Séminaire de Théorie spectrale et géométrie

BERNARD HELFFER

Sur l'équation de Schrödinger avec champ magnétique

Séminaire de Théorie spectrale et géométrie, tome 5 (1986-1987), p. 159-164
<http://www.numdam.org/item?id=TSG_1986-1987__5__159_0>

Séminaire de théorie spectrale et géométrie
CHAMBÉRY-GRENOBLE
1986–1987 (159–164)

SUR L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER AVEC CHAMP MAGNÉTIQUE

par *Bernard HELFFER* (Université de Nantes)

On présente quelques résultats récents ([HE], [HE–SJ 3,4,5]) sur l'équation de Schrödinger avec champ magnétique dans un ouvert $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ et qui mettent en évidence le rôle spécifique de la circulation le long de chemins fermés du potentiel vecteur magnétique.

On s'intéresse ici à deux situations caractéristiques :

Situation 1.

On considère dans un ouvert Ω régulier de $\mathbf{R}^n$ l'équation de Schrödinger avec un champ magnétique :

$$P_{A,V} = \sum_{j=1}^{n} (D_{x_j} - A_j)^2 + V$$

$$(1) \qquad V \in C^\infty \ , \quad V \xrightarrow[|x| \to \infty]{} \infty \ , \quad A_j \in C^\infty$$

$\omega_A = \sum_{j=1}^n A_j dx_j$ désigne la 1-forme potentiel magnétique.

Le théorème suivant est une clarification d'un résultat essentiellement dû à Lavine et O'Caroll [LA–O'CA] :

THÉORÈME 1 (*cf.* [HE], [LA–O'CA]). — *On suppose que Ω est connexe et on désigne par λ_A^Ω* (resp. λ_0^Ω) *la première valeur propre de la réalisation de Dirichlet de $P_{A,V}$* (resp. $P_{0,V}$). *Les propriétés suivantes sont équivalentes :*

(i) $\lambda_A^\Omega = \lambda_0^\Omega$

(ii) (a) $d\omega_A = 0$.

(b) Pour tout chemin fermé γ dans Ω , $\frac{1}{2\pi}\int_\gamma \omega_A \in \mathbf{Z}$.

Esquissons la démonstration de (i) $\Rightarrow$ (ii). On part de l'identité suivante de [LA–O'CA].

$$(*) \qquad ||(\nabla - iA - (\nabla u_0/u_0))\varphi||^2 = \langle P_{A,V}\varphi, \varphi\rangle - \lambda_0^\Omega ||\varphi||^2 \quad \forall \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$$

où u_0 désigne la première fonction propre positive, de norme 1, de $P_{0,V}^\Omega$.

$(*)$ montre immédiatement par le principe du minimax : $\lambda_A^\Omega - \lambda_0^\Omega \geqslant 0$ qui résulte aussi de l'inégalité de Kato. Si u_A est un vecteur propre normalisé de P_A^Ω , on peut trouver une suite $\varphi_n \in C_0^\infty(\Omega)$ telle que

$$< P_{A,V}\varphi_n, \varphi_n > \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} \lambda_A^\Omega$$

$$||\varphi_n|| = 1$$

$$\varphi_n \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} u_A \text{ dans } L^2 .$$

On obtient ainsi l'égalité :

$$(\nabla - iA - \nabla u_0/u_0)u_A = 0 \text{ dans } \mathcal{D}'$$

qui permet de montrer (ii).

Compte-tenu du théorème 1, il est intéressant de mesurer plus précisément $\lambda_A^\Omega - \lambda_0^\Omega$ lorsque (ii)(a) est vérifiée, mais pas (ii)(b).

On a proposé dans [HE] un modèle où ce calcul est possible dans un cadre semi-classique (modèle qui a des liens étroits avec l'effet de Aharonov-Bohm [AH–BO]).

On prend comme ouvert Ω : $R^2\backslash B(0,\delta)$ ($\delta > 0$) et on considère un opérateur dépendant du paramètre $h \in]0, h_0]$:

$$P_{A,V}(h) = \sum_{j=1}^{n}(hD_{x_j} - A_j)^2 + V .$$

On suppose outre (1) que

$$(2) \qquad d\omega_A = 0 \text{ dans } \Omega$$

(3) V admet un unique minimum non dégénéré dans Ω au point $y = (1,0)$ avec $V(y) = 0$.

Rappelons que la métrique d'Agmon Vdx^2 munit $\overline{\Omega}$ d'une distance d_V et on introduit :

$$(4) \qquad S_0 = d_V(y, \partial\Omega)$$

$$(5) \qquad S_1 = \inf_{\gamma\in\Gamma} \text{ (longueur } (\gamma))$$

où Γ est l'ensemble des chemins fermés passant par y dans Ω non homotopes à 0 et longueur (γ) est calculée pour la distance d'Agmon.

L'hypothèse importante est maintenant :

$$S_1 < 2S_0 \tag{6}$$

qui assure que V crée une barrière suffisamment grande entre y et $\partial\Omega$. Sous quelques hypothèses supplémentaires techniques que nous omettons, on obtient alors le

THÉORÈME 2. — *Avec (1), (2), (3), (6), on a*

$$\lambda_A^\Omega(h) - \lambda_0^\Omega(h) = h^{1/2}\left[1 - \cos\frac{\Phi}{h}\right]a(h).e^{-S_1/h} + 0(e^{-(S_1+\varepsilon_0)/h}) \tag{7}$$

où $a(h) \sim \sum_j a_j h^j$, $a_0 > 0$, $\varepsilon_0 > 0$

$$\Phi = \int_{\gamma_0} \omega_A \ (\gamma_0 \textit{ est un chemin entourant } B(0,\delta)) \ . \tag{8}$$

On mesure ainsi quantitativement le fait que $\Phi/2\pi h \notin \mathbf{Z}$. Les techniques de démonstration sont très voisines de celles développées dans [HE–SJ 1], [OU] et sont données dans [HE]. On compare avec un problème défini sur le revêtement de Ω .

Situation 2.

On considère l'équation de Schrödinger avec champ magnétique et potentiel périodique. On suppose donc au lieu de (1) que l'on travaille avec $\Omega = \mathbf{R}^2$ et que :

$$\begin{cases} V(x_1 + a_1, x_2) = V(x_1, x_2) \\ V(x_1, x_2 + a_2) = V(x_1, x_2) \end{cases} \tag{9}$$

$$\begin{cases} \text{Avec } B(x_1, x_2) \text{ défini par } d\omega_A = B dx_1 \wedge dx_2 \\ B(x_1 + a_1, x_2) = B(x_1, x_2) \\ B(x_1 + x_2, a_2) = B(x_1, x_2) \end{cases} \tag{10}$$

On s'intéresse à l'étude du spectre de l'opérateur :

$$P_{tA,V}(h) = \sum_j (hD_{x_j} - tA_j)^2 + V(x)$$

où V est supposé n'avoir qu'un minimum non dégénéré par cellule (par exemple, aux points $(\alpha_1 a_1, \alpha_2 a_2), \alpha \in \mathbf{Z}^2)$, $V(\alpha_1 a_1, \alpha_2 a_2) = 0$ et $h \in]0, h_0]$, $t \in] - t_0, t_0[$.

Dans le cas où $t = 0$, il est bien connu par la théorie de Floquet [RE–SI] que le spectre est constitué de bandes (se recouvrant éventuellement), et les travaux de Simon [SI], Outassourt [OU] permettent de montrer que près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique.

$$-h^2\Delta_y + \frac{1}{2}(V''(0)y, y)$$

le spectre est constitué d'une première bande dont la largeur est donnée comme en (7) par une expression du type

$$\text{(11)} \qquad \begin{cases} h^{1/2}a(h)e^{-S/h} \\ \text{où } S = \inf\limits_{\alpha \in \mathbf{Z}^2 \setminus (0,0)} d_V[\alpha a, 0] \ . \end{cases}$$

Dès que $t \neq 0$, la situation apparaît beaucoup plus compliquée.

On peut tenter d'appliquer la théorie de Floquet en cherchant un substitut aux opérateurs de translations τ_1 et τ_2 :

$$(\tau_1 u)(x) = u(x_1 - a_1, x_2) \ , \quad (\tau_2 u)(x) = u(x_1, x_2 - a_2) \ ,$$

qui commutaient avec $P_{0,V}$ et qui permettaient de réduire le problème à l'intégrale hilbertienne de problème $P^{\mathcal{O}}_{0,V}(h)$ ($\mathcal{O} \in [0, 2\pi]^2$) défini par :

$$u \longrightarrow P^{\mathcal{O}}_{0,V}(h)u = P_{0,V}(h)u$$

pour $u \in D(P^{\mathcal{O}}_{0,V}) = \{u \in H^2_{\text{loc}}, (T_j u) = e^{i\mathcal{O}_j}u, j = 1, 2\}$.

On trouve, certes, deux opérateurs unitaires T_1 et T_2 de la forme :

$$T_j = e^{it\varphi_j/h}.\tau_j \quad (j = 1, 2)$$

qui commutent avec $P_{tA,V}(h)$, mais, si τ_1 commutait avec τ_2 , on a cette fois-ci :

$$T_1 T_2 = e^{it\Phi/h} T_2 T_1$$

où Φ est le flux de $(d\omega_A)$ à travers une cellule de base.

Le spectre de $P_{tA,V}(h)$ près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique en fond de puits (donné ici par

$$(hD_{y_1} - \frac{t}{2}B(0,0)y_2)^2 + (hD_{y_2} + \frac{t}{2}B(0,0)y_1)^2 + \frac{1}{2}(V''(0)y, y)$$

dépend de manière essentielle des propriétés arithmétiques de $t\Phi/h$. Si $t\Phi/h = 2k\pi$ ($k \in \mathbf{Z}$) , on est (modulo l'étude faite dans [HE–SJ 2]) dans la situation étudiée par B. Simon [SI] et A. Outassourt [OU] : près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique, on a une bande dont on peut mesurer asymptotiquement la largeur.

Si $t\Phi/h = 2\pi p/q$ (p et q entiers), on peut adapter l'approche précédente en remarquant que $T_1^q T_2 = T_2 T_1^q$. La cellule de base devient $[-\frac{a_1}{2}, q.\frac{a_1}{2}] \times [-\frac{a_2}{2}, \frac{a_2}{2}]$ et on se ramène à l'étude d'une famille de problèmes sur le tore $\mathbf{T}^2$ pour une équation de Schrödinger à q puits, encore étudiable avec les techniques de [HE–SJ 1].

Si on ajoute les symétries :

$$V(x_1,x_2) = V(-x_2,x_1) \ , \quad B(+x_1,x_2) = B(-x_2,x_1) \ , \tag{12}$$

les q premières valeurs propres du problème de Floquet :

$$u \longrightarrow P^{\mathcal{O}}_{tA,V}(h)u = P_{tA,V}(h)u$$

pour $u \in D(P^{\mathcal{O}}_{tA,V}(h) = \{u \in H^2_{\mathrm{loc}} \ , T_1^q u = e^{iq\mathcal{O}_1}u \ , T_2 u = e^{i\mathcal{O}_2}u\}$ sont toutes proches de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique et données module $0(e^{-(S+\varepsilon_0)/h})$ par celles d'une matrice $q \times q$ de la forme

$$\mathcal{M}(h,\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2) \cong \mu(h)I + a(h).M_{p,q}(\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2).e^{-S/h} + 0(e^{-(s+\varepsilon_0)/h}) \tag{13}$$

avec

$$M_{p,q}(\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2) = e^{i\mathcal{O}_1}J + e^{-i\mathcal{O}_1}J^* + e^{i\mathcal{O}_2}K + e^{-i\mathcal{O}_2}K^* \tag{14}$$

avec $J = \begin{pmatrix} 0 & 1 & O \\ & O & 1 \\ 1 & & 0 \end{pmatrix}$, $K = \begin{pmatrix} 1 & & O \\ & \omega_{p,q} & \\ O & & \omega_{p,q}^{q-1} \end{pmatrix}$, $\omega_{p,q} = e^{2i\pi p/q}$.

Le spectre près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique est décrit par les bandes parcourues par les valeurs propres $\lambda_j(h,\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2)$ de $\mathcal{M}(h,\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2)$ $(j = 1,\ldots,q)$ en faisant varier $(\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2)$.

On est en particulier amené à utiliser le fait que les ensembles décrits par les valeurs propres $\lambda_j(\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2)$ de la matrice $M_{p,q}(\mathcal{O}_1,\mathcal{O}_2)$ peuvent être également obtenus comme la réunion sur $\mathcal{O}$ des spectres de l'équation de Harper $H_{\mathcal{O}}$:

$$l_2(Z) \ni (u_n)_n \longrightarrow \frac{1}{2}(u_{n+1} + u_{n-1}) + \cos[\alpha n + \mathcal{O}]u_n \tag{15}$$

avec $\alpha = t\Phi/h$.

Dans le cas où $t\Phi/h$ est irrationnel, l'approche précédente ne marche plus, mais, par une technique où on considère plus directement un problème à une infinité de puits (cf. Carlson [CA]), on trouve que le spectre près de la première valeur propre de l'oscillateur harmonique est donné par une matrice infinie opérant sur $l^2(Z^2)$ dont le spectre est de nature très proche de la réunion des spectres de $H_{\mathcal{O}}$.

Cette étude est menée dans ce travail en préparation avec J. Sjöstrand [HE–SJ 3] dont on trouvera des présentations dans [HE–SJ 4,5] et qui justifie des travaux de Physiciens (en particulier, Azbel [AZ] et M. Wilkinson [WI]). Elle met en évidence la nature cantorienne du spectre dans ce cas (en liaison avec des travaux heuristiques de Hofstadter [HOF]). Les démonstrations s'appuient sur l'étude semi-classique de l'opérateur pseudodifférentiel $(\cos \alpha D_x + \cos x)$ lorsque $\alpha \to 0$. Nous sommes encore loin d'avoir élucidé complètement la nature du spectre pour toutes les valeurs de $\alpha = t\Phi/h$ (cf. l'article de Bellissard–Simon [BE–SI]).

Références

[AH–BO] AHARONOV – BOHM. — *Significance of Electromagnetic Potentials in the quantum theory*, Phys. Rev., vol. 115, **3**, 1959.

[AZ] YA AZBEL. — *Energy spectrum of a conduction electron in a magnetic field*, Soviet Phys. JETP, vol. 19, **3**, 1964.

[BE–SI] J. BELLISSARD, B. SIMON. — *Cantor Spectrum for the Almost Mathieu Equation*, J. Funct. Anal., vol. 48, **3**, 1982.

[CA] U. CARLSSON. — *Travail en préparation*,.

[HE] B. HELFFER. — *Sur l'équation de Schrödinger avec champ magnétique*, Exposé n° 10 au Séminaire EDP de l'Ecole polytechnique, 86–87.

[HE–SJ 1] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Multiple wells in the semi-classical limit I*, Comm. Partial Differential Equations ,9, **4** (1984), 337–408.

[HE–SJ 2] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Effet tunnel pour l'équation de Schrödinger avec champ magnétique*, Preprint de l'Ecole polytechnique, 1986.

[HE–SJ 3] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *en préparation*,.

[HE–SJ 4] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Analyse semi-classique de l'équation de Harper*, Séminaire EDP de l'Ecole polytechnique, exposé 10 , 86–87.

[HE–SJ 5] B HELFFER, J. SJÖSTRAND. — *Proceedings du colloque de St-Jean-de-Monts, Juin* ,1987.

[HO] D. HOFSTADTER. — *Energy Levels and Wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*, Phys. Rev. B, **1** (1976), 2239–2249.

[LA–O'CA] R. LAVINE ET M.O'CARROLL. — *Ground state properties and lower bounds on energy levels of a particle in a uniform magnetic field and external potential*, J. Math. Phys., **18** (1977), 1908–1912.

[OU] A. OUTASSOURT. — *Analyse semi-classique pour des opérateurs de Schrödinger avec potentiel périodique*, J. Funct. Anal., vol. 72, **1**, 1987.

[RE–SI] M. REED, B. SIMON. — *Methods of modern Mathematical Physics*, Academic Press, 1979.

[SI] B. SIMON. — *Semi-classical Analysis of low lying eigenvalues III, Width of the ground state band in strongly coupled solids*, Ann Physics, **158** (1984), 415–420.

[WI 1] M. WILKINSON. — *Critical properties of electron eigenstates in incommensurate systems*, Proc. Roy. Soc. London Ser. A , **391** (1984), 305–350.

[WI 2] M. WILKINSON. — *An example of phase holonomy in WKB theory*, J. Phys. A, **17** (1984), 3459–3476.

[WI 3] M. WILKINSON. — *Von Neumann lattices of Wannier functions for Bloch electrons in a magnetic field*, Proc. Roy. Soc. London Ser. A , **403** (1986), 135–166.

[WI 4] M. WILKINSON. — *An exact Effective Hamiltonian for A perturbed Laundau Level*, à paraître au J. Phys. A, .

[WI 5] M. WILKINSON. — *An exact renormalisation Group for Bloch Electrons in a Magnetic fields*, à paraître au J. Phys. A, .