q')$ se décompose donc en $2b$ sous-bandes disjointes en vertu du théorème 2.2. Comme ce nombre est rationnel avec un dénominateur pair, le gap central existe et est ouvert. D'autre part si le Hamiltonien effectif était exactement égal à celui de Harper, en vertu du même théorème, le gap central de cette sous bande devrait être fermé. La solution de ce paradoxe apparent se trouve dans le fait que le Hamiltonien effectif sur $\mathcal{B}'$ diffère du modèle de Harper par une perturbation exponentiellement petite en α' . Ainsi, bien que le gap central soit ouvert, sa largeur est d'ordre $O(e^{-const.2b})$! C'est bien en effet ce que révèle le calcul numérique illustré par la Fig.4 (cf.[GH]). Notons cependant que Elliott et al. [CEY] ont prouvé, par la méthode algébrique, que la largeur de chaque gap, dans le cas $\alpha = p/q$ est minorée par $C.8^{-q}$ où C est une constante numérique explicite.

L'autre effet concerne le gap central. Du fait du théorème 2.2, le gap central pour $\alpha = p/q$ lorsque q est pair, est fermé. Ceci signifie que deux bandes alors se touchent, et une analyse plus détaillée montre que ce contact se fait, dans le modèle de Harper, en un seul point de la cellule de période, et que ce point est conique. L'analyse semi-classique nécessite de tenir compte de cette dégénérescence accidentelle, en traitant un problème de matrices

2×2 . Il s'avère que la forme normale de cette matrice est un opérateur de Dirac dont les valeurs propres sont explicitement calculables (cf. [HS2] et aussi [RB2]). Les niveaux d'énergie correspondants sont alors de l'ordre de $\sqrt{|\alpha - p/q|}$ ce que l'on peut voir sur la Fig.1.

5. CONSTRUCTION DU HAMILTONIEN RENORMALISÉ

5.1. Problème à un puits

La première étape de l'analyse consiste à isoler chaque puits. Nous considérons par exemple le cas d'un maximum, celui d'un minimum se traitant de façon analogue.

Rappelons que si $f(x, \xi)$ est une fonction régulière bornée sur $\mathbf{R}^2$, on définit un opérateur $\hat{f}$ sur $L^2(\mathbf{R})$ par la quantification de Weyl comme suit:

$$(32) \quad \hat{f}\psi(x) = \int_{\mathbf{R}^2} \frac{dy d\xi}{4\pi^2\alpha} f\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) e^{\frac{i\xi(x-y)}{2\pi\alpha}} \psi(y), \quad \psi \in L^2(\mathbf{R}).$$

Par ailleurs nous définirons le quantifié gaussien $\check{f}$ par la formule:

$$(33a) \quad (\check{f}\psi)(x) = \int_{\mathbf{R}} \check{f}(x, y)\psi(y)dy, \quad \psi \in L^2(\mathbf{R}),$$

où

$$(33b) \quad \check{f}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbf{R}^2} \frac{dx' d\xi}{4\pi^2\alpha} f(x', \xi) e^{-\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2}{2}} e^{\frac{i\xi(x-y)}{2\pi\alpha}}.$$

Le quantifié gaussien d'une fonction positive f est un opérateur positif microlocalisé dans le support de f .

Soit alors $E > 0$ l'énergie au voisinage de laquelle nous cherchons à calculer le spectre, et soit $\epsilon > 0$ tel que $E - 2\epsilon > 0$. Soit aussi $m \in \mathbf{Z}^2$ l'index numérotant le puits considéré. On désigne par χ une fonction régulière de (x, ξ) s'annulant si $(x, \xi) \notin [-\pi, \pi]^2$ ou si $(x, \xi) \in [-\pi, \pi]^2$ et $\mathcal{H}(x, \xi) \leq E - 2\epsilon$, valant 1 sur l'ensemble des points $(x, \xi) \in [-\pi, \pi]^2$ pour lesquels $\mathcal{H}(x, \xi) \geq E - \epsilon$ et telle que $0 \leq \chi(x, \xi) \leq 1$. On pose alors $\chi_m(x, \xi) = \chi(x - 2\pi m_1, \xi - 2\pi m_2)$. L'opérateur $\check{\chi}_m$ désigne alors le quantifié

gaussien de χ_m . Remarquons que les opérateurs unitaires $T(m)$ ($m \in \mathbb{Z}^2$) donnés par:

$$(34) \quad T(m)\psi(x) = e^{im_2(x-2\pi\frac{m_1}{2})/\alpha} \psi(x - 2\pi m_1),$$

satisfont $T(m)\check{\chi}_0 T(m)^{-1} = \check{\chi}_m$ et commutent aux opérateurs U_i , $i = 1, 2$ dans la représentation de Weyl. Ils quantifient par conséquent les translations correspondant aux multiples entiers de 2π .

Cette construction nous conduit à définir le Hamiltonien de puits H_m par la formule:

$$(35) \quad H_m = H - (E - \epsilon) \sum_{m'; m' \neq m} \check{\chi}_{m'}$$

Cet opérateur possède une symbole inférieur à $E - \epsilon$ sauf précisément dans le puits m . De plus, grâce à la quantification gaussienne de χ , $H_m \leq (E - \epsilon)1$ modulo un opérateur compact. Ainsi, la partie du spectre de H_m contenue dans l'intervalle $[E - \frac{\epsilon}{2}, E + \frac{\epsilon}{2}]$ est-elle formée d'un nombre fini de valeurs propres de multiplicité finie. Une manière de calculer ces valeurs propres consiste à utiliser l'approximation WKB, mais pour montrer que l'on obtient ainsi tout le spectre dans la région considérée, Helffer et Robert [HR] ont été amenés à construire, en utilisant les techniques du calcul symbolique, une fonction $f(E, \alpha)$ telle que, dans l'intervalle $[E - \frac{\epsilon}{2}, E + \frac{\epsilon}{2}]$, et pour α suffisamment petit, l'opérateur $f(H_m, \alpha)$ ait même spectre que le Hamiltonien de l'oscillateur harmonique. Notons qu'un résultat analogue a été trouvé par [BV] dans le cadre du formalisme algébrique, où l'on construit perturbativement, mais de façon uniforme par rapport à α , un unitaire qui conjugue les deux opérateurs. Notons aussi que ceci est génériquement faux si le nombre de degrés de liberté n'est pas égal à un. L'avantage de cette méthode, est qu'elle fournit une construction explicite des quasi-modes correspondants, au moyen des vecteurs propres de l'oscillateur harmonique.

5.2. Traitement de l'effet tunnel entre puits

La technique de “comblement des puits” précédemment exposée, avait été auparavant développée pour traiter l'effet tunnel dans l'équation de

Schrödinger $H = P^2/2 + V$ où V est un potentiel à deux puits dégénérés que nous indexerons par $\pm$. Dans ce dernier cas, l'effet tunnel produit des niveaux d'énergie de la forme $E_{n,\pm} = E_n \pm \Delta E$, où E_n est l'énergie que nous trouverions si les deux puits étaient découplés, tandis que $\Delta E \approx e^{-S/\alpha}$ où S est l'action tunnel entre les deux orbites classiques d'énergie E_n . Les fonctions propres des deux Hamiltoniens $H_{\pm}$ que l'on construit en comblant les puits, correspondant aux valeurs propres situées dans l'intervalle d'énergie considéré, sont égales dans chaque puits, à celles de H , modulo une erreur d'ordre $O(e^{-d/\alpha})$ où $d \approx S$ est "la distance d'Agmon" entre les orbites d'énergie $E + O(\epsilon)$ de deux puits voisins (la distance d'Agmon est définie par la métrique $ds^2 = \sqrt{(V(x) - E)_+} dx^2$). Le calcul de l'écart entre les deux sous-niveaux créés par effet tunnel, ne requiert la connaissance précise des fonctions propres qu'à mi-chemin entre les deux puits, c'est-à-dire en un point où la distance d'Agmon est $d/2$. Le calcul de cet écart au moyen des fonction propres des Hamiltoniens H_+ & H_- fournit par conséquent le résultat exact, modulo une erreur $O(e^{-2d/\alpha})$. Ainsi, par cette méthode, nous sommes sûr de trouver correctement le terme dominant de l'écart d'énergie dû à l'effet tunnel.

Il s'avère que dans le cas d'un Hamiltonien proche de celui de Harper, on peut généraliser la notion de distance d'Agmon dans l'espace des phases. C'est là un point technique à mettre à l'actif du travail d'Helffer et Sjöstrand [HS1]. Nous savons donc, par cette méthode, que chaque puits m fournit des fonctions propres approchées $\varphi_{n,m}$, correspondant à des valeurs propres $E_n \in [E - \frac{\epsilon}{2}, E + \frac{\epsilon}{2}]$ indépendantes de m en raison de l'invariance de H par les translations multiples de 2π . De plus nous savons que la distance entre ces valeurs propres est $O(\alpha)$ et que le spectre de H ne diffère de cet ensemble de valeurs propres que par une erreur d'ordre $O(e^{-d/\alpha})$ due à l'effet tunnel entre les puits, où d est la distance d'Agmon entre deux puits voisins. En outre, les produits scalaires $(\varphi_{n,m} | \varphi_{n,m'})$ sont dominés par $O(e^{-d(m,m')/\alpha})$ si $d(m,m')$ est la distance d'Agmon entre les puits m et m' . Pour chaque n , la famille $\{\varphi_{n,m}; m \in \mathbb{Z}^2\}$ est donc presque orthonormale. Le procédé de Schmidt permet alors de former une base orthonormale $\{\hat{\varphi}_{n,m}; m \in \mathbb{Z}^2\}$ à partir de cette famille, qui ne diffère de la précédente que par une erreur exponentiellement petite en α .

On peut alors construire un nouvel opérateur $H_n(E)$, dépendant analytiquement de E dans un voisinage $O(\alpha)$ de E_n , agissant dans le sous-espace engendré par cette famille, et tel que le spectre de H dans ce voisinage soit donné par l'ensemble des E' telles que $E' \in Sp(H_n(E'))$. Pour cela, Helffer et Sjöstrand utilisent la “méthode de Grušin” qui consiste à considérer le nouveau problème suivant:

sur l'espace $L^2(\mathbf{R}) \oplus l^2(\mathbf{Z}^2)$, on considère l'opérateur $\tilde{H}$ donné par l'expression :

$$(36a) \quad \tilde{H} = \begin{pmatrix} H - E & R_+ \\ R_- & 0 \end{pmatrix},$$

où

$$(36b) \quad R_- \psi_m = (\hat{\varphi}_{n,m} | \psi), \quad \psi \in L^2(\mathbf{R}),$$

et

$$(36c) \quad R_+ u = \sum_{m \in \mathbf{Z}^2} u_m \hat{\varphi}_{n,m}.$$

Si l'inverse de $\tilde{H}$ est désigné par:

$$(37) \quad \tilde{H}^{-1} = \begin{pmatrix} Q & Q_+ \\ Q_- & Q_{-+} \end{pmatrix},$$

alors $H - E$ admet un inverse borné si et seulement si Q_{-+} possède la même propriété, et nous obtenons dans ce cas:

$$(38) \quad (H - E)^{-1} = Q - Q_+(Q_{-+})^{-1}Q_-, \quad (Q_{-+})^{-1} = -R_+(H - E)^{-1}R_-.$$

Le Hamiltonien effectif est donc donné par la matrice infinie Q_{-+} . Comme dans le raisonnement de Wilkinson, l'analyse des symétries montre que cette matrice peut être vue comme la matrice d'un élément $H_{eff,n}(E)$ de l'algèbre $\mathcal{A}_{\alpha'}$ dans la représentation GNS, auquel nous associerons son représentant $H_n(E)$ dans la représentation de Weyl, de façon à pouvoir réutiliser le calcul symbolique à l'étape suivante.

Comme nous l'avions déjà indiqué, la technique de “comblement des puits” nous permet de connaître avec précision le terme dominant de l'effet tunnel, qui consiste à ne retenir que les termes de plus proches voisins dans la matrice Q_{-+} , lesquels s'écrivent alors comme dans la formule (26) et conduisent donc à un nouvel Hamiltonien de Harper dont on aurait simplement renormalisé le paramètre de transfert t , donné par l'effet tunnel dominant. Ainsi $t = O(e^{-S/\alpha})$, où S est ici une action tunnel. Les autres termes sont des corrections exponentiellement petites en α relativement à ce terme dominant.

5.3. Traitement de la bande centrale

La construction précédente est valide tant que les orbites classiques ne sont pas trop proches de la séparatrice. Si nous nous contentions de n'examiner le spectre que dans les régions d'énergie éloignées de la bande centrale, le schéma de renormalisation nous obligerait à exclure à chaque étape un petit intervalle au centre de chaque sous-bande. Les sous-bandes dans cette partie du spectre sont de taille exponentiellement petite en α , ce qui, par récurrence implique que ce sous ensemble spectral est de dimension fractale nulle. Or les calculs numériques indiquent que la dimension fractale du spectre devrait être égale à $1/2$. C'est donc que l'essentiel de la densité spectrale est concentrée précisément dans la région ainsi exclue. Il est donc indispensable de comprendre ce qui s'y passe.

Pour y parvenir, Helffer et Sjöstrand construisent comme précédemment des quasi-modes micro-localisés près des séparatrices. Il faut pour cela conjuguer le Hamiltonien H (au moins au sens du calcul symbolique) à la forme normale dans un voisinage des points de selle. Cette forme normale peut être prise soit sous la forme $\xi^2 - x^2$ soit sous la forme $x\xi$ au niveau des symboles. C'est ce qu'indique le lemme ci-dessous, dans lequel h est un paramètre petit qui joue le rôle de la constante de Planck, et $D = -i\frac{\partial}{\partial x}$:

Lemme 5.1 (cf. [HS3]). Soit $H(x, hD, h)$ un opérateur pseudo-différentiel formellement analytique, formellement autoadjoint et d'ordre 0. Supposons que son symbole principal $\mathcal{H}$ admette un point de selle non dégénéré en

$(0, 0)$ tel que $\mathcal{H}(0, 0) = 0$. Alors il existe un symbole analytique réel $F(t, h) \sim \sum_0^\infty f_j(t)h^j$ défini pour $|t|$ petit, ainsi qu'un opérateur Fourier intégral analytique et formellement unitaire U provenant d'une transformation canonique classique définie dans un voisinage de $(0, 0)$ et transformant ce point en lui même, tels que

$$(39) \quad U^*F(H, h)U = H_0 = \frac{1}{2}(xhD + hDx).$$

L'équation $(H_0 - \alpha)u = 0$ possède quatre solutions particulières données par $u_\pm(x) = \Theta(\pm x)|x|^{-\frac{1}{2}+i\alpha}$, où Θ est la fonction qui s'annule sur les réels négatifs et vaut 1 sur les réels positifs, ainsi que les transformées de Fourier $v_\pm$ de $u_\pm$. Toute solution est alors combinaison linéaire soit des $u_\pm$ soit des $v_\pm$ et il existe par conséquent une matrice de "monodromie" permettant de passer d'une représentation à l'autre.

Revenant à l'opérateur H que nous étudions, et qui est égal au modèle de Harper modulo une erreur exponentiellement petite en α , l'invariance par rotation de $\frac{\pi}{2}$ de son symbole impose automatiquement que les points de selle soient situés en $(0, \pi)$ ou en $(\pi, 0)$ (modulo 2π). En chacun de ces points, arrivent donc deux morceaux de séparatrices correspondant à la variété stable du flot hamiltonien engendré par le symbole $\mathcal{H}$ de H , et deux autres morceaux correspondant à la variété instable. Les deux premiers sont associés aux solutions $u_\pm$ les autres à $v_\pm$ de l'équation $(H - E)\psi = 0$ obtenues au moyen du Lemme 5.1 et du résultat précédent. Notons au passage que ces quatre solutions se déduisent les unes des autres par une rotation de $\frac{\pi}{2}$ dans l'espace des phases. Soit alors $\chi \in C_0^\infty$ égale à 1 dans un voisinage du point de selle $(0, \pi)$, et s'annulant dans le complémentaire du disque de rayon $3\sqrt{2}\pi/4$ centré sur ce point. On peut alors normaliser les solutions de sorte que $(i[H, \check{\chi}]u_+|u_+) = 1$, ce qui permet d'introduire la fonction $f = i[H, \check{\chi}]u_+$ ainsi que la famille $f_{m,j}$ obtenues en pivotant f de $j\pi/2$ (ce qui se fait en utilisant la transformation de Fourier) puis en la translatant de $2\pi m$ (au moyen des opérateurs $T(m)$ définis par la formule (34)) dans l'espace des phases.

On considère alors le problème de Grušin associé aux opérateurs $R_\pm$

avec $R_+ : L^2(\mathbf{R}) \rightarrow l^2(\mathbf{Z}^2 \times \{1, 3\})$ défini par:

$$(40a) \quad R_+ \psi_{m,j} = (f_{m,j} | \psi), \quad m \in \mathbf{Z}^2, j \in \{1, 3\}, \quad \psi \in L^2(\mathbf{R}),$$

et $R_- : l^2(\mathbf{Z}^2 \times \{2, 4\}) \rightarrow L^2(\mathbf{R})$ donné par:

$$(40b) \quad R_- u = \sum_{\mathbf{Z}^2 \times \{2,4\}} u_{m,j} f_{m,j}, \quad u \in l^2(\mathbf{Z}^2 \times \{2, 4\}),$$

qui fournira une matrice 2×2 d'opérateurs effectif $H_{j,j'}, j \in \{1, 3\}, j' \in \{2, 4\}$. Comme précédemment, nous pouvons alors interpréter cette matrice d'opérateurs comme représentant un élément de l'algèbre $\mathcal{A}_{\alpha'} \otimes M_2(\mathbf{C})$ dans la représentation GNS, permettant, en revenant à la représentation de Weyl, de définir l'opérateur renormalisé comme une matrice 2×2 dont les coefficients sont des opérateurs pseudo-différentiels provenant de notre algèbre.

De même qu'auparavant les termes qui ne correspondent pas aux plus proches voisins seront exponentiellement petit relativement aux autres, si bien que nous obtenons ici un Hamiltonien effectif sous forme d'une petite perturbation des termes de plus proches voisins.

Il nous reste donc à connaître la forme canonique prise par un tel opérateur. Notons que le symbole $\mathcal{H}_{eff}$ est maintenant une fonction sur l'espace des phases à valeurs dans l'espace des matrices 2×2 . On se ramène donc à une situation analogue au cas de l'analyse semi-classique au voisinage d'un rationnel. Deux possibilités se présentent selon que les deux fonctions de bande de cette matrice ont des images disjointes ou non. Dans le premier, on se ramène à deux Hamiltoniens proches de celui de Harper, dans l'algèbre $\mathcal{A}_{\alpha'}$. Dans l'autre cas, les symétries du problème et le fait que le Hamiltonien initial soit proche du modèle de Harper, implique que les deux bandes se touchent selon un point conique. On peut alors se ramener au cas du modèle de Harper près de $\alpha = 1/2$.

Nous voyons donc que si l'on veut fermer la récurrence, il faut traiter aussi le cas pour lequel le Hamiltonien initial H est lui même une matrice 2×2 dont le symbole possède deux fonctions de bandes se rejoignant en un point conique. C'est ce que Helffer et Sjöstrand appellent "le cas

complètement dégénéré". L'étude dans ce cas impose un peu plus de combinatoire, mais son traitement n'apporte pas de difficultés nouvelles autres que des questions techniques que nous nous abstenons d'aborder ici.

Nous n'irons pas plus loin sur les détails de la stratégie, mais on peut se convaincre que le passage d'une étape du groupe de renormalisation à la suivante ne nécessite l'analyse que d'un nombre fini petit de cas typiques.

BIBLIOGRAPHIE

- [AL] S. ALEXANDER - *Superconductivity of networks. A percolation approach to the effect of disorder*, Phys. Rev., **B27**, (1983), 1541-1557.
- [AA] S. AUBRY, G. ANDRE - *Analyticity breaking and the Anderson localization in incommensurate lattices*, Ann. Israeli Phys. Soc., **3**, (1980), 133.
- [AU] S. AUBRY - *The new concept of transition by breaking of analyticity in crystallographic models*, Solid State Sci., **8**, (1978), 264.
- [AMS] J. AVRON, P.H.M. van MOUCHE, B. SIMON - *On the Measure of the Spectrum for the Almost Mathieu Operator*, Preprint CALTECH, 1990, Commun. Math. Phys..
- [AZ] Ya. AZBEL - *Energy spectrum of a conduction electron in a magnetic field*, Sov. Phys. JETP, **19(3)**, (1964), 634.
- [BE1] J. BELLISSARD - *C*-Algebras in Solid State Physics: 2D electrons in a uniform magnetic field*, in *Operator Algebras and Application*, Vol.2, D.E.Evans & M.Takesaki Eds., Cambridge University Press, (1988).
- [BE2] J. BELLISSARD - *Almost Periodicity in Solid State Physics and C*-Algebras*, in *The Harald Bohr Centenary*, C.Berg & B.Fuglede Eds., The Danish Royal Acad. Sci., **42:3**, (1989), 35-75.
- [BE3] J. BELLISSARD - *The Rotation Algebra*, Lecture donnée à l'école d'été de Nantes, Juin 1991, en préparation.
- [BKS] J. BELLISSARD, C. KREFT, R. SEILER - *Analysis of the spectrum of a particle on a triangular lattice with two magnetic fluxes by algebraic and numerical methods*, J. Phys., **A24**, (1991), 2329-2353.
- [BES] J. BELLISSARD, B. SIMON - *Cantor Spectrum for the Almost Mathieu Equation*, J. Funct. Anal., **48**, (1982), 408-419.

- [BV] J. BELLISSARD, M. VITTOT - *Heisenberg's picture and non commutative geometry in the semi-classical limit in quantum Mechanics*, Ann. Inst. Henri Poincaré, **52**, (1990), 175-235.
- [CH] W.G. CHAMBERS - Phys Rev., **A140**, (1965), 135-143.
- [CEY] M.D. CHOI, G. ELLIOTT, K. YUI - *Gauss polynomials and the rotation Algebra*, Inventiones Math., (1991).
- [GE] P.G. de GENNES - *Diamagnétisme de grains supraconducteurs près d'un seuil de percolation*, C.R. Acad. Sci., **B292**, (1981), 9-12;
Champ critique d'une boucle supraconductrice ramifiée, C.R. Acad. Sci., **B292**, (1981), 279-282.
- [GH] J.P. GUILLEMENT, B. HELFFER, P. TRETON - *Walk inside Hofstadter's butterfly*, J. Phys. France, **50**, (1989), 2019-2058.
- [HA] P.G. HARPER - *Single Band Motion of Conduction Electrons in a Uniform Magnetic Field*, Proc.Phys. Soc. London, **A68**, (1955), 874.
- [HR] B. HELFFER, D. ROBERT - *Calcul fonctionnel de la transformée de Mellin et applications*, J. Funct. Anal., **53**, (1983).
- [HS0] B. HELFFER, J. SJÖSTRAND - *Microlocal Analysis for the Periodic Magnetic Schrödinger Equation and related questions*, C.I.M.E Lectures (1989), in Lecture Notes in Math..
- [HS1] B. HELFFER, J. SJÖSTRAND - *Analyse semi-classique pour l'équation de Harper (application à l'étude de l'équation de Schrödinger avec champ magnétique)*, Mémoires de la S.M.F., (1989).
- [HS2] B. HELFFER, J. SJÖSTRAND - *Analyse semi-classique pour l'équation de Harper II. Comportement semi-classique près d'un rationnel*, Mémoires de la S.M.F n°40, **118**, (1990), 1-139.
- [HS3] B. HELFFER, J. SJÖSTRAND - *Semi-classical analysis for Harper's equation III*, Mémoires de la S.M.F., (1991).
- [HO] D.R. HOFSTADTER - *Energy levels and wave functions of Bloch electrons in a rational or irrational magnetic field*, Phys. Rev., **B14**, (1976), 2239.
- [KL] K. von KLITZING, G. DORDA, M. PEPPER - *Realization of a resistance standard based on fundamental constants*, Phys. Rev. Letters, **45**, (1980), 494-497.

- [LA] L. LANDAU - *Diamagnetismus der Metalle*, Z. für Phys., **64**, (1930), 629-637.
- [LU] J.M. LUTTINGER - *The Effect of a Magnetic Field on Electrons in a Periodic Potential*, Phys. Rev., **84**, (1951), 814.
- [MO] P. van MOUCHE - *The coexistence problem for the discrete Mathieu operator*, Comm. Math. Phys., **122**, (1989), 23-34.
- [PCR] B. PANNETIER, J. CHAUSSY, R. RAMMAL - *Experimental Determination of the (H, T) Phase Diagram of a Superconducting Network*, J. de Physique Lettres **44**, (1983), L853-L858.
- [PCRV] B. PANNETIER, J. CHAUSSY, R. RAMMAL, J.C. VILLEGIER - *Experimental Fine Tuning of the Frustration: 2D Superconducting Networks in a Magnetic Field*, Phys. Rev. Letters, **53**, (1984), 1845-1848.
- [PED] G. PEDERSEN - *C*-Algebras and their automorphism groups*, Academic Press, London, New-York, (1979).
- [PE] R. PEIERLS - *Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen*, Z. für Phys., **80**, (1933), 763-791.
- [RB1] R. RAMMAL, J. BELLISSARD - *Ground State of the Fermi Gas in 2D Lattices with a Magnetic Field: New Exact Results*, Europhys. Letters, **13**, (1990), 205-210.
- [RB2] R. RAMMAL, J. BELLISSARD - *An algebraic semi-classical approach to Bloch electrons in a magnetic field*, J. Phys. France, **51**, (1990), 1803-1830.
- [SI] Ya.G. SINAI - *Anderson localization for the one dimensional difference Schrödinger operator with quasiperiodic potentials*, in *Proc. Int. Congress Math. Phys. Marseille 1986*, World Scientific Pub. Co., Singapore, (1987), pp. 870-903.
- [SO] J.B. SOKOLOFF - *Unusual band structure, wave functions and electrical conductance in crystals with incommensurable periodic potentials*, Phys. Reports, **126**, (1985), 189-244.
- [TH] D. THOULESS - *Bandwidths for a quasiperiodic tight-binding model*, Phys. Rev., **B28**, (1983), 4272-4276.
- [TKN2] D. THOULESS, M. KOHMOTO, M. NIGHTINGALE, M. den NIJS - *Quantized Hall Conductance in two dimensional periodic potential*, Phys. Rev. Letters, **49**, (1982), 405.

- [WI] M. WILKINSON - *Critical Properties of Electron Eigenstates in Incommensurate Systems*, Proc. Roy. Soc. London, **A391**, (1984), 305-350.
- [ZA] J. ZAK - *Magnetic Translation Group*, Phys. Rev., **A134**, (1964), 1602-1607; *Magnetic Translation Group II: Irreducible Representations*, Phys. Rev., **A134**, (1964), 1607-1611.

Jean BELLISSARD

Université Paul Sabatier

Laboratoire de Physique Quantique - IRSAMC

U.R.A. 505 du C.N.R.S.

118, route de Narbonne

F-31062 TOULOUSE CEDEX, FRANCE

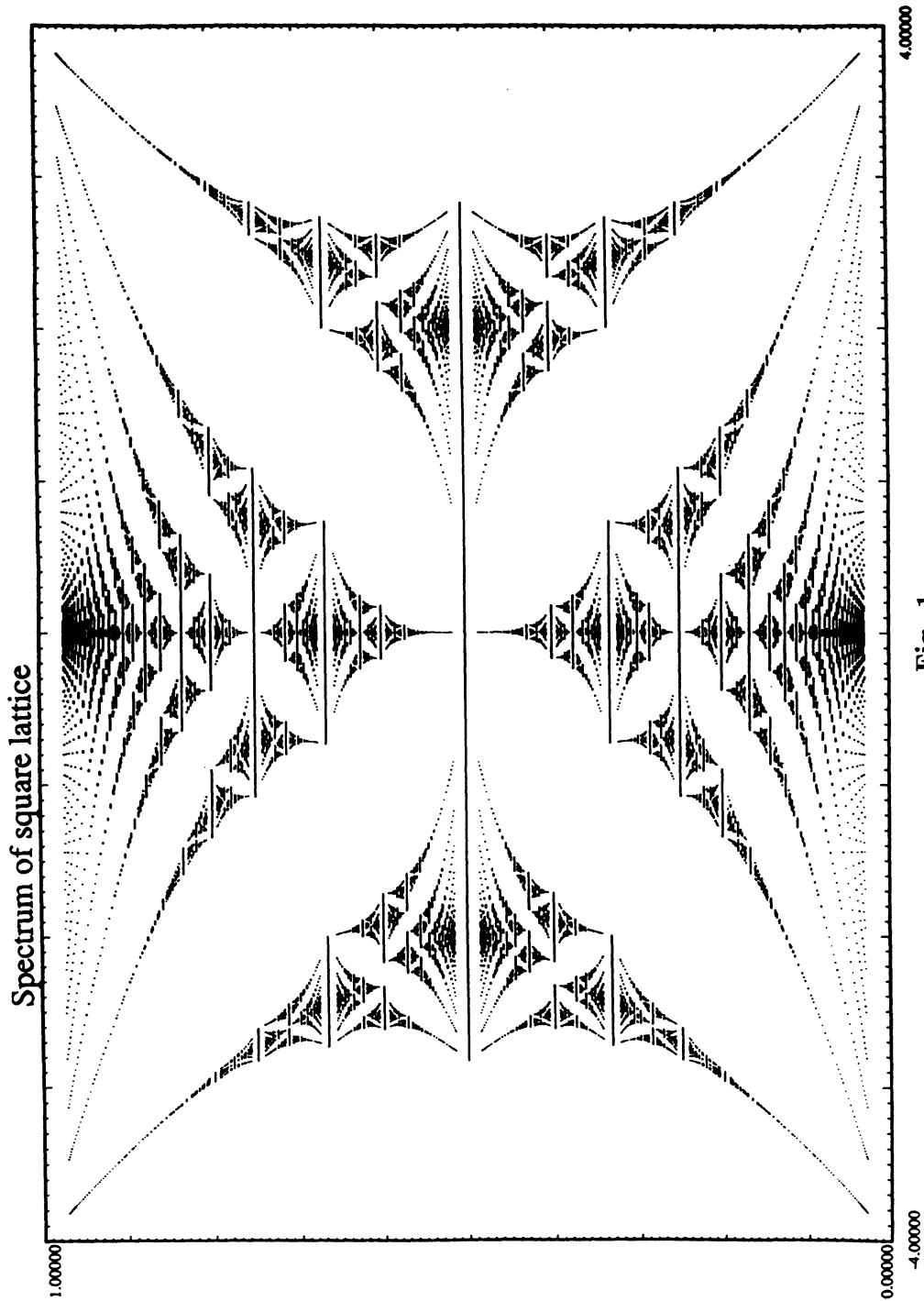


Fig. 1

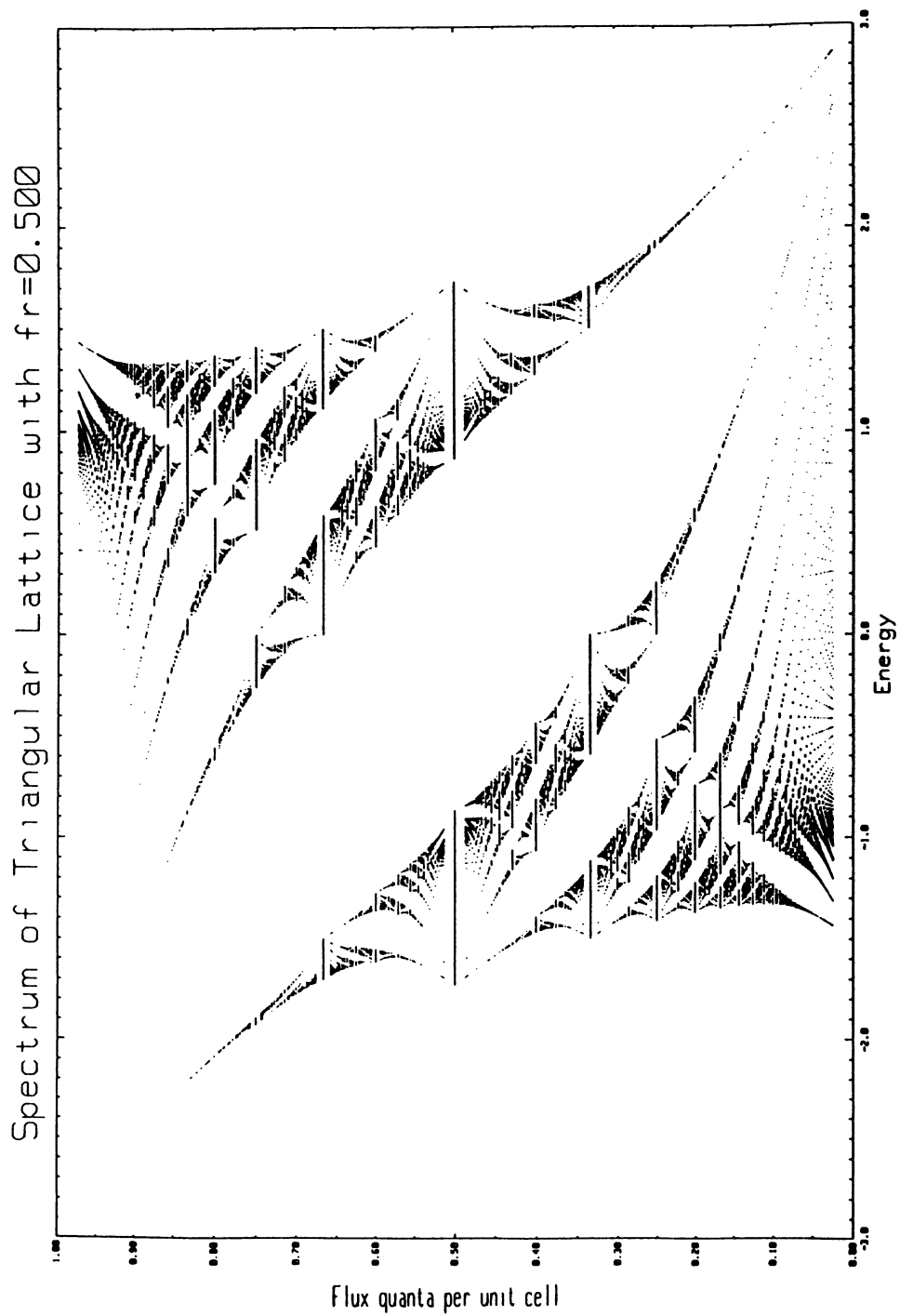
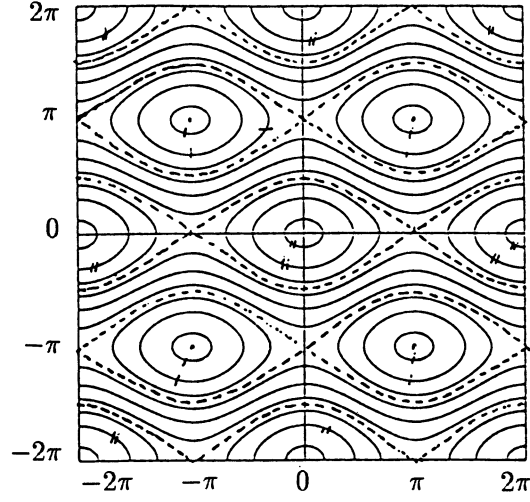


Fig. 2

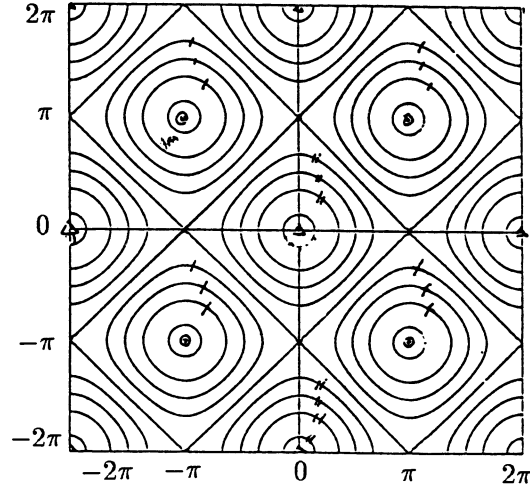


$- : -(1 - \mu) < E < (1 - \mu)$

$+ : -(1 + \mu) < E < -(1 - \mu)$

$\# : 1 - \mu \leq E \leq 1 + \mu$

Pour $\mu = 1$



$- : E = 0 \quad \Theta : E = -2 \quad + : -2 < E < 0 \quad \Delta : E = 2 \quad \# : 0 < E < 2$

Fig. 3

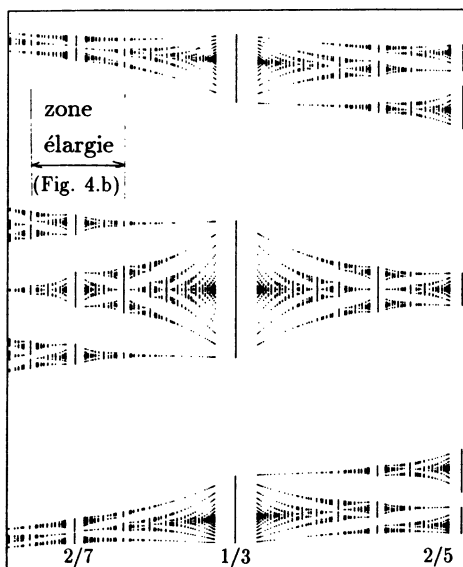


Fig. 4.a

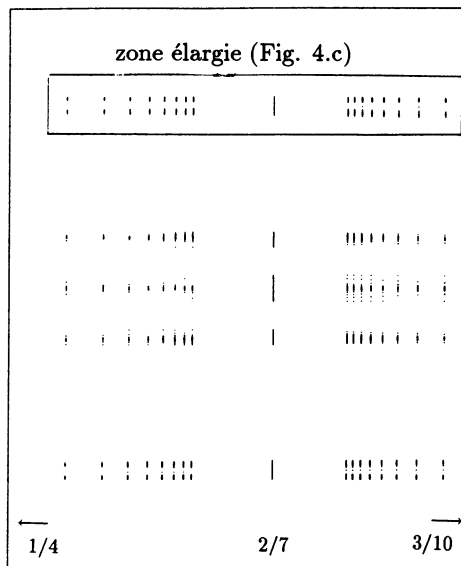


Fig. 4.b

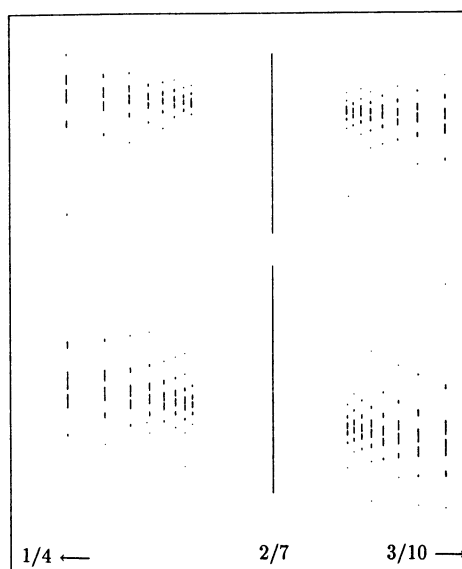


Fig. 4.c

- Spectrum for α near $1/(3 + 1/2)$, upper zoom, $\mu = 1$, partial sequence $\alpha = 1/(3 + 1/(2 + 1/q))$.