MÉMOIRES DE LA S. M. F.

B. HELFFER
J. SJÖSTRAND

Analyse semi-classique pour l'équation de Harper (avec application à l'équation de Schrödinger avec champ magnétique)

Mémoires de la S. M. F. 2e série, tome 34 (1988)
<http://www.numdam.org/item?id=MSMF_1988_2_34__1_0>

© Mémoires de la S. M. F., 1988, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Mémoires de la S. M. F. » (http://smf.emath.fr/Publications/Memoires/Presentation.html) 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/

Mémoire de la Société Mathématique de France, n° 34
Supplément au Bulletin de la S.M.F.
Tome 116, 1988, fascicule 4

Analyse semi-classique pour l'équation de Harper
(avec application à l'équation de Schrödinger avec champ magnétique)

par

B. Helffer et J. Sjöstrand

RÉSUMÉ

Dans cet article, nous commencons l'étude du spectre de l'équation de Harper (bien connue des physiciens du solide) par des méthodes d'analyse semi-classiques en justifiant mathématiquement la démarche du physicien Wilkinson. Des applications sont données à l'étude du spectre de l'équation de Schrödinger avec potentiel électrique et champ magnétique périodiques.

ABSTRACT

In this paper, we begin the study of the spectrum of the Harper's equation (which appears naturally in solid state physics) by semi-classical methods. We give a mathematical justification of the approach by Wilkinson. Applications are given to the study of the spectrum of the Schrödinger equation with periodic electric potential and magnetic fields.

Texte reçu le 30 décembre 1987, révisé le 8 septembre 1988.

B.HELFFER, Département de Mathématiques, Université de Nantes, 44072 Nantes cedex 03, France.

J.SJÖSTRAND, Département de Mathématiques, Université de Paris-Sud, 91405 Orsay cedex, France.

§.0 Introduction 3

§.1 Préliminaires 10

§.2 Analyse spectrale modulo $O(h^{\infty})$ 16

§.3 Décroissance exponentielle 27

§.4 Matrice d'interaction 34

§.5 Etude de $W_{\alpha,0}$ pour $\|\alpha\|_{\infty}=1$ 45

§.6 Renormalisation 58

§.7 Extension au cas de l'opérateur normalisé 63

§.8 Quelques calculs pratiques des coefficients d'interaction 74

§.9 Application à l'équation de Schrödinger avec champ magnétique.. 81

Appendice A : une estimation technique 107

Appendice B : le papillon de Hofstadter 109

Références 110

0. Introduction

On s'intéresse dans cet article au spectre de l'opérateur de Harper dans $l^2(Z)$ donné par :

$$H_{\theta,\lambda,h}\, u(n) = \frac{u(n+1)+u(n-1)}{2} + \lambda \cos(h\, n+\theta)\, u(n),$$

ce modèle (appelé également " almost-Mathieu equation " en souvenir de l'équation de Mathieu : $u \rightsquigarrow -u''+\cos x\, u$) est couramment introduit dans les ouvrages de Physique des solides, en liaison par exemple avec l'équation de Schrödinger dans $R^2_{x,y}$ avec potentiel périodique en x et y et avec un champ magnétique constant. Ici $\lambda > 0$, $h \in R$.

Si $h/2\pi$ est rationnel, on peut employer la théorie de Floquet pour réduire l'étude du spectre de $H_\theta (= H_{\theta,\lambda,h})$ à celle d'une matrice finie dépendant de 2 paramètres. La quantité qui nous intéresse dans ce cas est la réunion des spectres de H_θ quand θ varie dans R. Cet ensemble est alors une réunion finie d'intervalles (" bandes ") fermés.

Quand $h/2\pi$ est irrationnel, on montre facilement que le spectre de H_θ comme ensemble est indépendant de θ. Nous sommes alors en présence d'un opérateur de Schrödinger discret à potentiel quasi-périodique, et il y a une littérature mathématique et physique abondante sur ces opérateurs. Concernant l'opérateur de Harper, on peut en particulier mentionner le travail de Bellissard et Simon [BE-SI], qui montre que pour un ensemble dense (en fait une intersection dénombrable d'ouverts denses) dans l'ensemble des paramètres (λ,h), le spectre de H n'est dense dans aucun intervalle non-trivial (cf également) $[SI]_1$). Le cas $\lambda=1$ semble jouer un rôle important comme valeur de transition entre les cas $\lambda<1$ et $\lambda>1$.

Dans ce cas, il ne semble pas y avoir des résultats rigoureux, mais il est conjecturé que pour $h/2\pi$ irrationnel, le spectre est un ensemble de Cantor de mesure nulle. Les premières études sur ce problème remontent sans doute à Azbel [AZ], Aubry-André [A.A] et Hofstaedter [HO]. L'approche de Hofstaedter conduit à un célèbre papillon (cf la figure [Appendice B], initialement conçue par Hofstaedter, dans une version réalisée à Nantes) et on peut décrire brièvement sa démarche ainsi. Pour comprendre le cas irrationnel, Hofstaedter étudie numériquement pour $h/2\pi = p/q$ avec $q\in N$ (p premier avec q, $q\leqslant 50$) les ensembles $\cup_\theta \mathrm{Sp}(H_{\theta,1,2\pi p/q})$ qu'il reproduit sur des droites d'ordonnée p/q. On obtient ainsi le " papillon de Hofstaedter " laissant deviner la nature cantorienne du spectre dans le cas irrationnel.

Hofstaedter détermine aussi empiriquement des règles permettant de

déterminer la configuration des bandes correspondant à $h=2\pi p/q$ en liaison avec le développement en fraction continue de p/q (développement qui apparait aussi dans les considérations semi-classiques de Azbel). On trouvera dans le survey de J. Sokoloff [SO] de nombreuses références. Mais, sur une suggestion de J. Bellissard, nous nous sommes beaucoup inspirés d'une suite de travaux de Wilkinson [WILK] qui montre comment des techniques semi-classiques permettent d'interpréter une partie du dessin de Hofstaedter.

Plus précisément, l'analyse de Wilkinson est basée sur une analyse B.K.W. qui fait intervenir une infinité de " puits " dans l'espace T^*R. On remarque en effet que l'étude de $\cup_\theta$ Sp $H_{\theta,\lambda,h}$ est équivalente à l'étude de l'opérateur pseudo-différentiel : $\lambda\cos h\, D_x+\cos x$ sur $L^2(R)$.

Ces puits interagissent par effet tunnel et, pour h assez petit, Wilkinson indique comment, en analysant ces interactions, on tombe sur un nouvel opérateur de Harper avec $\lambda=1$, mais avec un nouvel h. Pour obtenir la structure complète du spectre, on " n'a qu'à " itérer cette procédure indéfiniment. La suite des h qu'on obtient est donnée par le développement du premier $h/2\pi$ en fraction continue, et Wilkinson indique que sa procédure marche si tous les h sont petits. Son travail montre une intuition remarquable, étant donné que ses arguments du point de vue mathématique sont assez flous, mais la rigueur mathématique est remplacée par l'intuition du physicien et des vérifications numériques très soigneuses dans l'esprit de celles de Hofstaeder. Comme l'avait pressenti J. Bellissard, il se trouve que les techniques que nous avions développées dans le cas d'un nombre fini de puits dans $[HE\text{-}SJ]_{I,2}$ pour l'étude de l'effet tunnel pour l'équation de Schrödinger et étendues au cas d'une infinité de puits par Carlsson [CAR], peuvent fournir la justification rigoureuse des arguments de Wilkinson [WILK], mais à chaque étape de la procédure, il y a une petite zône du spectre qui demande une analyse différente (abordée de manière non rigoureuse chez

Azbel [AZ]),et qui ne sera pas développée ici. Ceci nous empêche pour l'instant de donner une analyse complète du spectre et nous démontrerons donc seulement les résultats suivants sur le spectre de l'opérateur :

$P(h) = \cos h\, D_x + \cos x$ sur $L^2(\mathbb{R})$.

Théorème 1

Soit $\varepsilon_0 > 0$, il existe alors $C_0 > 0$, tel que si $h/2\pi \in]0,1[\setminus\mathbb{Q}$ et $h/2\pi$ admet le développement en fractions continues :

$$h/2\pi = 1/(q_1 + 1/(q_2 + 1/(q_3 + \ldots))))$$

avec $q_j \in \mathbb{Z}$, $|q_j| \geq C_0$, on a :

Le plus petit intervalle fermé qui contient Sp(P) est de la forme :

$$[-2 + O(1/|q_1|), 2 - O(1/q_1)].$$

$Sp(P) \cap J \subset \cup_{N_- \leq i \leq N_+} J_j$, où les J_j sont des intervalles fermés de longueur $\neq 0$, avec $\partial J_j \subset Sp(P)$.

J_{j+1} se trouve à droite de J_j à une distance $\approx 1/|q_1|$.

J_0 est de longueur $2\varepsilon_0 + O(1/|q_1|)$, contenant 0 à une distance $O(1/|q_1|)$ de son centre.

Les autres bandes sont de largeur $e^{-C(j)/|q_1|}$, avec $C(j) \approx 1$.

Pour $j \neq 0$, soit K_j la fonction affine croissante, qui transforme J_j en $[-2,2]$;

on a alors : $K_j[J_j \cap Sp\, P] \subset \cup_k J_{j,k}$

où les $J_{j,k}$ ont les mêmes propriétés et ainsi de suite.

Ici $a \approx b$ signifie que a/b et b/a sont majorées par une constante qui ne dépend que de ε_0.

Dans le cas rationnel, on a le même résultat, mais la procédure s'arrête après un nombre fini d'étapes.

Le cas où $h/2\pi$ est proche d'un rationnel p_0/q_0, abordé par Sokoloff [SO] et [WILK], sera développé dans un article ultérieur.

Comme nous l'avions mentionné, notre motivation initiale pour l'étude de l'équation de Harper est née dans l'étude semi-classique de l'équation de Schrödinger avec champ magnétique au " fond de puits " , étude entamée dans $[HE-SJ]_3$.

On considère dans R^2 l'équation de Schrödinger avec champ magnétique :

$$P_{tA}(h_0) = (h_0 D_{x_1} - tA_1)^2 + (h_0 D_{x_2} - tA_2)^2 + V$$

avec V, A analytiques et pour

$$B = \left(\frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2}\right)$$

les hypothèses suivantes de périodicité :

$$V(x_1+a_1, x_2) = V(x_1, x_2)$$

$$V(x_1, x_2+a_2) = V(x_1, x_2)$$

$$B(x_1+a_1, x_2) = B(x_1, x_2)$$

$$B(x_1, x_2+a_2) = B(x_1, x_2)$$

On suppose que V n'a qu'un minima par cellule aux points $(j\,a_1, k\,a_2)$ $(j,k)\in Z^2$ et que ces minimas sont non-dégénérés avec $V(0,0)=0$.

On fait de plus les hypothèses d'invariance par rotation :

$$V(x_1, x_2) = V(-x_2, x_1)$$

$$B(x_1, x_2) = B(-x_2, x_1)$$

On étudie alors le spectre de P_{tA} près de la première valeur propre $\lambda_t(h_0)$ de l'oscillateur harmonique en fond de puits :

$$\left(h_0 D_{y_1} - \frac{t\,B(0,0)}{2}\right)^2 + \left(h_0 D_{y_2} + \frac{t\,B(0,0)}{2}\right)^2 + \frac{1}{2} < V''(0,0)y/y >$$

Sous des hypothèses techniques sur V rappelées au §9 (cf $[HE-SJ]_1$) et portant

sur les géodésiques minimales entre les puits et la distance pour la métrique d'Agmon entre les différents puits, on obtient en particulier le théorème suivant :

Théorème 2 :

Soit Φ le flux de $B\, dx_1 \wedge dx_2$ à travers la cellule $[-a_1/2, a_1/2] \times [-a_2/2, a_2/2]$;

Soit $\varepsilon_0 > 0$. Il existe alors $C_0 > 0$ t.q. si $|t| \leqslant 1/C_0$, $h_0 \in]0, 1/C_0]$,

$(t\Phi/2\pi h_0)^{-1} \in]0,1[\setminus \mathbb{Q} \pmod{2\pi\mathbb{Z}}$ admettant un développement en fractions continues :

$$2\pi h_0/t\Phi = \pm(1/(q_0 \pm 1/(q_1 \pm 1/(q_2 \pm \ldots.)))) \qquad \text{avec } q_j \in \mathbb{N}^*,\ q_j \geqslant C_0,\ j = 1,2,\ldots$$

le plus petit intervalle fermé $J_0(h_0)$ qui contient

$$Sp(P_{tA}(h_0)) \cap \left\{\lambda(h_0) + \left[-\frac{1}{C_0} h_0, \frac{1}{C_0} h_0\right]\right\}$$

est de la forme

$$\rho(h_0).\ [-2 + O(1/q_1) + O(e^{-1/C_0 h_0}), 2 - (O(1/q_1) + O(e^{-1/C_0 h_0}))].$$

où $\rho(h_0) > 0$ a un développement de la forme

$$\rho(h_0) = h_0^{-\nu_0}\, (a_0(h_0))\, e^{-S(t)/h_0}$$

(où $\nu_0 \in \mathbb{R}$, $a_0(h_0)$ est un symbole analytique elliptique).

De plus dans $J_0(h_0)$, le spectre de $P_{tA}(h_0)$ a la même structure que celle expliquée au théorème 1 après une similitude.

#

La démonstration consistera à faire une première réduction ramenant à l'étude d'une équation de Harper légèrement perturbée avec $h = t\phi/h_0 + 2\pi q_0$ où le théorème 1 s'applique.

Le plan de cet article est le suivant:

Au §1, on donne quelques préliminaires sur l'équation de Harper.

Au §2, on mène l'analyse spectrale modulo $O(h^{\infty})$ dans l'esprit des travaux de $[HE-RO]_I$.

Au §3, on généralise les inégalités d'Agmon au cas de l'opérateur:

$$\lambda \cos h\, D_x + \cos x$$

et on étudie la décroissance exponentielle des fonctions propres de problèmes à un puits.

Les §4 et 5 sont consacrés à l'étude de la matrice d'interaction et de l'effet tunnel.

Le §6 justifie l'approche de Wilkinson concernant la renormalisation ramenant à chaque étape l'étude à une nouvelle équation de Harper
perturbée.

Le §7 étend le travail des §1 à 4 au cas de l'équation de Harper perturbée.

Au §8, on calcule explicitement dans presque tous les cas des équivalents asymptotiques des coefficients d'interaction.

Enfin le §9 est consacré à l'étude de l'équation de Schrödinger avec champ magnétique.

Remerciements

Nous tenons à remercier J. Bellissard qui nous a suggéré l'étude de ce problème et signalé les travaux de M. Wilkinson.Nous remercions également M. Wilkinson et A. Grigis pour d'utiles conversations sur ce travail et J.P.Guillement et P.Treton pour leur aide dans la réalisation du papillon de Hofstaedter.