Séminaire Équations aux dérivées partielles - École Polytechnique

C. Gérard

Théorie des résonances pour des opérateurs de Schrödinger périodiques

Séminaire Équations aux dérivées partielles (Polytechnique) (1988-1989), exp. n° 1, p. 1-9
<http://www.numdam.org/item?id=SEDP_1988-1989____A1_0>

CENTRE
DE
MATHEMATIQUES
Unité associée au C.N.R.S. n° 169

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

THEORIE DES RESONANCES POUR DES OPERATEURS DE SCHRÖDINGER PERIODIQUES.

C. GERARD

Exposé n°I

25 Octobre 1988

I.Introduction

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

Ce problème est intéressant pour plusieurs raisons :

pour des Hamiltoniens de Schrödinger à deux corps avec un potentiel V tendant vers zéro à l'infini, on sait , sous des hypothèses d'analyticité à l'infini où de décroissance exponentielle prolonger la résolvante à travers le spectre continu de H, qui est égal dans ce cas au demi-axe réel positif .

Le spectre continu joue ici le rôle d'une coupure pour une fonction multivaluée, comme par exemple la fonction $(z)^{1/2}$. Les singularités du prolongement sont des pôles de rang fini appelés **résonances** .

Pour un opérateur de Schrödinger périodique, le spectre continu est formé de bandes, et on s'attend à une structure plus riche pour la surface de Riemann sur laquelle $(H - \lambda)^{-1}$ peut se prolonger . Par exemple, une bande fait penser à la coupure associée à une fonction comme $(z(1-z))^{1/2}$. D'autre part, on peut prolonger la résolvante sans difficultés en traversant l'axe réel entre les bandes du spectre de H .

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

En physique des solides, on s'intéresse aux singularités de $R'(\lambda) = (H+W -\lambda)^{-1}$ pour des energies λ complexes . Les pôles réels de $R'(\lambda)$ situés entre les bandes sont des valeurs propres (responsables de la couleur de certains cristaux) , les pôles complexes obtenus par prolongement à travers les bandes s'interprètent comme des résonances associées à des " quasiparticules " .

L'analogie avec les Hamiltoniens à deux corps est très grande , en particulier la densité d'états joue un rôle analogue avec la phase de diffusion dans le scattering usuel .

Notons enfin que d'autres problèmes physiques où la périodicité joue un rôle important peuvent être étudiés à l'aide de ces techniques : citons par exemple certains problèmes d'ondes de spin , la diffusion de phonons par des défauts de masse , la diffusion acoustique par un réseau périodique d'obstacles , la diffusion d'atomes par une surface (voir [Ge2]) .

II.Résultats

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

II.1 Résultats généraux

On s'intéresse aux deux problèmes suivants :

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

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

Les singularités sont différentes dans les deux problèmes .

Le résultat principal est le suivant :

Théorème 1:

pour tout ouvert borné U de C , il existe un ensemble fini Γde points de U , appelés ***résonances de Landau*** *, et un fermé Γ_∞ ne rencontrant pas Γ ,tels qu' on ait les résultats suivants :*

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

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

Ici $L^2{}_a(R^n) = \{ u \mid u\, e^{a<x>} \in L^2(R^n) \}$, et $H^2{}_{-a}(R^n) = \{ u \mid u\, e^{-a<x>} \in H^2(R^n) \}$.

Faisons maintenant quelques remarques sur Γ et Γ_∞ .

Les résonances de Landau ont une interprétation géométrique qui les relient aux singularités des surfaces de Fermi :

pour étudier un opérateur de Schrödinger periodique, on introduit classiquement la famille des opérateurs réduits de Floquet-Bloch : $H_p = (D_x + p)^2 + V(x)$ sur $L^2(F_T)$, où F_T est une cellule fondamentale du réseau T . Le domaine de H_p est ici $H^2(F_T)$, où on munit F_T de sa structure de variété qui en fait un tore T^n . Le paramètre de Floquet p varie dans une cellule fondamentale $F_T{}^*$ du réseau dual de T .

On introduit alors la **surface de Fermi** S_λ pour $\lambda \in R$: S_λ est l'ensemble des p tels que λ est une valeur propre de H_p . S_λ joue le rôle de la surface d'énergie $\xi^2+V(x) = \lambda$ et peut être considérée comme l'espace de configuration dans lequel se déplacent les électrons de Bloch .

La variété de Bloch S est l'ensemble $\{ (p,\lambda) \mid p \in S_\lambda \}$.
La variété de Bloch s'étend à des énergies et des paramètres de Floquet complexes comme un ensemble analytique complexe .

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

L'ensemble Γ_∞ correspond à des points où une composante de la surface de Fermi est tangente à une surface de niveau de $(\mathrm{Im} p)^2$. Γ_∞ joue le role d'un spectre essentiel complexe et correspond à une frontière naturelle pour l'extension de $(H - \lambda)^{-1}$ entre des espaces L^2 à poids . On peut montrer d'autre part que Γ_∞ est inclus dans un ensemble sousanalytique . (Je conjecture que Γ_∞ est de mesure nulle) .
On s'intéresse maintenant aux singularités de la résolvante au voisinage d'une résonance de Landau . En utilisant des techniques de géométrie analytique, on peut démontrer le résultat général suivant :
Rappelons d'abord deux définitions :

on dira qu'une fonction $M(\lambda)$ est de **détermination finie** près de λ_0 si il existe un voisinage V de λ_0 tel que les déterminations de $M(\lambda)$ au dessus d'un ouvert simplement connexe de $V\setminus\{\lambda_0\}$ engendrent un espace vectoriel de dimension finie .

on dira que $M(\lambda)$ est à **croissance modérée** près de λ_0 si pour tout ensemble simplement connexe V^* de $V\setminus\{\lambda_0\}$, pour toute détermination de $M(\lambda)$ sur V^*, notée $M'(\lambda)$, il existe C_0 et N_0 tels que : $\| M'(\lambda\| \leq C_0 \,|\, \lambda - \lambda_0|^{-N_0}$.

Théorème 2 :

la résolvante $(H - \lambda)^{-1}$ est de détermination finie au voisinage de tout point de Γ. Sous une hypothèse géométrique supplémentaire sur la variété de Bloch (voir [Ge1] Thm 3.5), $(H - \lambda)^{-1}$ est à croissance modérée au voisinage de tout point de Γ.

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

II.2 Développements asymptotiques

Sous des hypothèses plus fortes , on peut donner un développement asymptotique de $(H - \lambda)^{-1}$ au voisinage d'un point de Γ.

On considère un point (p_o,λ_o) tel que $\lambda_o \in \Gamma$ et p_o est l'unique point de la fibre de S au dessus de λ_o où on n'a pas transversalité aux strates de S . On suppose de plus que près de (p_o, λ_o) , S est un diviseur à croisements normaux, i.e. S est l'union d'hypersurfaces $S_1,...S_k$, données par des équations irréductibles $s_1(p,\lambda) =0$, ..., $s_k(p,\lambda) = 0$, avec $s_i(p_o,\lambda_o) = 0$ et les ds_i linéairement indépendants en (p_o,λ_o) . Enfin (p_o,λ_o) est un point critique non dégénéré de la projection sur λ pour la strate $S_1 \cap ... \cap S_k$ et n'est pas un point critique de la projection sur λ pour une autre strate adjacente de S .
On a alors le résultat suivant :

Théorème 3 : *toute branche de $(H - \lambda)^{-1}$ s'écrit près de λ_o sous une des formes suivantes :*

i) $(H - \lambda)^{-1} = E_0(\lambda) + C_0 N (\lambda - \lambda_o)^{\alpha/2} (K_0 + (\lambda-\lambda_o) E_1(\lambda))$

ii) $(H - \lambda)^{-1} = E_0(\lambda) + C_0 N (\lambda-\lambda_o)^{\alpha} Log(\lambda - \lambda_o) (K_0 + (\lambda - \lambda_o) E_1(\lambda))$

iii) $(H - \lambda)^{-1} = E_0(\lambda) + C_0 N (\lambda - \lambda_o)^{\alpha} Log(\lambda - \lambda_o) (K_0 + (\lambda - \lambda_o) E_1(\lambda)) +$

$N(\lambda - \lambda_o) Log(\lambda - \lambda_o) E_2(\lambda)$.

iv) $(H - \lambda)^{-1} = E_o(\lambda) + C_0 N (\lambda - \lambda_o)^{\alpha} (K_0 + (\lambda - \lambda_o) E_1(\lambda))$

Ici $E_i(\lambda)$ sont des opérateurs holomorphes près de λ_o, K_O est un opérateur de rang fini qui peut être calculé exactement ainsi que $\alpha \in Z$, et N est un certain indice d'intersection .

III.Applications

on donne maintenant quelques applications de ces résultats .

III.1 Lien avec la structure de bandes

La première application concerne le lien entre les résonances de Landau et la structure de bandes du spectre de H .Rappelons d'abord quelques définitions . Si on note $E_i(p)$, pour $i \in N$ les valeurs propres du Hamiltonien réduit H_p , on appelle n-ième bande de $\sigma(H)$ l'ensemble $B_n = \{ E_n(p) \quad p \in F_T^* \}$ .Les B_n ne sont pas les composantes connexes de $\sigma(H)$ (les bandes physiques) , mais sont plus significatives .

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

On dira que B_n et B_m **s'intersectent effectivement** si $\exists\ p \in F_T^*$ tel que $E_n(p) = E_m(p)$.

On dira que B_n et B_m **s'intersectent artificiellement** si $B_n \cap B_m \neq \emptyset$ mais $E_n(p) \neq E_m(p)$ $\forall\ p \in F_T^*$.

Si B_n est simple ou n'intersecte qu'artificiellement d'autres bandes , on sait que $E_n(p)$ est holomorphe dans un petit voisinage de F_T^* .

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

on a alors le résultat suivant :

Théorème 4 :

soit B_n une bande simple , alors :

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

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

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

Remarque 1 : on peut calculer la singularité de $(H - \lambda)^{-1}$ dans le cas ii) à l'aide du Théorème 3 et montrer qu'elle est du type $\mathrm{Log}(\lambda - \lambda_o)$ en dimension 2 et $(\lambda-\lambda_0)^{1/2}$ en dimension 3, c.a.d. l'analogue exact de la singularité en 0 d'un opérateur de Schrödinger à deux corps .D'autre part, dans le cas le plus simple d'intersection effective , on peut montrer qu'on obtient une résonance de Landau au point d'intersection .

Il serait d'ailleurs intéressant de calculer la singularité de $(H - \lambda)^{-1}$ au point d'intersection .

III.2 La densité d'états

On s'intéresse aux propriétés de la densité d'états de H , qui est définie de la façon suivante :

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

Théorème 5 :

on suppose que $n = 2$ ou 3 et que $\partial_i V$ et $\partial^2_{ij} V$ sont bornés de $H^2(R^n)$ dans $L^2(R^n)$. Alors la densité d'états $\sigma(\lambda)$ est analytique sur $R\setminus \Gamma$.

III.3 Perturbations par des impuretés localisées

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

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

Théorème 6 :

soit U un ouvert borné de C . Alors on a les résultats suivants :

i) problème d'extension locale : pour tout point λ_o de $\sigma(H)$, il existe un voisinage V de λ_o dans U tel que $(H - \lambda)^{-1}$ se prolonge méromorphiquement sur le revêtement universel $(V\setminus\Gamma)^*$ de $V\setminus\Gamma$

comme opérateur borné entre $L^2_a(R^n)$ et $H^2_{-a}(R^n)$ pour un $a > 0$, arbitrairement petit.

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

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

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

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

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

IV. Idée de la démonstration

On introduit d'abord la réduction de Floquet-Bloch, qui est classique dans l'étude des problèmes périodiques (voir [Sk]). On note T^* un réseau dual de T, F_T et F_T^* des domaines fondamentaux de T et T^*, et μ_T et μ_{T^*} leurs mesures. On introduit l'opérateur suivant :

pour $\varphi \in S(R^n)$, $K_p\varphi(x) = \mu_T^{1/2} \sum_{\tau\in T} \varphi(x+\tau)e^{i<p,x+\tau>}$, qui est un élément de $C^\infty(F_T)$.

Si on pose aussi $K_p'u(x,p) = e^{-i<p,x>}u(x,p)$, on a :

$$(1) \quad H = \int_{F_T^*}^{\oplus} K_p' H_p K_p \, dp \quad , \text{où } H_p = (D_x + p)^2 + V(x) \text{ avec } D(H_p) = H^2(F_T).$$

Le fait que le domaine de H_p soit $H^2(F_T)$ signifie que l'on considère des fonctions de Bloch T-périodiques.

A cause de (1), on a pour $\mathrm{Im}\lambda > 0$:

$$(2) \quad (H - \lambda)^{-1} = \int_{F_T^*}^{\oplus} K_p'(H_p - \lambda)^{-1} K_p \, dp$$

On écrit maintenant $(H_p - \lambda)^{-1}$ comme le quotient d'un opérateur holomorphe en (p,λ) et d'une fonction holomorphe en (p,λ) , en utilisant la théorie de Fredholm .

On peut écrire : $(H_p - \lambda)^{-1} = \dfrac{D(p,\lambda)}{f(p,\lambda)}$, où $D(p,\lambda)$ est un opérateur holomorphe en (p,λ) de $L^2(F_T)$ dans $H^2(F_T)$

et $f(p,\lambda)$ est une fonction holomorphe en (p,λ) . En utilisant des propriétés de périodicité , on montre ensuite que $M(p,\lambda) = K_p{}'D(p,\lambda)K_p$ et $f(p,\lambda)$ sont T-périodiques en p et que $M(p,\lambda)$ est holomorphe en (p,λ) comme opérateur entre $L^2{}_a(R^n)$ et $H^2{}_a(R^n)$. On peut donc considérer l'intégrale dans (2) , comme une intégrale sur un cycle absolu .

Pour étendre analytiquement $(H - \lambda)^{-1}$ dans le demi-plan inférieur , on peut déformer le contour d'intégration $F_T{}^*$ de manière à éviter les singularités de l'intégrand , qui sont précisément égales à la **variété de Bloch** introduite plus haut . Cette idée est classique dans l'étude des fonctions de classe de Nilsson (voir par exemple [Me]) , dans la théorie des singularités de Landau (voir [Ph]) ou dans le problème de Cauchy complexe (voir [Va] , [K]) .

Les obstructions à la déformation de $F_T{}^*$ (c.a.d. les points de Γ) sont causées par des pincements du cycle d'intégration entre différentes composantes de la variété de Bloch S .Les pincements sont de deux types : pincements simples (correspondant au lieu singulier Γ) et pincements à l'infini (correspondant au lieu singulier Γ_∞) .

On peut décrire l'ensemble maximal de ces obstructions de façon topologique à l'aide du Théorème d'isotopie de Thom dans la version non propre donnée par Fukuda et Kobayashi [F-K] :

λ_o appartient à Γ si il existe une strate de S qui n'est pas transverse à la fibre au dessus de λ_o . La définition de Γ_∞ est plus compliquée (voir [G1] def 4.6). Le fait que la base de la fibration soit de dimension 1 permet d'éliminer Γ_∞ dans le problème local car on peut trouver un voisinage complexe W de $F_T{}^*$ et un voisinage V de $\lambda_o \in \sigma(H)$ tel que toutes les fibres des strates de S soient transverses à ∂W au dessus de V. Ceci permet de démontrer le Théorème 1 . Les Théorèmes 2 et 3 se montrent en adaptant à notre situation des arguments de Mercier [Me] et Pham [Ph] .

Le Théorème 5 s'obtient en écrivant que $\partial_\lambda E(\lambda) = (2i\pi)^{-1}(R(\lambda+i0) - R(\lambda-i0))$ et en utilisant la partie locale du Théorème 1 et le Théorème 6 en utilisant la formule de la résolvante et le Théorème de Fredholm holomorphe .

Bibliographie

[Ca] J.Callaway : Quantum Theory of the Solid State . Academic Press . (1974) .

[F-K] T.Fukuda-T.Kobayashi : A local isotopy lemma . Tokyo J. Math. 5(1) (1982) p31-36 .

[Ge1] C.Gérard : Resonance theory for periodic Schrödinger operators . Preprint .

[Ge2] C.Gérard : Resonance theory in atom-surface scattering . Preprint .

[K] T.Kobayashi : On the singularities of the solution to the Cauchy problem with singular data in the complex domain . Math. Ann. 269 (1984) p 217-234 .

[Me] D.J.Mercier : Théorèmes de régularité de type Nilsson . Thèse de doctorat de l'Université de Nice . (1984) .

[Ni] N.Nilsson : Some growth and ramification properties of certains integrals on algebraic manifolds . Arkiv för Math Vol 5 n°32 (1964) p463-476 .

[Ph] F.Pham : Introduction à l'étude topologique des singularités de Landau . Mémorial des sciences mathématiques n°164 Gauthier-Villars Paris . (1967) .

[Sk] M.M.Skriganov : Geometric and arithmetic methods in the spectral theory of multidimensional periodic operators . Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics n°2 (1987) .

[Va] J.Vaillant : Ramification d'intégrales holomorphes . J. Math. Pures et Appl. 65 (1986) p 343-402 .