Séminaire Équations aux dérivées partielles - École Polytechnique

B. Helffer
J. Sjöstrand

Opérateurs de Schrödinger avec champs magnétiques faibles et constants

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1988-1989), exp. nº 12, p. 1-11
<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1988-1989____A12_0>

CENTRE
DE
MATHEMATIQUES

Unité de Recherche Associée D 0169

ECOLE POLYTECHNIQUE

F-91128 PALAISEAU Cedex (France)
Tél. (1) 69.41.82.00
Télex ECOLEX 601.596 F

Séminaire 1988-1989

ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

OPERATEURS DE SCHRÖDINGER AVEC CHAMPS MAGNETIQUES FAIBLES ET CONSTANTS

B. HELFFER et J. SJÖSTRAND

Exposé n°XII

28 Février 1989

Opérateurs de Schrödinger avec champs magnétiques faibles et constants.

par

B.Helffer, et J.Sjöstrand

Dépt. de Mathématiques
Université de Nantes
2, Chemin de la Houssinière
F-44072 Nantes, FRANCE
et: URA CNRS 758

Dépt. de Mathématiques, Bat.425
Université de Paris Sud
F-91405 Orsay, FRANCE
et: URACNRS D0760

Le but de cet exposé est de décrire un traitement mathématique de la substitution de Peierls et de l'effet de de Haas-van Alphen. A part des travaux classiques de Peierls [P] et de Onsager [O], nous avons été inspirés par plusieurs travaux mathématiques, tels que: Avron-Simon [ASi], Nenciu [N1-3], Bellissard [B1,2], Guillot-Ralston-Trubowitz [GuRT]. (On donnera aussi quelques références à la littérature physique.) Nous avons appris l'utilité des fonctions de Wannier dans [B1,2],[N1-3], et dans notre travail précédent, [HS1], nous avons utilisé de telles fonctions dans le cas où l'opérateur de Schrödinger périodique (avec champ magnétique zero) admet une bande simple dans son spectre. Dans ce cas, nous obtenions une réduction de l'étude du spectre et de la densité d'états à celle des quantités correspondantes pour un certain Hamiltonien effectif, qui est un opéraeur pseudodifférentiel "obtenu par la substitution de Peierls". Dans [B1,2],[N1-3] des réductions à une matrice infinie étaient données, et de telles réductions jouent un rôle comme étape intermédiaire dans notre approche. Dans [GuRT] on trouve des constructions de certaines solutions approchées (BKW) de l'équation de Schrödinger magnétique avec l'effet de de Haas-van Alphen comme motivation, ainsi que quelques résultats partiels concernant le spectre. Dans ce travail on voit bien apparaitre les valeurs propres du problème de Floquet avec champ 0.

Plus récemment nous avons réussi à éliminer l'hypothèse de "bande simple". Les fonctions de Wannier habituelles disparaissent alors, mais subsistent sous une forme modifiée dans le choix de certains opérateurs auxiliaires. Dans cet exposé on ce place dans ce cadre plus général. Voir [HS2] pour plus de détails.

Soit $V\in C^\infty(\mathbb{R}^n;\mathbb{R})$ Γ-périodique, où $\Gamma=\bigoplus\limits_1^n \mathbb{Z}e_j$, et les e_j forment une base de $\mathbb{R}^n$: $V(x+\gamma)=V(x)$ pour tout $\gamma\in\Gamma$. Soient $A_1,..,A_n\in C^\infty(\mathbb{R}^n;\mathbb{R})$, et supposons que le "champ magnétique",

$B=d(\Sigma A_j dx_j)$ soit constant sur $\mathbb{R}^n$. On s'intéresse alors au spectre et à la densité d'états pour l'opérateur de Schrödinger magnétique (l'o.S.m):

(1) $$P_{B,V}=\Sigma(D_{x_j}+A_j(x))^2+V(x).$$

Par conjugaisons par des facteurs exponentielles, on voit immédiatement que si B est donnée, des choix différents de A mènent à des opérateurs unitairement équivalents. Comme on suppose que $B=\frac{1}{2}\Sigma b_{j,k}dx_j\wedge dx_k$, avec $b_{j,k}=-b_{k,j}$ constant, on peut prendre $A_k(x)=\frac{1}{2}\Sigma b_{j,k}x_j$.

Dans le cas $B=0$ on peut employer la théorie de Bloch-Floquet: Soit $\Gamma^*=\{\gamma^*\in\mathbb{R}^{n*};\ \gamma\gamma^*\in 2\pi\mathbb{Z}\}$ le réseau dual, et posons $\mathcal{H}_\theta=\{u\in L^2_{loc}(\mathbb{R}^n);\ u(x+\gamma)=e^{i\gamma\theta}u(x)$ pour tous $\gamma\in\Gamma\}$, où $\theta\in\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*$ (ce qui est un espace de Hilbert muni du produit scalaire L^2 standard sur un domaine fondamental de Γ). L'opérateur U, défini par: $Uu(x,\theta)=\sum_{\Gamma} u(x-\gamma)e^{i\gamma\theta}$ est unitaire de $L^2(\mathbb{R}^n)$ sur $\int^{\oplus}\mathcal{H}_\theta d\theta$ et l'inverse est donné par

$$U^{-1}v(x)=(\mathrm{Vol}(\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*))^{-1}\int v(x,\theta)d\theta.$$

$P=P_{0,V}$ est alors unitairement équivalent à $\int^{\oplus}P_\theta d\theta$, où P_θ est l'opérateur essentiellemnt autoadjoint, obtenu en faisant agir $P_{0,V}$ au sens des distributions sur $\mathcal{H}_\theta$. On sait aussi que le spectre de $P_{0,V}$ est purement absolument continu et de la forme $\bigcup_0^\infty J_k$, où $J_k=\{E_k(\theta);\ \theta\in\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*\}$. Ici $E_0(\theta)\le E_1(\theta)\le..$ sont les valeurs propres de P_θ. Dans le cas d'une bande simple: J_{k_0}, (disjoint de J_k quand $k\neq k_0$) la substitution de Peierls dit que si B est petit et pour des énergies proches de J_{k_0}, l'o.S.m. est "bien approché" par l'opérateur pseudodifférentiel: $E_{k_0}(D_{x_1}+A_1(x),..,D_{x_n}+A_n(x))$.

On fixe maintenant $z_0\in\mathbb{R}$. On veut étudier le spectre et la densité d'états près de l'énergie z_0, quand B est petit. On commence par le cas $B=0$:

Proposition 1. Il existe un entier $N\ge 0$, et des fonctions analytiques, $\varphi_j:\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*\to\mathcal{H}_\theta$, pour $j=1,..,N$, tels que pour tout $\theta\in\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*$ et pour tout z dans un voisinage complexe de z_0, l'opérateur

$$\mathcal{P}(z,\theta)=\begin{matrix}P_\theta-z & R_-\\ R_+ & 0\end{matrix}\ :\ \mathcal{H}_\theta^2\times\mathbb{C}^N\to\mathcal{H}_\theta\times\mathbb{C}^N$$

est bijectif. Ici $\mathcal{H}_\theta^2=\mathcal{H}_\theta\cap H^2_{loc}(\mathbb{R}^n)$, et $R_\pm$ sont définis par $R_+u(j)=(u|\varphi_j)_{\mathcal{H}_\theta}$, $R_-=R_+^*$.

Si z_0 appartient à une bande simple, J_{k_0} , alors on peut prouver que $\mathrm{Ker}(P_\theta - E_{k_0}(\theta))$ est un fibré trivial sur $\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*$ (Voir [N1],[HS1]), et il en résulte que l'on peut prendre $N=1$, et $\varphi_1(\theta)=\varphi(\theta)\in\mathrm{Ker}(P_\theta - E_{k_0}(\theta))$ avec $\|\varphi\|=1$.

Soit

$$\mathcal{E}(z,\theta)=\begin{pmatrix} E(z,\theta) & E_+(z,\theta) \\ E_-(z,\theta) & E_{-+}(z,\theta) \end{pmatrix}$$

l'inverse de $\mathcal{P}(z,\theta)$. (Dans le cas d'une bande simple on obtient $E_{-+}(z,\theta)=z-E_{k_0}(\theta)$, avec le choix de $R_\pm$ que l'on vient d'indiquer.) Observons que z appartient au spectre de P_θ, $\sigma(P_\theta)$ si et seulement si 0 appartient au spectre de $E_{-+}(z,\theta)$. Ceci résulte des formules:

$$(P_\theta - z)^{-1}=E(z,\theta)-E_+(z,\theta)(E_{-+}(z,\theta))^{-1}E_-(z,\theta),$$

$$E_{-+}(z,\theta)^{-1}=-R_+(P_\theta - z)^{-1}R_-.$$

Rajoutons maintenant un champ magnétique constant, B. Pour un m convenable, soient $l_1(x,\xi),..,l_n(x,\xi)$ des formes linéaires et indépendantes sur $T^*\mathbb{R}^m=\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}^{m*}$ telles que,

(2) $\{l_j,l_k\}=\langle B,e_j\wedge e_k\rangle$, for $j,k=1,..,n$.

Ici $\{a,b\}$ désigne le crochet de Poisson: $\Sigma(\partial_{\xi_j}a)(\partial_{x_j}b)-(\partial_{x_j}a)(\partial_{\xi_j}b)$, pour $a=a(x,\xi)$, $b=b(x,\xi)$ dans $C^\infty(T^*\mathbb{R}^m)$. Par exemple, on peut toujours prendre $m=n$ et $l_j(x,\xi)=\xi_j+A_j(x)$ (ce qui correspond à la substitution de Peierls classique). Parfois on peut aussi avoir $m<n$. (Ainsi l'opérateur de Harper correspond aux choix $m=1$ quand $n=2$, dans un contexte légèrement différent.)

Soit $\theta=(\theta_1,..,\theta_n)$, où $\theta_j=\langle\theta,e_j\rangle$, et pour ces coordonnées (duales) sur $\mathbb{R}^{n*}$, définissons $l(x,\xi)=(l_1(x,\xi),..,l_n(x,\xi))$ comme un point de $\mathbb{R}^{n*}$. Observons que $\langle B,e\wedge f\rangle=\{\langle e,l(.)\rangle\langle f,l(.)\rangle\}$ pour tous $e,f\in\mathbb{R}^n$. Nous avons alors:

Théoreme 2. Il existe une fonction C^∞, $g=g(B,z;\theta)$ à valeurs dans les matrices $N\times N$, définie dans un voisinage de $\{0\}\times\{z_0\}\times(\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*)$ dans $\mathbb{R}^{n(n-1)/2}\times\mathbb{C}\times(\mathbb{C}^{n*}/\Gamma^*)$, holomorphe en z,θ, telle que pour z,B dans un voisinage de $(z_0,0)$ dans $\mathbb{C}\times\mathbb{R}^{n(n-1)/2}$, nous avons l'équivalence:

(3) $\qquad z\in\sigma(P_{B,V})\Leftrightarrow 0\in\sigma(\mathrm{Op}^W(g(B,z;l(x,\xi))))$.

De plus, $g(0,z;\theta)=E_{-+}(z,\theta)$.

Ici "σ" = "spectre de", et si a appartient à une classe convenable de symboles sur $T^*\mathbb{R}^m$, $\mathrm{Op}^W(a)$ désigne la quantification de Weyl:

(4) $\quad Op^W(a)u(x)=\iint e^{i(x-y)\eta}\, a((x+y)/2,\eta)u(y)\, dyd\eta/(2\pi)^m,\ u\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^m).$
Nous désignerons souvent par la même lettre, le symbole et son quantifié de Weyl.

Esquisse de la démonstration. On retourne d'abord au cas $B=0$, et on pose $\Phi_{0,j}(x)=U^{-1}(\varphi_j)(x)$, $\Phi_{\gamma,j}(x)=\Phi_{0,j}(x-\gamma)$. Dans le cas d'une bande simple, et avec les choix indiqués apres la Proposition 1, les fonctions $\Phi_\gamma=\Phi_{\gamma,1}$ forment une base orthonormale du sous-espace spectral associé à $P_{0,V}$, J_{k_0}. Ce sont les fonctions de Wannier, utilisées par Bellissard [B1,2] et Nenciu [N1-3]. Dans le cas général, l'analyticité de φ_j par rapport à θ, entraine que $\Phi_{0,j}$ est à décroissance exponentielle: Il existe une constante $C>0$ telle que, $|\Phi_{0,j}(x)|\le Ce^{-|x|/C}$ pour tous $x\in\mathbb{R}^n$, et nous avons le même type d'estimation pour chaque dérivée de $\Phi_{0,j}$. (En effet, on utilise ici une version légèrement renforcée de la Proposition 1, à savoir que l'on peut choisir les φ_j C^∞ en x.)

Utilisant U^{-1}, on trouve que

$$\mathcal{P}^0(z)=\begin{pmatrix} P_{0,V}-z & R_-^0 \\ R_+^0 & 0\end{pmatrix}: H^2(\mathbb{R}^n)\times l^2(\Gamma;\mathbb{C}^N)\longrightarrow L^2\times l^2,$$

est bijectif, où $(R_+^0u)(\gamma)_j=(u|\Phi_{\gamma,j})_{L^2(\mathbb{R}^n)}$, et $R_-^0=(R_+^0)^*$ (= l'adjoint complexe de R_+^0) . Si

$$\mathcal{E}^0(z)=\begin{pmatrix} E^0(z) & E_+^0(z) \\ E_-^0(z) & E_{-+}^0(z)\end{pmatrix}$$

désigne l'inverse, alors $E_{-+}^0(z)$ est donné par la matrice (de blocs), $E_{-+}^0(z;\alpha,\beta)=\mathcal{F}(E_{-+}(z,.))(\beta-\alpha)$, où $\mathcal{F}(f)(\alpha)$ désigne le coefficient de Fourier en $\alpha\in\Gamma$, de la fonction $f\in C^\infty(\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*)$. Grâce à la décroissance exponentielle de la fonction $\Phi_{0,j}$, on peut montrer que $\mathcal{E}^0(z)$ reste borné aussi dans certains espaces à poids exponentiels.

Si $B\neq 0$, on doit considerer $P_{B,V}$ comme une perturbation singulière de $P_{0,V}$. En plus, $P_{B,V}$ ne commute pas en général avec les translations par les éléments de Γ. On utilise alors des translations"magnétiques" (Voir Zak [Z], Luttinger [L], Bellissard [B1,2] et Nenciu [N1-3]): Pour $\alpha\in\Gamma$, on pose $T_\alpha^B u(x)=e^{(i/2)\langle B,x\wedge\alpha\rangle}u(x-\alpha)$ et on vérifie que:

(4) $\quad [P_{B,V},T_\alpha^B]=0.$

On ne peut pas utiliser la théorie de Floquet (en général) car les T_α^B ne commutent pas (en général) entre eux:

(5) $T_\alpha^B T_\beta^B = e^{-i\langle B,\alpha\wedge\beta\rangle} T_\beta^B T_\alpha^B$.

On pose $\Phi_{\alpha,j}^B = T_\alpha^B \Phi_{0,j}$. $R_+^B u(\alpha)_j = (u|\Phi_{\alpha,j}^B)$, $u\in L^2(\mathbb{R}^n)$, $R_-^B = R_+^{B*}$,

$$\mathcal{P}^B(z) = \begin{pmatrix} P_{B,V}-z & R_-^B \\ R_+^B & 0 \end{pmatrix} .$$

Soit $H_B^2 = \{u\in L^2(\mathbb{R}^n);\ (D_{x_j}+A_j)u,\ (D_{x_j}+A_j)(D_{x_k}+A_k)u\in L^2$ pour tous $j,k\}$. C'est un espace de Hilbert.

Proposition 3. Pour (z,B) dans un voisinage de $\{z_0\}\times\{0\}$ dans $\mathbb{C}\times\mathbb{R}^{n(n-1)/2}$, l'opérateur $\mathcal{P}_B(z)$ est bijectif: $H_B{}^2\times l^2 \longrightarrow L^2\times l^2$. Si

$$\mathcal{E}^B(z) = \begin{pmatrix} E^B(z) & E_+^B(z) \\ E_-^B(z) & E_{-+}^B(z) \end{pmatrix}$$

désigne l'inverse correspondant, alors la matrice de $E_{-+}^B(z)$ est de la forme, $E_{-+}^B(z) = e^{(i/2)\langle B,\alpha\wedge\beta\rangle} f(B,z;\alpha-\beta)$, où f est C^∞ en B,z et holomorphe en z, avec

(6) $|\partial^\gamma{}_B f(B,z;\alpha)| \le C_\gamma\, e^{-\eta|\alpha|}$ pour un $\eta>0$ convenable, indépendent de γ,

(7) $f(0,z;\alpha) = \mathcal{F}(E_{-+}(z,.))(-\alpha)$.

De plus, $z\in\sigma(P_{B,V})$ si et seulement si $0\in\sigma(E_{-+}^B(z))$.

L'idée est d'utiliser que $P_{B,V}$ est proche de $P_{0,V}$, dans tout compact fixé quand B est assez petit. La même chose vaut pour $\mathcal{P}^B$ et $\mathcal{P}^0$ et il se trouve, que l'on obtient des inverses approchés en utilisant des partitions de l'unité convenables, les translations magnétiques et $\mathcal{E}^0$.

Les matrices de la forme $\mathcal{M}_B(f)(\alpha,\beta) = e^{(i/2)\langle B,\alpha\wedge\beta\rangle} f(\alpha-\beta)$ avec $f\in l^1(\Gamma)$ forment une algèbre. Nous pouvons écrire $\mathcal{M}_B(f) = \Sigma\, f(\alpha)\tau_\alpha^{-B}$, $\tau_\alpha^{-B} = \mathcal{M}_B(\delta_\alpha)$ où $\delta_\alpha(\beta)=1$ si $\beta=\alpha$, et $=0$ sinon. Nous avons,

(8) $\tau_\alpha^{-B}\tau_\beta^{-B} = e^{i\langle B,\alpha\wedge\beta\rangle}\tau_\beta^{-B}\tau_\alpha^{-B}$.

Grace au choix des l_j, on vérifie que,

(9) $e^{i\langle\alpha,l(x,D_x)\rangle}\, e^{i\langle\beta,l(x,D_x\rangle} = e^{i\langle B,\alpha\wedge\beta\rangle}\, e^{i\langle\beta,l(x,D_x)\rangle}\, e^{i\langle\alpha,l(x,D_x\rangle}$.

En fait, $e^{i\langle\alpha,l(x,D_x)\rangle} = \mathrm{Op}^W(e^{i\langle\alpha,l(x,\xi)\rangle})$ et nous pouvons utiliser le calcul de Weyl des opérateurs pseudodifférentiels. (Voir [BoGH], [Hö].) A $\mathcal{M}_B(f)$ nous pouvons alors associer l'opérateur pseudodifférentiel, $\mathrm{Op}^W(\Sigma f(\alpha)e^{i\langle\alpha,l(x,\xi)\rangle}) = \mathrm{Op}^W(g\circ l)$, où g est la fonction sur $\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*$ donnée par $f=\mathcal{F}(g)$. cette correspondance commute avec la composition des opérateurs.

Dans le cas où f est à décroissance exponentielle, on peut montrer à l'aide d'un théorème de R.Beals [Be], que

(10) $\sigma(\mathcal{M}_B(f))=\sigma(\mathrm{Op}(g\circ l))$.

Appliquant ceci à la fonction, f, donnée dans la Proposition 3, nous obtenons le Théorème 2.

Remarque 4. Si on veut appliquer de l'analyse semiclassique, on peut fixer un champ B, et considérer hB avec $h\to 0$. Si $l_1,..,l_n$ sont adaptés à B alors nous pouvons associer à hB les formes linéaires $l_j(x,h\xi)$, et l'étude du spectre de $P_{hB,V}$ est alors réduite à celle du spectre de l'opérateur "semiclassique": $\mathrm{Op}^W(g(hB,z;l(x,h\xi)))$.

Les mêmes réductions s'appliquent à la densité d'états. Soit $F\in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Alors $F(P_{B,V})$ est un opérateur régularisant; le noyau distribution, $K(x,y)$ est de classe C^∞ et vérifie: $K(x+\gamma,x+\gamma)=K(x,x)$ pour tous $x\in\mathbb{R}^n$, $\gamma\in\Gamma$.

Suivant Shubin [Sh], et d'autres auteurs, nous introduisons la "trace moyenne",

(11) $\widetilde{\mathrm{tr}}\, F(P_{B,V})=\int_\Omega K(x,x)dx/\mathrm{Vol}(\Omega)$,

où Ω est un domaine fondamental de Γ. Si $F\geq 0$, alors $\widetilde{\mathrm{tr}}\, F(P_{B,V})\geq 0$, et il existe donc une mesure de Radon unique $\rho_{B,V}$ ("la densité d'états") telle que,

(12) $\widetilde{\mathrm{tr}}\, F(P_{B,V})=\int F(z)\,\rho_{B,V}(dz)$.

Soit $\tilde{F}\in C_0^\infty(\mathbb{C})$ une extension de F telle que $\bar\partial\tilde{F}=\mathcal{O}(|\mathrm{Im}(z)|)$. Alors,

(13) $$F(P_{B,V})=-(1/\pi)\int\frac{\partial\tilde{F}(z)}{\partial\bar{z}}\,(z-P_{B,V})^{-1}\,L(dz),$$

où L désigne la mesure de Lebesgue sur $\mathbb{C}\simeq\mathbb{R}^2$. Si F et $\tilde{F}$ ont leur support dans un voisinage suffisamment petit de z_0, nous pouvons appliquer la formule, $(z-P_{B,V})^{-1}=-E^B(z)+E_+^B(z)(E_{-+}^B(z))^{-1}E_-^B(z)$, et le fait que $E^B(z)$ est holomorphe in z, pour obtenir,

(14) $$F(P_{B,V})=-(1/\pi)\int\frac{\partial\tilde{F}(z)}{\partial\bar{z}}\,E_+^B(z)(E_{-+}^B(z))^{-1}E_-^B(z)\,L(dz).$$

Ensuite nous prenons la trace de cette relation. On peut montrer que,

(15) $\widetilde{\mathrm{tr}}\,E_+^B(E_{-+}^B)^{-1}E_-^B=\hat{\mathrm{tr}}(E_-^BE_+^B(E_{-+}^B)^{-1})$,

où,

(16) $\hat{\mathrm{tr}}(\mathfrak{M}_B(f))=(\mathrm{Vol}(\Omega))^{-1}\ \mathrm{tr}(f(0))=(2\pi)^{-n}\int_{\mathbb{R}^{n*}/\Gamma^*} \mathrm{tr}\ g(\theta)\ d\theta,\ f=\mathcal{F}g.$

De plus,

(17) $E_-^B E_+^B=\partial E_{-+}^B/\partial z.$

Si $Q=\mathrm{Op}^W(g\circ l)$ est l'opérateur introduit dans le Théorème 2, nous obtenons:

$$(18)\quad \tilde{\mathrm{tr}}\ F(P_{B,V})=-(1/\pi)\int \frac{\partial \tilde{F}(z)}{\partial \bar{z}}\ \tilde{\mathrm{tr}}((\partial Q/\partial z)\circ Q^{-1})\ L(dz)/\mathrm{Vol}(\Omega)$$

Ici, dans le cas des quantifications de Weyl, nous définissons $\tilde{\mathrm{tr}}(\mathrm{Op}^W(q))$ comme la valeur moyenne de la trace du symbole q. (Cette valeur moyenne existe dans le cas de $(\partial Q/\partial z)\circ Q^{-1}$).

On peut voir $l(x,\xi)=(l_1(x,\xi),..,l(_n(x,\xi))$ comme une application linéaire surjective: $T^*\mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^{n*}$, avec la propriété:

(19) $\{\langle e,l(.)\rangle,\langle f,l(.)\rangle\}=\langle B,e\wedge f\rangle$, pour tous $e,f\in\mathbb{R}^n$.

Les fonctions l_j décrivent alors $l(x,\xi)$ dans les coordonnées duales sur $\mathbb{R}^{n*}$: $\theta_j=\langle e_j,\theta\rangle$.

Si n est pair et B est de rang maximal, on peut choisir une base $f_1,..,f_n$ de $\mathbb{R}^n$ (qui n'a plus rien à avoir avec le réseau Γ), telle que pour les coordonnées correspondantes:

$$B=\sum_1^{n/2} dy_{j+n/2}\wedge dy_j$$

Si on change les l_j en $l_j=\langle f_j,l\rangle$, on constate que les $x_j=l_j$, $\xi_j=l_{j+n/2}$, $1,\le j\le \frac{1}{2}n$ forment un système partiel de coordonnées symplectiques sur $T^*\mathbb{R}^m$. Avec B repmlacé par hB, Q prend la forme:

(20) $Q=\tilde{Q}(h,z,x'',h\xi'')$, où $(x'',\xi'')=(x_1,..,x_{\frac{1}{2}n},\xi_1,..,\xi_{\frac{1}{2}n})$.

Ici on identifie les opérateurs et leurs symboles de Weyl, et $\tilde{Q}(h,z,\theta)$ est la fonction $g(hB,z,\theta)$ exprimée dans les coordonnées duales, $\theta_j=\langle e_j,\theta\rangle$.

Si $n=2n'+1$ est impair et de rang maximal, on peut choisir la base $(f_1,..,f_n)$ telle que

$$B=\sum_1^{n'} dy_{n'+j}\wedge dy_j$$

Toujours avec $l_j=\langle e_j,l\rangle$, on obtient un système partiel de coordonnées symplectiques sur $T^*\mathbb{R}^m$, en posant $x_j=l_j$, $\xi_j=l_{n'+j}$, $1\le j\le n'$, $x_{n'+1}=l_n$, et remplaçant B par hB, Q devient:

(21) $\quad Q=\tilde{Q}(h,z;x'',h\xi'',x_{n'+1}),\ (x'',\xi'')=(x_1,\dots,x_{n'},\xi_1,\dots,\xi_{n'})$.

Ici $x_{n'+1}$ est un paramètre. Ecrivons $Op_h(a(x,\xi))=Op^W(a(x,h\xi))$, et disons que a est le symbole de l'opérateur h-pseudodifférentiel. Soit $a\#_h b$ le symbole de l'op. h-pseudodiff. $Op_h(a)\circ Op_h(b)$. Si $\chi\in L^\infty(\mathbb{R}^{n*})$ est à support compact avec la propriété: $\sum_{\alpha\in\Gamma}\chi(\theta-\alpha)=1$, on obtient la formule:

(22)
$$\tilde{tr}\,F(P_{hB,V})=\frac{\iiint\chi(\partial_{\bar z}\tilde{F}(z))\,tr[\partial_z\tilde{Q}(h,z;x'',\xi'',t)\#_h\tilde{Q}^{-1}(h,z;x'',\xi'',t)]\,L(dz)dx''d\xi''dt}{\pi\,Vol(\mathbb{R}^n/\Gamma)\iint\chi dx''d\xi''dt}.$$

Ici, on identifie les opérateurs h-pseudodiff. avec leur symboles, et en particulier, $\tilde{Q}^{-1}$ désigne le h-symbole de l'inverse de $Op_h(\tilde{Q})$.

L'opération $\#_h$ ne concerne que les variables x'',ξ'', et dans le cas $n=3$, on est donc ramené à la composition d'opérateurs pseudodifférentiels en dimension 1. Dans ce cas, B est de rang maximal, dès que $B\neq 0$. Les plans $t=$Const. s'identifient alors avec les translatés de $(\mathrm{Ker}B)^\perp$.

On supposera désormais que $n=3$, et dans ce cas on va étudier la mesure de densité d'états et mettre en évidence un comportement étroitement lié à l'effet de de Haas-van Alphen en physique des solides. (Une explication heuristique de ce phénomène fut donnée par Onsager [O], voir aussi [AsM].) Avec $z_0\in\mathbb{R}$ fixé comme avant, on introduit la surface de Fermi:

(23) $\quad \mathcal{F}(z_0)=\{\theta\in\mathbb{R}^{3*}:\ z_0\in\sigma(P_\theta)\}$.

On suppose:

(H1) Pour tout $\theta\in\mathcal{F}(z_0)$, z_0 est une valeur propre simple de P_θ.

Pour θ_0 dans un voisinage convenable de $\mathcal{F}(z_0)$, on désigne par $\lambda(\theta)$ la valeur propre de P_θ, qui dépend analytiquement de θ et qui vaut z_0 sur $\mathcal{F}(z_0)$. La deuxième hypothèse est alors que:

(H2) $\quad d\lambda(\theta)\neq 0$ pour tout $\theta\in\mathcal{F}(z_0)$.

On fixe maintenant un $B\neq 0$ (bien que toute la discussion soit uniformement valable, si B varie dans un petit voisinage d'un $B_0\neq 0$). Soit $\mathcal{H}=(\mathrm{Ker}B)^\perp\subset\mathbb{R}^{3*}$. On suppose:

(H3) Si $\theta_0\in\mathcal{F}(z_0)$ alors: ou bien $d(\lambda_{|\theta_0+\mathcal{H}})\neq 0$ en θ_0, où bien $\mathrm{Hess}(\lambda_{|\theta_0+\mathcal{H}})$ est défini (positif ou négatif).

Autrement dit, si un translaté de $\mathcal{H}$ coupe $\mathcal{F}(z_0)$ en un point, alors soit on a une intersection transversale, soit le point d'intersection est isolé et on a un contact d'ordre deux exactement entre le translaté et $\mathcal{F}(z_0)$.

La dernière hypothèse est:

(H4) Pour tout $\theta_0 \in \mathbb{R}^{3*}$ et toute composante, K de $\mathcal{F}(z_0)$, l'ensemble $(\theta_0+\mathcal{H})\cap K$ est compact.

On en déduit que toute composante de $(\theta_0+\mathcal{H})\cap\mathcal{F}(z_0)$ est soit un point, soit une courbe analytique fermée. De plus, la distance entre différentes composantes de $(\theta_0+\mathcal{H})\cap\mathcal{F}(z_0)$ est minorée par un $\varepsilon_0>0$, qui ne dépend pas de θ_0.

Utilisant seulement (H1),(H2), on montre qu'il existe des composantes, $K_1,..,K_M$ de $\mathcal{F}(z_0)$ (avec $M<+\infty$) telles que $(K_j+\Gamma^*)\cap K_k \neq \emptyset$ si $j\neq k$, et

$\mathcal{F}(z_0)=\bigcup_{j=1}^{M} \bigcup_{\gamma\in\Gamma^*}(K_j+\gamma)$. Soit $J(K_j)=\{\gamma\in\Gamma^*;K_j+\{\gamma\}=K_j\}$. On montre (en utilisant toutes les hypothèses) que, si $e_0\in\mathbb{R}^{3*}\setminus\mathcal{H}$, alors si K_j est compact on a $J(K_j)=\{0\}$, et si K_j est non-compact, on a $J(K_j)=\mathbb{Z}g_j$, où $g_j=t_je_0+h_j\in\Gamma$, avec $t_j>0$ et $h_j\in\mathcal{H}$. Dans le cas compact, on pose $E_j=\mathbb{R}^{3*}$ et dans le cas non-compact on pose $E_j=\{te_0+h;h\in\mathcal{H},0\leq t<t_j\}$. Ainsi dans tous les cas, E_j est un domaine fondamental de $J(K_j)$. Soit $\Omega_j=\hat{\Omega}_j\cap E_j$, où $\hat{\Omega}_j=\{x\in\mathbb{R}^{3*};\ \mathrm{dist}(x,K_j)=\mathrm{dist}(x,\mathcal{F}(z_0))\}$. Avec $\Omega^*=\bigcup_{1}^{M}\Omega_j$, on montre alors que $(\Omega^*+\gamma)\cap\Omega^*$ est de mesure 0 pour tout $\gamma\in\Gamma^*\setminus\{0\}$ et que $\bigcup_{\Gamma^*}(\Omega^*+\gamma)=\mathbb{R}^3$.

Dans la formule (22), on prend $\chi=(1_{\Omega^*})*\rho$, où $\rho=\rho''(x'',\xi'')\otimes\delta(t)$, où $\rho''\in C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$ est à support dans un petit voisinage de 0 et d'intégrale 1. On peut aussi décomposer χ en $\Sigma\chi_j$, avec $\chi_j=(1_{\Omega_j})*\rho$.

Pour $z\in\mathbb{R}$ voisin de z_0, soit $f_j(z,t)$ l'aire du domaine borné dans $te_0+\mathcal{H}$, dont le bord est $(te_0+\mathcal{H})\cap(\mathcal{F}(z)\cap\Omega_j)$, ceci pour t dans l'intervalle des valeurs telles que cette intersection soit non-vide. (Dans le cas où K_j est non-compact, f_j peut s'étendre en une fonction périodique par rapport à t, et dans le cas compact on a aussi une extention C^∞ à $\mathbb{R}_t$ qui est non-unique.) On suppose:

(H5) Les points critiques de $t\mapsto f_j(z_0,t)$ sont non-dégenerés.

On arrive alors au résultat suivant:

Théorème 5. Soit $n=3$ et fixons $B\neq 0$. On suppose (H1)-(H5). Il existe alors $\varepsilon_0>0$ et $b(.,h)\in L^1(]z_0-\varepsilon_0,z_0+\varepsilon_0[)$ tels que pour tout $F\in C_0^\infty(]z_0-\varepsilon_0,z_0+\varepsilon_0)$ dépendant aussi de $h>0$, mais vérifiant:

(24) $F,F',F''=\mathcal{O}(h^{-N_0})$,

pour un $N_0>0$ arbitraire mais fixé, on ait:

(25) $$\widetilde{\mathrm{tr}}\, F(P_{hB,V})=\frac{\int F(z)b(z,h)dz}{\pi \mathrm{Vol}(\mathbb{R}^3/\Gamma)\mathrm{Vol}_{B^*\wedge dt}(\mathbb{R}^{3*}/\Gamma^*)}+\mathcal{O}(h^\infty),\ h\to 0.$$

Ici, B^* est la forme duale de B, bien définie sur $\mathcal{H}$. On peut aussi décrire b de la manière suivante: Pour chaque $j=1,..,M$, soient $T_{j,k}$, $1\leq k\leq m(j)$ les point critiques de $t\mapsto f_j(z_0,t)$. Alors,

(26) $$b(z)=b_0(z)+\sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{m(j)} b_{j,k}(z),$$

où $\partial_z^\nu b_0(z)=\mathcal{O}(1)$, $h\to 0$, pour tout $\nu=0,1,2,..$. $b_{j,k}$ est une contribution d'un voisinage de $T_{j,k}$. Pour la décrire, on fixe j,k et on supprime j,k des notations la plupart du temps. On a alors un symbole classique d'ordre 0: $f(t,z;h)$ avec $f(t,z;0)=f_j(t,z)$. Soit $(\tau(\nu h;h),\zeta(\nu h;h))$ la solution près de (T,z_0) du système:

(27) $\partial_t f(\tau,\zeta;h)=0$, $f(\tau,\zeta;h)=\nu h$,

pour $\nu\in\mathbb{N}$ et νh proche de $f_j(T,z_0)$. Alors $\tau(s;h)$, $\zeta(s;h)$ sont des symboles classiques d'ordre 0, avec $\partial_s\zeta$ elliptique , et il existe un symbole classique, $m(z,s;h)>0$ d'ordre 0, tel que

(28) $$b_{j,k}(z;h)=\sum_{|\nu h-f(T,z_0;0)|<\delta_0} h\, m(z,\nu h;h)\, H(\pm(z-\zeta(\nu h;h)))\, |z-\zeta(\nu h;h)|^{-\frac{1}{2}},$$

où δ_0 est petit. De plus:

(29) $$m(\zeta(\nu h;h),\nu h;h)=\left|2\frac{\partial_z f}{\partial_t^2 f}(\tau(\nu h;h),\zeta(\nu h;h);h)\right|^{\frac{1}{2}}\quad .$$

Le signe, $\pm$ dans (28) est celui de $\partial_t^2 f/\partial_z f$.

References

[AsM] *N.W.Aschcroft, N.D. Mermin,* Solid state physics, Holt, Rinehart and Winston, New York-London(1976).