Evolution adiabatique de systèmes résonnants à l'aide de conditions d'interface
(avec A. Mantile et F. Nier)

Ali FARAJ

Université de Rennes I

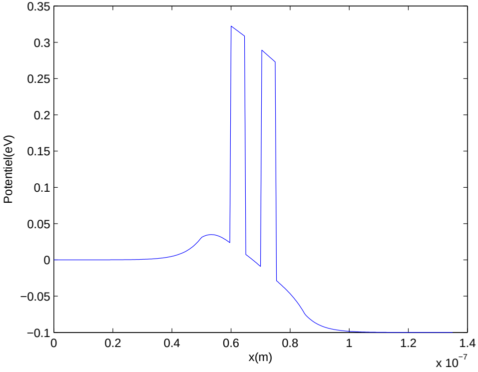
7e JEAN - 08 avril 2010

Système résonnant

- Système 1D ouvert de la forme puits quantiques dans une île

$\longrightarrow$ Présence de résonances

- Diode à effet tunnel résonnant



Asymptotique transitoire

- Analyse $h \to 0$ Schrödinger-Poisson régime stationnaire
  [Bonnaillie-Noël,Nier,Patel,'08]

Asymptotique transitoire

- Analyse $h \to 0$ Schrödinger-Poisson régime stationnaire
  [Bonnaillie-Noël,Nier,Patel,'08]

$\longrightarrow$ modèle non linéaire simple, phénomènes d'hystérésis
[Bonnaillie-Noël,AF,Nier,'09]

Asymptotique transitoire

- Analyse $h \to 0$ Schrödinger-Poisson régime stationnaire [Bonnaillie-Noël,Nier,Patel,'08]

$\longrightarrow$ modèle non linéaire simple, phénomènes d'hystérésis [Bonnaillie-Noël,AF,Nier,'09]

- Objectifs : évolution en temps

  Description analytique simple

  $+$ coût de calcul réduit

  $=$ stabilité des solutions stationnaires, solutions périodiques

Théorème adiabatique en mécanique quantique

- Hamiltonien dépendant du temps

$$\mathcal{H}(t) = -\Delta + V(t, x)$$

- Soit $E(t)$ v.p. isolée de $\mathcal{H}(t)$
- Evolution du sous-espace spectral associé à $E(0)$ par la dynamique générée par $\mathcal{H}(t)$?

Théorème adiabatique en mécanique quantique

- Si $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0$, alors $E(t) = E_0$ et la solution de

$$\begin{cases} i\partial_t u(t) = \mathcal{H}_0 u(t), & t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases} \qquad \text{où} \qquad \mathcal{H}_0 u_I = E_0 u_I$$

est donnée par

$$u(t) = e^{-iE_0 t} u_I$$

Théorème adiabatique en mécanique quantique

- Si $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0$, alors $E(t) = E_0$ et la solution de

$$\begin{cases} i\partial_t u(t) = \mathcal{H}_0 u(t), & t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases} \qquad \text{où} \qquad \mathcal{H}_0 u_I = E_0 u_I$$

est donnée par

$$u(t) = e^{-iE_0 t} u_I$$

$\longrightarrow$ Reste dans l'espace associé à E_0

Théorème adiabatique en mécanique quantique

- Si $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0$, alors $E(t) = E_0$ et la solution de

$$\begin{cases} i\partial_t u(t) = \mathcal{H}_0 u(t), & t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases} \qquad \text{où} \qquad \mathcal{H}_0 u_I = E_0 u_I$$

est donnée par

$$u(t) = e^{-iE_0 t} u_I$$

$\longrightarrow$ Reste dans l'espace associé à E_0

- Toujours vrai si $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\varepsilon t)$, $\varepsilon << 1$?

$\varepsilon =$ paramètre adiabatique

Théorème adiabatique en mécanique quantique

- On s'intéresse à :

$$\begin{cases} i\partial_t u(t) = \mathcal{H}(\varepsilon t)u(t), & t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases} \qquad \text{où} \qquad \mathcal{H}(0)u_I = E(0)u_I$$

Théorème adiabatique en mécanique quantique

- On s'intéresse à :

$$\begin{cases} i\partial_t u(t) = \mathcal{H}(\varepsilon t)u(t), \quad t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases} \qquad \text{où} \qquad \mathcal{H}(0)u_I = E(0)u_I$$

- Changement de variables $t' = \varepsilon t$

Théorème adiabatique en mécanique quantique

- On s'intéresse à :

$$\begin{cases} i\partial_t u(t) = \mathcal{H}(\varepsilon t)u(t), \quad t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases} \quad \text{où} \quad \mathcal{H}(0)u_I = E(0)u_I$$

- Changement de variables $t' = \varepsilon t$

$\longrightarrow$ Evolution adiabatique :

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t u(t) = \mathcal{H}(t)u(t), \quad t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases} \quad \text{où} \quad \mathcal{H}(0)u_I = E(0)u_I$$

Théorème adiabatique

- Gap condition :

$$d\left(E(t), \sigma(\mathcal{H}(t)) \setminus E(t)\right) \geq c$$

- Projection spectrale $P(t)$ reliée à $E(t)$

Théorème adiabatique

- Gap condition :

$$d\left(E(t), \sigma(\mathcal{H}(t)) \setminus E(t)\right) \geq c$$

- Projection spectrale $P(t)$ reliée à $E(t)$

Théorème Adiabatique, noté (TA)

Soit une donnée initiale $u_I \in L^2(\mathbb{R})$ telle que $P(0)u_I = u_I$. Alors, il existe une fonction $v(t)$ t.q. $P(t)v(t) = v(t)$ et t.q. pour tout $T > 0$ la solution $u(t)$ du problème de Cauchy

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t u(t) = \mathcal{H}(t)u(t), & t \geq 0 \\ u(0) = u_I \end{cases}$$

satisfait

$$\max_{t\in[0,T]} \|u(t) - v(t)\|_{L^2} \leq C_T \varepsilon \|u_I\|$$

[Born, Fock,'28], [Kato,'50] et [Joye,'94], [Teufel,'01], [Nenciu,'93]

Résonances : cadre non linéaire

- Résonance de $\mathcal{H} = -h^2\Delta + V$ comme quasi-valeur propre :
  Déf : *complexe z t.q. $\exists\Psi$ dans un L^2 déformé vérifiant*

$$\mathcal{H}\Psi = z\Psi$$

- Non linéaire : évolution du potentiel dictée par la charge

$$V = V(\varepsilon t) \quad \text{où} \quad \varepsilon = -\mathrm{Im}\, z$$

- On a $\varepsilon = e^{-\frac{c}{h}} \rightarrow$ Approximation adiabatique
- Remarque $\varepsilon << h$

Evolution adiabatique des modes résonnants

- Première approche : états spectralement localisés sur le réel et à proximité de la résonance z

    [Skibsted,'89]
    [Perelman,'00]

Evolution adiabatique des modes résonnants

- Première approche : états spectralement localisés sur le réel et à proximité de la résonance z

  [Skibsted,'89]
  [Perelman,'00]

- Seconde approche : évolution des fonctions propres de $U_\theta H U_\theta^{-1}$

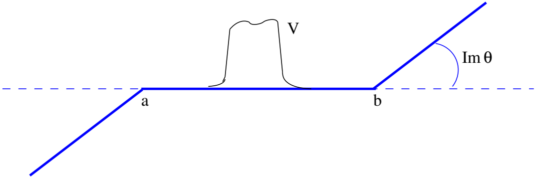
  Opérateur non auto-adjoint

  $\longrightarrow$ Limitation en temps due à l'amplification $e^{\frac{Ct}{\varepsilon}}$ [Joye,'07]

Dilatation analytique extérieure singulière

- Non linéaire : potentiel non régulier
- Dilatation analytique extérieure

$$U_\theta \Psi(x) = \begin{cases} e^{\frac{\theta}{2}} \Psi(e^\theta (x-a)+a), & x < a \\ \Psi(x), & x \in (a,b) \\ e^{\frac{\theta}{2}} \Psi(e^\theta (x-b)+b), & x > b\,, \end{cases}$$



"Black box" formalisme [Sjöstrand, Zworski,'91]

Dilatation analytique extérieure singulière

- Conditions de saut en a et en b [Simon,'79]
- Potentiel V régulier et $\theta \in \mathbb{R}$:

$$H = -h^2\Delta + V \quad \text{et} \quad H(\theta) = U_\theta H U_\theta^{-1}$$

alors

$$H(\theta) = -h^2 e^{-2\theta I_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}}\Delta + V$$

$$D\left(H(\theta)\right) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{a,b\}); \left[\begin{array}{l} e^{-\frac{\theta}{2}} u(a^-) = u(a^+) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta} u'(a^-) = u'(a^+) \\ e^{-\frac{\theta}{2}} u(b^+) = u(b^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta} u'(b^+) = u'(b^-) \end{array} \right. \right\}$$

Dilatation analytique extérieure singulière

- Conditions de saut en a et en b [Simon,'79]
- Potentiel V régulier et $\theta \in \mathbb{R}$:

$$H = -h^2\Delta + V \quad \text{et} \quad H(\theta) = U_\theta H U_\theta^{-1}$$

alors

$$H(\theta) = -h^2 e^{-2\theta I_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}}\Delta + V$$

$$D\left(H(\theta)\right) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R}\setminus\{a,b\});\ \left[\begin{array}{l} e^{-\frac{\theta}{2}}u(a^-) = u(a^+) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta}u'(a^-) = u'(a^+) \\ e^{-\frac{\theta}{2}}u(b^+) = u(b^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta}u'(b^+) = u'(b^-) \end{array}\right. \right\}$$

- Théorème adiabatique pour les valeurs propres de $H(\theta)$?

Dilatation analytique extérieure singulière

- Conditions de saut en a et en b [Simon,'79]
- Potentiel V régulier et $\theta \in \mathbb{R}$:

$$H = -h^2\Delta + V \quad \text{et} \quad H(\theta) = U_\theta H U_\theta^{-1}$$

alors

$$H(\theta) = -h^2 e^{-2\theta I_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}}\Delta + V$$

$$D\left(H(\theta)\right) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R}\setminus\{a,b\}); \left[\begin{array}{l} e^{-\frac{\theta}{2}}u(a^-) = u(a^+) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta}u'(a^-) = u'(a^+) \\ e^{-\frac{\theta}{2}}u(b^+) = u(b^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta}u'(b^+) = u'(b^-) \end{array}\right. \right\}$$

- Théorème adiabatique pour les valeurs propres de $H(\theta)$?

$$\mathrm{Re}\,\langle iH(\theta)u, u\rangle_{L^2(\mathbb{R})} = \mathrm{Re}\,\left[ih^2(u'\bar{u})\Big|_{a^-}^{b^+}\left(e^{-2\theta} - e^{-\frac{\bar{\theta}+3\theta}{2}}\right)\right] + h^2 e^{-2\mathrm{Re}\,\theta}\sin(2\mathrm{Im}\,\theta)\int_{\mathbb{R}\setminus[a,b]} |u'|^2\,dx\,.$$

Conditions d'interface artificielles

- Défaut d'accrétivité concentré en a et b

$\Rightarrow$ perturbation H_{θ_0} de H t.q. :

  - Le Hamiltonien dilaté est accrétif (contraction)
  - Petit effet de la perturbation

- Théorème adiabatique sans limitation en temps

Références

- http ://perso.univ-rennes1.fr/ali.faraj
- HAL : hal-00448868, version 3

Le modèle

- Hamiltonien de référence sur $L^2(\mathbb{R})$

$$H = -h^2\partial_x^2 + V - W^h$$

où $W^h = W_1^h + W_2^h$ et

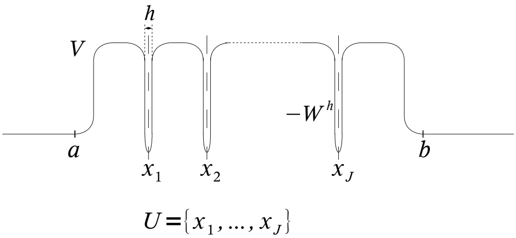
- V île, support (a, b)

  $V \in L^\infty$, $V \geq C > 0$

- W^h puits, support $U^h \to U$

  $W_1^h \in L^\infty$

  $W_2^h \in \mathcal{M}_b$ (functions δ)



Hamiltonien avec conditions d'interface

- Hamiltonien perturbé H_{θ_0} où $\theta_0 \in \mathbb{C}$: opérateur non auto-adjoint défini par

$$H_{\theta_0} u = -h^2 \partial_x^2 + V - W^h$$

$$D(H_{\theta_0}) = \{u \in H^1(\mathbb{R} \setminus \{a, b\}); (-h^2 \partial_x^2 + V - W^h) u \in L^2(\mathbb{R}) + BC\}$$

où

$$BC = \begin{cases} e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(a^-) = u(a^+) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0} u'(a^-) = u'(a^+) \\ e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(b^+) = u(b^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0} u'(b^+) = u'(b^-) \end{cases}$$

Hamiltonien avec conditions d'interface

- Hamiltonien perturbé H_{θ_0} où $\theta_0 \in \mathbb{C}$: opérateur non auto-adjoint défini par

$$H_{\theta_0} u = -h^2 \partial_x^2 + V - W^h$$

$$D(H_{\theta_0}) = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R} \setminus \{a, b\}); (-h^2 \partial_x^2 + V - W^h) u \in L^2(\mathbb{R}) + BC \right\}$$

où

$$BC = \begin{cases} e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(a^-) = u(a^+) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0} u'(a^-) = u'(a^+) \\ e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(b^+) = u(b^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0} u'(b^+) = u'(b^-) \end{cases}$$

- $H_{\theta_0 = 0} = H$ et $\theta_0 = o(h)$

Hamiltonien avec conditions d'interface

- Hamiltonien perturbé H_{θ_0} où $\theta_0 \in \mathbb{C}$: opérateur non auto-adjoint défini par

$$H_{\theta_0} u = -h^2\partial_x^2 + V - W^h$$

$$D(H_{\theta_0}) = \{u \in H^1(\mathbb{R}\setminus\{a,b\}); (-h^2\partial_x^2 + V - W^h)u \in L^2(\mathbb{R}) + BC\}$$

où

$$BC = \begin{cases} e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(a^-) = u(a^+) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0} u'(a^-) = u'(a^+) \\ e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(b^+) = u(b^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0} u'(b^+) = u'(b^-) \end{cases}$$

- $H_{\theta_0=0} = H$ et $\theta_0 = o(h)$
- $\sigma_{ess}(H_{\theta_0}) = \sigma_{ess}(H) = \mathbb{R}_+$

Dilatation analytique extérieure

- Transformation

$$U_\theta \psi(x) = \begin{cases} e^{\frac{\theta}{2}} \psi(e^\theta (x-a)+a), & x < a \\ \psi(x), & x \in (a,b) \\ e^{\frac{\theta}{2}} \psi(e^\theta (x-b)+b), & x > b \end{cases}$$

Dilatation analytique extérieure

- Transformation

$$U_\theta \psi(x) = \begin{cases} e^{\frac{\theta}{2}} \psi(e^\theta (x-a)+a), & x < a \\ \psi(x), & x \in (a,b) \\ e^{\frac{\theta}{2}} \psi(e^\theta (x-b)+b), & x > b \end{cases}$$

- Operateur non auto-adjoint $H_{\theta_0}(\theta) = U_\theta H_{\theta_0} U_\theta^{-1}$. Alors

$$H_{\theta_0}(\theta) u = -h^2 \eta \partial_x^2 + V - W^h, \quad \text{où} \quad \eta(x) = \begin{cases} e^{-2\theta}, & x \in \mathbb{R} \backslash (a,b) \\ 1, & x \in (a,b) \end{cases}$$

Dilatation analytique extérieure

- Transformation

$$U_\theta\psi(x) = \begin{cases} e^{\frac{\theta}{2}}\psi(e^\theta(x-a)+a), & x<a \\ \psi(x), & x\in(a,b) \\ e^{\frac{\theta}{2}}\psi(e^\theta(x-b)+b), & x>b \end{cases}$$

- Operateur non auto-adjoint $H_{\theta_0}(\theta) = U_\theta H_{\theta_0} U_\theta^{-1}$. Alors

$$H_{\theta_0}(\theta)u = -h^2\eta\partial_x^2 + V - W^h, \quad \text{où} \quad \eta(x) = \begin{cases} e^{-2\theta}, & x\in\mathbb{R}\backslash(a,b) \\ 1, & x\in(a,b) \end{cases}$$

et

$$D(H_{\theta_0}(\theta)) = \left\{u\in H^1(\mathbb{R}\backslash\{a,b\}); (-h^2\partial_x^2 + V - W^h)u \in L^2(\mathbb{R}) + BC\right\}$$

avec

$$BC = \begin{cases} e^{-\frac{\theta_0+\theta}{2}}u(a^-) = u(a^+) \\ e^{-\frac{3}{2}(\theta_0+\theta)}u'(a^-) = u'(a^+) \\ e^{-\frac{\theta_0+\theta}{2}}u(b^+) = u(b^-) \\ e^{-\frac{3}{2}(\theta_0+\theta)}u'(b^+) = u'(b^-) \end{cases}$$

Résonances

- Ensemble dense de fonctions

$$\mathcal{A} = \left\{ u \;\middle|\; u(x) = p(x)e^{-\gamma x^2},\ p \text{ est un polynôme et } \gamma > 0 \right\}$$

Proposition

- $\sigma_{ess}(H_{\theta_0}(\theta)) = e^{-2\theta}\mathbb{R}_+$
- *Pour $u, v \in \mathcal{A}$, l'application :*

$$F : z \rightarrow \left\langle (H_{\theta_0} - z)^{-1} u, v \right\rangle$$

a un prolongement méromorphe dans le secteur $\left\{ \arg z \in \left(-\frac{\pi}{2}, 0\right) \right\}$.

- *Les pôles de $F(z)$ dans le cône*

$$\{\arg z \in (-2Im\theta, 0)\}, \quad Im\,\theta < \frac{\pi}{4}$$

sont des valeurs propres de $H_{\theta_0}(\theta)$.

- Résonances de H_{θ_0} := pôles ci-dessus [Aguilar, Combes, ´71]

Outils de la preuve

- Formule de Krein pour la résolvante [Pankrashkin, ´06]

$$(H_{\theta_0}(\theta) - z)^{-1} = (H_{ND}(\theta) - z)^{-1} + \sum_{i,j=1}^{4} C_{i,j}(z,\theta) \left\langle ., \gamma_j(\bar{z},\bar{\theta}) \right\rangle_{L^2} \gamma_i(z,\theta)$$

Outils de la preuve

- Formule de Krein pour la résolvante [Pankrashkin, ´06]

$$(H_{\theta_0}(\theta) - z)^{-1} = (H_{ND}(\theta) - z)^{-1} + \sum_{i,j=1}^{4} C_{i,j}(z,\theta) \left\langle ., \gamma_j(\bar{z}, \bar{\theta}) \right\rangle_{L^2} \gamma_i(z,\theta)$$

Neumann Dirichlet

$$H_{ND}(\theta) = -h^2 e^{-2\theta} \Delta^N_{\mathbb{R}\setminus(a,b)} \oplus \left[-h^2 \Delta^D_{(a,b)} + V - W^h \right]$$

Outils de la preuve

- Formule de Krein pour la résolvante [Pankrashkin, ´06]

$$(H_{\theta_0}(\theta) - z)^{-1} = (H_{ND}(\theta) - z)^{-1} + \sum_{i,j=1}^{4} C_{i,j}(z,\theta) \left\langle ., \gamma_j(\bar{z},\bar{\theta}) \right\rangle_{L^2} \gamma_i(z,\theta)$$

Neumann Dirichlet

$$H_{ND}(\theta) = -h^2 e^{-2\theta} \Delta^N_{\mathbb{R}\setminus(a,b)} \oplus \left[-h^2 \Delta^D_{(a,b)} + V - W^h \right]$$

Rang fini

$$\left[-h^2 e^{-2\theta I_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}} \Delta + V - W^h - z \right] \gamma_j(z,\theta) = 0, \quad \text{sur } \mathbb{R} \setminus (a,b)$$

Outils de la preuve

- Formule de Krein pour la résolvante [Pankrashkin, ´06]

$$(H_{\theta_0}(\theta) - z)^{-1} = (H_{ND}(\theta) - z)^{-1} + \sum_{i,j=1}^{4} C_{i,j}(z,\theta) \left\langle ., \gamma_j(\bar{z}, \bar{\theta}) \right\rangle_{L^2} \gamma_i(z,\theta)$$

Neumann Dirichlet

$$H_{ND}(\theta) = -h^2 e^{-2\theta} \Delta^N_{\mathbb{R}\setminus(a,b)} \oplus \left[-h^2 \Delta^D_{(a,b)} + V - W^h \right]$$

Rang fini

$$\left[-h^2 e^{-2\theta I_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}} \Delta + V - W^h - z \right] \gamma_j(z,\theta) = 0, \quad \text{sur } \mathbb{R} \setminus (a,b)$$

Et $C_{i,j}(z,\theta)$ lien exterieur-intérieur

Choix de la perturbation

- Evolution modes résonnants = évolution v.p. de $H_{\theta_0}(\theta)$

Choix de la perturbation

- Evolution modes résonnants = évolution v.p. de $H_{\theta_0}(\theta)$
- $iH_{\theta_0}(\theta)$ non accrétif en général

$$\mathrm{Re}\,\langle iH_{\theta_0}(\theta)u,u\rangle = -h^2\mathrm{Im}\left(e^{-2\theta}\right)\int_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}|u'|^2dx$$
$$+h^2\mathrm{Im}\left[\left(1-e^{-2\theta}e^{\frac{3}{2}(\theta+\theta_0)}e^{\frac{1}{2}(\bar\theta+\bar\theta_0)}\right)\left(u'(b^-)\bar u(b^-)-u'(a^+)\bar u(a^+)\right)\right]$$

Choix de la perturbation

- Evolution modes résonnants = évolution v.p. de $H_{\theta_0}(\theta)$
- $iH_{\theta_0}(\theta)$ non accrétif en général

$$\mathrm{Re}\,\langle iH_{\theta_0}(\theta)u,u\rangle = -h^2\mathrm{Im}\left(e^{-2\theta}\right)\int_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}|u'|^2dx$$
$$+h^2\mathrm{Im}\left[\left(1-e^{-2\theta}e^{\frac{3}{2}(\theta+\theta_0)}e^{\frac{1}{2}(\bar\theta+\bar\theta_0)}\right)\left(u'(b^-)\bar u(b^-)-u'(a^+)\bar u(a^+)\right)\right]$$

- Pour $\theta=\theta_0=i\tau$ où $\tau\in(0,\frac{\pi}{4})$

$$\mathrm{Re}\,\langle iH_{i\tau}(i\tau)u,u\rangle = h^2\sin(2\tau)\int_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}|u'|^2dx \geq 0$$

$\longrightarrow$ semi-groupe de contraction [Reed-Simon]

Choix de la perturbation

- Evolution modes résonnants = évolution v.p. de $H_{\theta_0}(\theta)$
- $iH_{\theta_0}(\theta)$ non accrétif en général

$$\mathrm{Re}\,\langle iH_{\theta_0}(\theta)u,u\rangle = -h^2\mathrm{Im}\left(e^{-2\theta}\right)\int_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}|u'|^2dx$$
$$+h^2\mathrm{Im}\left[\left(1-e^{-2\theta}e^{\frac{3}{2}(\theta+\theta_0)}e^{\frac{1}{2}(\bar{\theta}+\bar{\theta}_0)}\right)\left(u'(b^-)\bar{u}(b^-)-u'(a^+)\bar{u}(a^+)\right)\right]$$

- Pour $\theta=\theta_0=i\tau$ où $\tau\in(0,\frac{\pi}{4})$

$$\mathrm{Re}\,\langle iH_{i\tau}(i\tau)u,u\rangle = h^2\sin(2\tau)\int_{\mathbb{R}\setminus(a,b)}|u'|^2dx \geq 0$$

$\longrightarrow$ semi-groupe de contraction [Reed-Simon]

- On prendra $\theta_0 = ih^{N_0}$: double utilité

Situation

- $\|W_1^h\|_{L^\infty} \leq C$ et $\|W_2^h\|_{\mathcal{M}_b} \leq Ch$

Situation

- $\|W_1^h\|_{L^\infty} \leq C$ et $\|W_2^h\|_{\mathcal{M}_b} \leq Ch$
- Valeurs propres $\lambda_1^h, \dots, \lambda_\ell^h$ du Hamiltonien de Dirichlet H_D

Situation

- $\|W_1^h\|_{L^\infty} \leq C$ et $\|W_2^h\|_{\mathcal{M}_b} \leq Ch$
- Valeurs propres $\lambda_1^h, \ldots, \lambda_\ell^h$ du Hamiltonien de Dirichlet H_D
- Constante $\lambda_0 > 0$ telle que
  - $V - \lambda_0 \geq c$
  - $\max_{1 \leq j \leq \ell} |\lambda_j^h - \lambda_0| \leq Ch$
  - $d\left(\lambda_0, \sigma(H_D) \setminus \{\lambda_1^h, \ldots, \lambda_\ell^h\}\right) \geq c$

Localisation des résonances

Proposition

Pour tout $|\theta_0| \leq ch$, H_{θ_0} *a exactement* ℓ *resonances* $\left\{z_1^h(\theta_0), \ldots, z_\ell^h(\theta_0)\right\}$ *à proximité des v.p. de Dirichlet avec l'estimation*

$$z_j^h(\theta_0) - \lambda_j^h = \mathcal{O}\left(\frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3}\right)$$

où $S_0 = d_{Ag}\left(\{a, b\}, U, V, \lambda_0\right)$.

Localisation des résonances

Proposition

Pour tout $|\theta_0| \leq ch$, H_{θ_0} a exactement ℓ resonances $\left\{z_1^h(\theta_0), \ldots, z_\ell^h(\theta_0)\right\}$ à proximité des v.p. de Dirichlet avec l'estimation

$$z_j^h(\theta_0) - \lambda_j^h = \mathcal{O}\left(\frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3}\right)$$

où $S_0 = d_{Ag}\left(\{a, b\}, U, V, \lambda_0\right)$.

- Départ : [Helffer,Sjöstrand,'85] potentiel régulier et $\theta_0 = 0$

Décroissance exponentielle

- Région classiquement interdite pour $\mathcal{H} = -h^2\Delta + V(x)$:

$$\text{Energie } \lambda \quad \longrightarrow \quad \text{région } \mathcal{E}(\lambda) = \{x \text{ tq } V(x) - \lambda > 0\}$$

Décroissance exponentielle

- Région classiquement interdite pour $\mathcal{H} = -h^2\Delta + V(x)$:

$$\text{Energie } \lambda \quad \longrightarrow \quad \text{région } \mathcal{E}(\lambda) = \{x \text{ tq } V(x) - \lambda > 0\}$$

- Du point de vu quantique :

  Les états u localisés (spectralt.) autour de λ décroient exponentielt. sur $\mathcal{E}(\lambda)$

$$\|ue^{\frac{\varphi_\lambda}{h}}\| \leq C$$

Décroissance exponentielle

- Région classiquement interdite pour $\mathcal{H} = -h^2\Delta + V(x)$:

$$\text{Energie } \lambda \quad \to \quad \text{région } \mathcal{E}(\lambda) = \{x \text{ tq } V(x) - \lambda > 0\}$$

- Du point de vue quantique :

Les états u localisés (spectralt.) autour de λ décroient exponentielt. sur $\mathcal{E}(\lambda)$

$$\|ue^{\frac{\varphi_\lambda}{h}}\| \leq C$$

- Poids : distance de Agmon

$$\varphi_\lambda(x) = \int_{x_0}^{x} \sqrt{(V(s) - \lambda)_+} ds$$

où $x_+ = \begin{cases} x, & x > 0 \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$

Comparaison : heuristique

- Energie asymptotique λ_0 : le bord est une région classiquement interdite pour H_{θ_0}

$\longrightarrow$ Etats localisés spectralt. autour de λ_0 = proches de vérifier les conditions aux limites de Dirichlet en a et b

- Comparaison

$$z_j^h(\theta_0) - \lambda_j^h = \mathcal{O}\left(\frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3}\right)$$

où $S_0 = d_{Ag}(\{a, b\}, U, V, \lambda_0)$.

Localisation par rapport aux résonances de référence

- $H_{\theta_0=0} = H \Rightarrow z_j^h := z_j^h(0)$ résonances de H
- Comparaison $z_j^h(\theta_0)$ et z_j^h sous l'hypothèse :

$$\forall j \neq j', \quad \lim_{h \to 0} |\lambda_j^h - \lambda_{j'}^h| \left(\frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3} \right)^{-1} = +\infty \qquad (H)$$

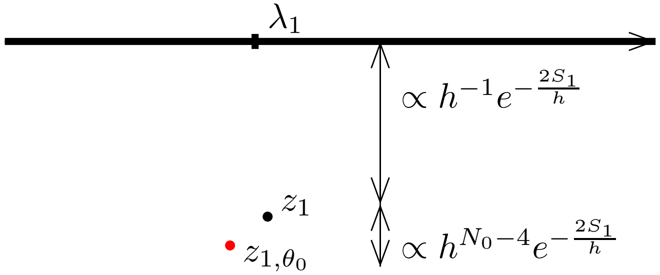
Proposition

Supposons (H). Alors, pour tout $|\theta_0| \leq c_0 h$ tel que $e^{-\frac{S_0}{4h}} \leq |\theta_0|$, on a le résultat de localisation suivant : pour $j = 1, \ldots, \ell$

$$z_j^h(\theta_0) - z_j^h = \mathcal{O}\left(|\theta_0| \frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3} \right)$$

Localisation par rapport aux résonances de référence

$\theta_0 = ih^{N_0}$



Comparaison : heuristique

- Décroissance exponentielle
- Perturbation de taille $|\theta_0|$ au niveau des conditions aux limites en a et b
- On en déduit la comparaison :

$$z_j^h(\theta_0) - z_j^h = \mathcal{O}\left(|\theta_0| \frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3}\right)$$

$\square$

Evolution libre

- Cas $V = W^h = 0$

Proposition

Le semi-groupe associé à H_{θ_0} est uniformément borné en temps avec le développement

$$e^{-itH_{\theta_0}} = e^{-itH} + \mathcal{O}(|\theta_0|)$$

- Utilise l'opérateur W_{θ_0} de noyau

$$W_{\theta_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k,x) e^{-i\frac{k}{h}y} \frac{dk}{2\pi h},$$

où $\psi(k,x)$ fonction propre généralisée : $H_{\theta_0}\psi(k,x) = k^2\psi(k,x)$

Potentiel non trivial : calcul numérique

- Calcul de $e^{-itH_{\theta_0}}$ pour $V \neq 0$

Potentiel non trivial : calcul numérique

- Calcul de $e^{-itH_{\theta_0}}$ pour $V \neq 0$
- Résolution du problème :

$$\begin{cases} i\partial_t u(t,x) = \left[-h^2\partial_x^2 + V(x)\right] u(t,x), \quad t>0, x \in \mathbb{R}\setminus\{-1,1\} \\ e^{\frac{\theta_0}{2}} u(t,-1^+) = u(t,-1^-) \\ e^{\frac{3}{2}\theta_0}\partial_x u(t,-1^+) = \partial_x u(t,-1^-) \\ e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(t,1^+) = u(t,1^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0}\partial_x u(t,1^+) = \partial_x u(t,1^-) \\ u(0,x) = u_I(x) \end{cases}$$

Potentiel non trivial : calcul numérique

- Calcul de $e^{-itH_{\theta_0}}$ pour $V \neq 0$
- Résolution du problème :

$$\begin{cases} i\partial_t u(t,x) = \left[-h^2\partial_x^2 + V(x)\right] u(t,x), \quad t>0, x \in \mathbb{R}\setminus\{-1,1\} \\ e^{\frac{\theta_0}{2}} u(t,-1^+) = u(t,-1^-) \\ e^{\frac{3}{2}\theta_0}\partial_x u(t,-1^+) = \partial_x u(t,-1^-) \\ e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(t,1^+) = u(t,1^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0}\partial_x u(t,1^+) = \partial_x u(t,1^-) \\ u(0,x) = u_I(x) \end{cases}$$

- Schéma de Crank-Nicolson pour $x \in [-5,5]$ avec conditions aux limites transparentes (TBC) en $x=-5$ et $x=5$
  [Arnold, Besse et al.,'08]

Potentiel non trivial : calcul numérique

- Calcul de $e^{-itH_{\theta_0}}$ pour $V \neq 0$
- Résolution du problème :

$$\begin{cases} i\partial_t u(t,x) = \left[-h^2\partial_x^2 + V(x)\right] u(t,x), \quad t > 0, x \in \mathbb{R} \setminus \{-1,1\} \\ e^{\frac{\theta_0}{2}} u(t,-1^+) = u(t,-1^-) \\ e^{\frac{3}{2}\theta_0} \partial_x u(t,-1^+) = \partial_x u(t,-1^-) \\ e^{-\frac{\theta_0}{2}} u(t,1^+) = u(t,1^-) \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0} \partial_x u(t,1^+) = \partial_x u(t,1^-) \\ u(0,x) = u_I(x) \end{cases}$$

- Schéma de Crank-Nicolson pour $x \in [-5,5]$ avec conditions aux limites transparentes (TBC) en $x = -5$ et $x = 5$
  [Arnold, Besse et al.,'08]
- Intégrer les conditions d'interface dans le schéma en gardant la stabilité (comme TBC)

Laplacien discret modifié

- Interface en $x = 0 \rightarrow x_j = j\Delta x,\ j \in \mathbb{Z}$

Laplacien discret modifié

- Interface en $x = 0 \rightarrow x_j = j\Delta x,\ j \in \mathbb{Z}$
- Si $u_j \approx u(x_j)$ alors :

$$\Delta u_0 = \frac{u_{-1} - 2u_0 + u_1^-}{\Delta x^2} \quad \text{et} \quad \Delta u_1 = \frac{u_0^+ - 2u_1 + u_2}{\Delta x^2}$$

Laplacien discret modifié

- Interface en $x = 0 \to x_j = j\Delta x$, $j \in \mathbb{Z}$
- Si $u_j \approx u(x_j)$ alors :

$$\Delta u_0 = \frac{u_{-1} - 2u_0 + u_1^-}{\Delta x^2} \quad \text{et} \quad \Delta u_1 = \frac{u_0^+ - 2u_1 + u_2}{\Delta x^2}$$

- Conditions d'interface :

$$\begin{cases} e^{-\frac{\theta_0}{2}} u_0^+ = u_0 \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0}(u_1 - u_0^+) = u_1^- - u_0 \end{cases}$$

Laplacien discret modifié

- Interface en $x = 0 \to x_j = j\Delta x$, $j \in \mathbb{Z}$
- Si $u_j \approx u(x_j)$ alors :

$$\Delta u_0 = \frac{u_{-1} - 2u_0 + u_1^-}{\Delta x^2} \quad \text{et} \quad \Delta u_1 = \frac{u_0^+ - 2u_1 + u_2}{\Delta x^2}$$

- Conditions d'interface :

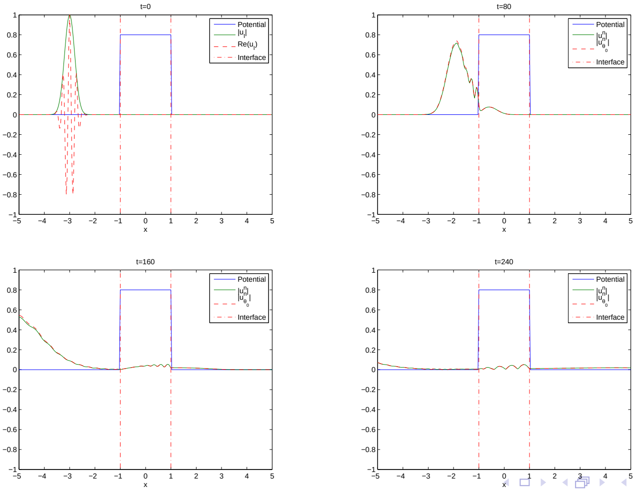
$$\begin{cases} e^{-\frac{\theta_0}{2}} u_0^+ = u_0 \\ e^{-\frac{3}{2}\theta_0}(u_1 - u_0^+) = u_1^- - u_0 \end{cases}$$

$\longrightarrow$ Laplacien modifié

$$\Delta_{\theta_0} u_j = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{cases} u_{j-1} - (1 + e^{-\theta_0})u_j + e^{-\frac{3}{2}\theta_0} u_{j+1}, & \text{if } j = 0 \\ e^{\frac{\theta_0}{2}} u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}, & \text{if } j = 1 \\ u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}, & \text{sinon} \end{cases}$$

Résultats

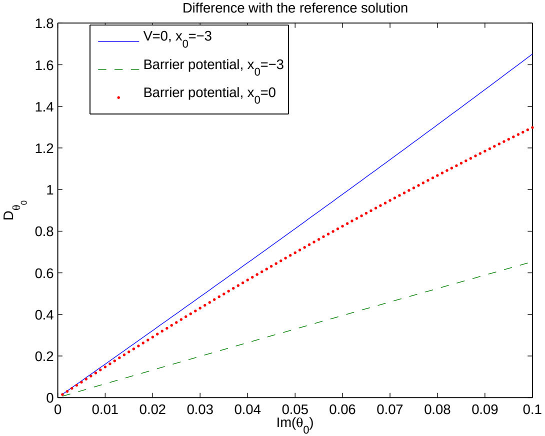
Représentation de $u_{\theta_0}(t) = e^{-itH_{\theta_0}} u_I$ et $u(t) = e^{-itH} u_I$ pour $\theta_0 = i\mathrm{Im}(\theta_0)$ et $\mathrm{Im}(\theta_0) = 0.09$



Résultats

Représentation de $D_{\theta_0} = \sup_{t \in [0,T]} 100 \dfrac{\|u_{\theta_0}(t) - u(t)\|}{\|u_I\|}$

(x_0 centre du paquet d'onde initial)



Evolution adiabatiques des résonances

- Potentiel dépendant du temps
  $V(t) - W^h(t) = V(t) - W_1^h(t) - W_2^h(t)$ avec
  $$W_1^h(t,x) = \sum_{j=1}^{J} w_j\left(t, \frac{x-x_j}{h}\right) \quad \text{et} \quad W_2^h(t) = \sum_{j=1}^{J} \alpha_j(t) h\delta(x-x_j)$$
  régulier en temps t.q.
  $$H_{\theta_0}(t) = -h^2\partial_x^2 + V(x) - \left(W_1^h(t,x) + W_2^h(t,x)\right) \quad + \quad \text{Cond. d'interface}$$
  a ℓ résonances $z_1(t), \dots, z_\ell(t)$ vérifiant la "Gap condition"

Evolution adiabatiques des résonances

- Potentiel dépendant du temps
  $V(t) - W^h(t) = V(t) - W_1^h(t) - W_2^h(t)$ avec

$$W_1^h(t,x) = \sum_{j=1}^{J} w_j\left(t, \frac{x-x_j}{h}\right) \quad \text{et} \quad W_2^h(t) = \sum_{j=1}^{J} \alpha_j(t) h\delta(x-x_j)$$

  régulier en temps t.q.

$$H_{\theta_0}(t) = -h^2\partial_x^2 + V(x) - \left(W_1^h(t,x) + W_2^h(t,x)\right) \quad + \text{ Cond. d'interface}$$

  a ℓ résonances $z_1(t), \ldots, z_\ell(t)$ vérifiant la "Gap condition"
- Soient :
  - $\theta_0 = ih^{N_0}$, $N_0 > 1$

Evolution adiabatiques des résonances

- Potentiel dépendant du temps
  $V(t) - W^h(t) = V(t) - W_1^h(t) - W_2^h(t)$ avec

$$W_1^h(t,x) = \sum_{j=1}^{J} w_j\left(t, \frac{x-x_j}{h}\right) \quad \text{et} \quad W_2^h(t) = \sum_{j=1}^{J} \alpha_j(t) h\delta(x-x_j)$$

  régulier en temps t.q.

$$H_{\theta_0}(t) = -h^2\partial_x^2 + V(x) - \left(W_1^h(t,x) + W_2^h(t,x)\right) \quad + \text{ Cond. d'interface}$$

  a ℓ résonances $z_1(t), \dots, z_\ell(t)$ vérifiant la "Gap condition"

- Soient :
  - $\theta_0 = ih^{N_0}$, $N_0 > 1$
  - $\varepsilon = e^{-\frac{\tau}{h}}$, $\tau > 0$

Evolution adiabatiques des résonances

- Potentiel dépendant du temps
$V(t) - W^h(t) = V(t) - W_1^h(t) - W_2^h(t)$ avec

$$W_1^h(t,x) = \sum_{j=1}^{J} w_j\left(t, \frac{x-x_j}{h}\right) \quad \text{et} \quad W_2^h(t) = \sum_{j=1}^{J} \alpha_j(t) h\delta(x-x_j)$$

régulier en temps t.q.

$$H_{\theta_0}(t) = -h^2\partial_x^2 + V(x) - \left(W_1^h(t,x) + W_2^h(t,x)\right) \quad + \text{ Cond. d'interface}$$

a ℓ résonances $z_1(t), \ldots, z_\ell(t)$ vérifiant la "Gap condition"

- Soient :
    - $\theta_0 = ih^{N_0}$, $N_0 > 1$
    - $\varepsilon = e^{-\frac{\tau}{h}}$, $\tau > 0$

alors le théorème adiabatique (TA) est vérifié pour l'opérateur

$$\mathcal{H}(t) = H_{\theta_0}(\theta_0)(t)$$

et les v.p. $z_1(t), \ldots, z_\ell(t)$ (Erreur $\varepsilon^{1-\delta}$, $0 < \delta < 1$)

Diode à effet tunnel résonnant

- Hamiltonien non linéaire :

$$H = -h^2\partial_x^2 + V - W^h + V_{NL}$$

où V_{NL} potentiel de Poisson

- Résonance de plus basse énergie

$$z_0 = E_0 + \mathcal{O}\left(e^{\frac{-2S_0}{h}}\right)$$

- Paramètre adiabatique

$$\varepsilon = e^{\frac{-2S_0}{h}}$$

Diode à effet tunnel résonnant

- Hamiltonien non linéaire :

$$H = -h^2\partial_x^2 + V - W^h + V_{NL}$$

- Infinité de Scrhödinger :

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\Psi_k(t) = H(t)\Psi_k(t) \\ \Psi_k(0) = \Phi_k \end{cases} \qquad \text{où} \qquad \Phi_k \qquad \text{loc. autour de } k^2$$

Diode à effet tunnel résonnant

- Hamiltonien non linéaire :

$$H = -h^2\partial_x^2 + V - W^h + V_{NL}$$

- Infinité de Scrhödinger :

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\Psi_k(t) = H(t)\Psi_k(t) \\ \Psi_k(0) = \Phi_k \end{cases} \quad \text{où} \quad \Phi_k \quad \text{loc. autour de } k^2$$

Densité de charge (Landauer-Büttiker)

$$n(t,x) = \int_{\mathbb{R}_+} g(k^2)|\Psi_k(t,x)|^2 \frac{dk}{2\pi h}$$

Diode à effet tunnel résonnant

- Hamiltonien non linéaire :

$$H = -h^2\partial_x^2 + V - W^h + V_{NL}$$

- Infinité de Scrhödinger :

$$\begin{cases} i\varepsilon\partial_t\Psi_k(t) = H(t)\Psi_k(t) \\ \Psi_k(0) = \Phi_k \end{cases} \quad \text{où} \quad \Phi_k \quad \text{loc. autour de } k^2$$

Potentiel de Poisson

$$\begin{cases} -\partial_x^2 V_{NL}(t,x) = \gamma n(t,x), & x \in (a,b),\ t > 0 \\ V_{NL}(t,a) = V_{NL}(t,b) = 0, & t > 0 \end{cases}$$

Densité de charge (Landauer-Büttiker)

$$n(t,x) = \int_{\mathbb{R}_+} g(k^2)|\Psi_k(t,x)|^2 \frac{dk}{2\pi h}$$

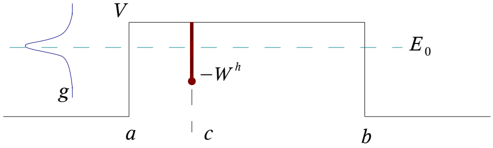
Evolution de la charge

- Charge dans le puits

$$A(t) = \int_{\mathbb{R}} \chi(x) n(t,x) dx$$
$$= \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}} g(k^2) \chi(x) |\Psi_k(t,x)|^2 dkdx$$

où

- χ supportée autour de c t.q. $\chi(c) = 1$
- g supportée autour de E_0



Approximation adiabatique

Objectifs :

- Répartition g supportée autour de E_0 donc [TA] donne

$$A(t) = \int_{\mathbb{R}_+} g(k^2)|\beta(t,k)|^2 \frac{dk}{2\pi h} (\chi G_0(t), G_0(t))_{L^2} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\delta}\right),$$

où $\delta \in (0,1)$ et $G_0(t)$ mode résonnant $H(t)G_0(t) = z_0(t)G_0(t)$

Approximation adiabatique

Objectifs :

- Répartition g supportée autour de E_0 donc [TA] donne

$$A(t) = \int_{\mathbb{R}_+} g(k^2)|\beta(t,k)|^2 \frac{dk}{2\pi h} (\chi G_0(t), G_0(t))_{L^2} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^\delta\right),$$

où $\delta \in (0,1)$ et $G_0(t)$ mode résonnant $H(t)G_0(t) = z_0(t)G_0(t)$

$\longrightarrow$ Equation différentielle

$$\frac{d}{dt}A(t) = -2\frac{\Gamma_0(t)}{\varepsilon}A(t) + g(E_0(t))\Lambda(E_0(t))$$

où $z_0(t) = E_0(t) - i\Gamma_0(t)$ et $\Lambda(E)$ t.q. $\|\Lambda\|_{L^\infty(\operatorname{supp} g)} = \mathcal{O}(1)$
(Rejoint [Presilla, Sjöstrand, ´96])

Modèle réduit pour les RTD

- Potentiel W^h = puits quantique

$\longrightarrow$ approximation $n(t,x) \approx A(t)\delta_c(x)$

- Modèle réduit

Modèle réduit pour les RTD

- Potentiel W^h = puits quantique

$\longrightarrow$ approximation $n(t,x) \approx A(t)\delta_c(x)$

- Modèle réduit

Equation de Poisson

$$\begin{cases} -\partial_x^2 V_{NL}(t,x) = A(t)\delta_c(x), & x \in (a,b),\ t > 0 \\ V_{NL}(t,a) = V_{NL}(t,b) = 0, & t > 0 \end{cases}$$

Modèle réduit pour les RTD

- Potentiel W^h = puits quantique

$\longrightarrow$ approximation $n(t,x) \approx A(t)\delta_c(x)$

- Modèle réduit

  Evolution de la charge

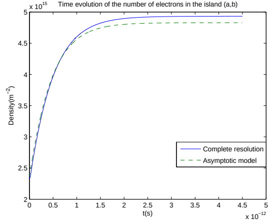
$$\frac{d}{dt}A(t) = -2\frac{\Gamma_0(t)}{\varepsilon}A(t) + 2\frac{\Gamma_0(t)}{\varepsilon}g(E_0(t))$$

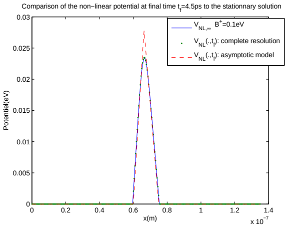
Equation de Poisson

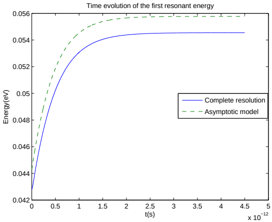
$$\begin{cases} -\partial_x^2 V_{NL}(t,x) = A(t)\delta_c(x), & x \in (a,b),\ t > 0 \\ V_{NL}(t,a) = V_{NL}(t,b) = 0, & t > 0 \end{cases}$$

Résultats

- Cas d'un shift de potentiel brutal appliqué







Perspectives

- Terminer l'asymptotique dans le cas linéaire avec un potentiel δ_c
- Justification de l'utilisation du modèle réduit
  - pour des potentiels plus généraux
  - dans le cadre non linéaire