Confinement et limite forte densité pour le système Schrödinger-Poisson system

Raymond El HAJJ

INSA de Rennes - IRMAR

Journée d'équipe Analyse Numérique, 8/4/2010

Travail en collaboration avec *Naoufel Ben Abdallah (IMT)*

Outline

- Description du profil du potentiel de confinement dans les gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG).
- Le modèle Schrödinger-Poisson est l'un des modèles les plus utilisés pour décrire le transport quantique balistique des particules chargées dans les semi-conducteurs.
- In [N. Ben Abdallah and E. Polizzi, 2002], an approximate quantum model , (less expensive numerically than the 3D system) was derived and used to simulate 2DEGs.
- [E. Polizzi, N. Ben Abdallah, 2001] : simulation des 2DEG par un modèle de Schrödinger-Poisson approché tenant compte de manière moyennée du potentiel de confinement. Avantages : modèle précis et moins coûteux numériquement que le modèle $3D$.
- [N. Ben Abdallah, F. Méhats and O. Pinaud, 2004], [O. Pinaud, 2004].

- Le profil de potentiel de confinement V_c et son échelle de variations ε sont donnés :

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = -\frac{1}{2}\Delta_{x,z}\psi^\varepsilon + V^\varepsilon \psi^\varepsilon + V_c^\varepsilon \psi^\varepsilon,$$

$$V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi\sqrt{|x|^2 + z^2}} * (|\psi^\varepsilon|^2),$$

avec $x \in \mathbb{R}^2$ et $z \in \mathbb{R}$ (directions de transport et de confinement).

- Le profil de potentiel de confinement V_c et son échelle de variations ε sont donnés :

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = -\frac{1}{2}\Delta_{x,z}\psi^\varepsilon + V^\varepsilon \psi^\varepsilon + V_c^\varepsilon \psi^\varepsilon,$$

$$V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi\sqrt{|x|^2+z^2}} * (|\psi^\varepsilon|^2),$$

avec $x \in \mathbb{R}^2$ et $z \in \mathbb{R}$ (directions de transport et de confinement).

- Le potentiel de confinement, V_c^ε, est donné par

$$V_c^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} V_c\left(\frac{z}{\varepsilon}\right), \tag{1}$$

où V_c est une fonction donnée (profil du confinement) et ε est l'échelle spatiale de ses variations (donnée).

- Le profil de potentiel de confinement V_c et son échelle de variations ε sont donnés :

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = -\frac{1}{2}\Delta_{x,z}\psi^\varepsilon + V^\varepsilon \psi^\varepsilon + V_c^\varepsilon \psi^\varepsilon,$$

$$V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi\sqrt{|x|^2+z^2}} * (|\psi^\varepsilon|^2),$$

avec $x \in \mathbb{R}^2$ et $z \in \mathbb{R}$ (directions de transport et de confinement).

- Le potentiel de confinement, V_c^ε, est donné par

$$V_c^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} V_c\left(\frac{z}{\varepsilon}\right), \tag{1}$$

où V_c est une fonction donnée (profil du confinement) et ε est l'échelle spatiale de ses variations (donnée).

- But de ce travail : justification du scaling (1) par l'analyse d'un système S.P unidimensionnel (suivant z) stationnaire.

Position du problème

- Le système est supposé fermé et occupe l'intervalle $[0,1]$. Les électrons se répartissent sur des niveaux d'énergies discrets.

Position du problème

- Le système est supposé fermé et occupe l'intervalle $[0,1]$. Les électrons se répartissent sur des niveaux d'énergies discrets.
- Le potentiel de confinement, $V_\varepsilon(z)$, vérifie

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2\varphi_p}{dz^2} + V_\varepsilon\varphi_p = \mathcal{E}_p\varphi_p \qquad z\in[0,1], \\ \varphi_p \in H_0^1(0,1), \ \displaystyle\int_0^1 \varphi_p\varphi_q = \delta_{pq} \\ -\varepsilon^3\dfrac{d^2V_\varepsilon}{dz^2} = \dfrac{1}{\mathcal{Z}}\displaystyle\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\mathcal{E}_p}|\varphi_p|^2, \quad \mathcal{Z} = \sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\mathcal{E}_p} \\ V_\varepsilon(0)=0, \quad \dfrac{dV_\varepsilon}{dz}(1)=0. \end{cases} \tag{2}$$

Position du problème

- Le système est supposé fermé et occupe l'intervalle $[0,1]$. Les électrons se répartissent sur des niveaux d'énergies discrets.
- Le potentiel de confinement, $V_\varepsilon(z)$, vérifie

$$
\begin{cases}
-\dfrac{d^2\varphi_p}{dz^2} + V_\varepsilon \varphi_p = \mathcal{E}_p \varphi_p \qquad z \in [0,1], \\
\varphi_p \in H_0^1(0,1), \; \displaystyle\int_0^1 \varphi_p \varphi_q = \delta_{pq} \\
-\varepsilon^3 \dfrac{d^2 V_\varepsilon}{dz^2} = \dfrac{1}{\mathcal{Z}} \displaystyle\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\mathcal{E}_p} |\varphi_p|^2, \quad \mathcal{Z} = \displaystyle\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\mathcal{E}_p} \\
V_\varepsilon(0) = 0, \quad \dfrac{dV_\varepsilon}{dz}(1) = 0.
\end{cases}
\tag{2}
$$

- Le paramètre ε est calculé en fonction de la longueur de Debye adimensionnée :

$$
\varepsilon^3 = \left(\frac{\lambda_D}{L}\right)^2, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T \varepsilon_0 \varepsilon_r}{e^2 N}}, \quad N = \frac{N_s}{L}
$$

- Le système est supposé fermé et occupe l'intervalle $[0,1]$. Les électrons se répartissent sur des niveaux d'énergies discrets.
- Le potentiel de confinement, $V_\varepsilon(z)$, vérifie

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2\varphi_p}{dz^2} + V_\varepsilon \varphi_p = \mathcal{E}_p \varphi_p \qquad z \in [0,1], \\ \varphi_p \in H_0^1(0,1), \ \displaystyle\int_0^1 \varphi_p \varphi_q = \delta_{pq} \\ -\varepsilon^3 \dfrac{d^2 V_\varepsilon}{dz^2} = \dfrac{1}{\mathcal{Z}} \displaystyle\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\mathcal{E}_p} |\varphi_p|^2, \quad \mathcal{Z} = \displaystyle\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\mathcal{E}_p} \\ V_\varepsilon(0) = 0, \quad \dfrac{dV_\varepsilon}{dz}(1) = 0. \end{cases} \tag{2}$$

- Le paramètre ε est calculé en fonction de la longueur de Debye adimensionnée :

$$\varepsilon^3 = \left(\frac{\lambda_D}{L}\right)^2, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T \varepsilon_0 \varepsilon_r}{e^2 N}}, \quad N = \frac{N_s}{L}$$

- ε est supposé petit et nous étudions la limite ε tend vers zéro.

IRMAR

- Nous montrons que $V_\varepsilon \sim \tilde{V}_\varepsilon$ tel que $\tilde{V}_\varepsilon$ est solution de

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2\tilde{\varphi}_1}{dz^2} + \tilde{V}_\varepsilon \tilde{\varphi}_1 = \tilde{\mathcal{E}}_1 \tilde{\varphi}_1 \qquad z \in [0,1], \\ \tilde{\mathcal{E}}_1 = \inf\limits_{\varphi \in H_0^1(0,1), \|\varphi\|_{L^2}=1} \left\{ \displaystyle\int_0^1 |\varphi'|^2 + \int_0^1 \tilde{V}_\varepsilon \varphi^2 \right\}, \\ -\varepsilon^3 \dfrac{d^2 \tilde{V}_\varepsilon}{dz^2} = |\tilde{\varphi}_1|^2, \\ \tilde{V}_\varepsilon(0) = 0, \quad \dfrac{d\tilde{V}_\varepsilon}{dz}(1) = 0 \end{cases} \tag{3}$$

- Asymptotiquement, seul le premier niveau d'énergie est occupé. [E. Polizzi, N. Ben Abdallah, J. Comp. Phys., 2005]

- Nous montrons rigoureusement que ces deux modèles sont proches et nous estimons leur différence en fonction de ε.

D'autre part, on montre que $\tilde{V}_\varepsilon \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} \frac{1}{\varepsilon^2} U_0(\frac{\cdot}{\varepsilon})$ avec un profil, U_0, vérifiant

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2\psi_1}{d\xi^2} + U_0\psi_1 = E_1\psi_1 \qquad \xi \in [0, +\infty[, \\ E_1 = \inf\limits_{\psi \in H_0^1(\mathbb{R}^+), \|\psi\|_{L^2}=1} \left\{ \displaystyle\int_0^{+\infty} |\psi'|^2 + \int_0^{+\infty} U_0\psi^2 \right\}, \\ -\dfrac{d^2 U_0}{d\xi^2} = |\psi_1|^2, \\ U_0(0) = 0, \quad \dfrac{dU_0}{d\xi} \in L^2(\mathbb{R}^+). \end{cases} \tag{4}$$

Etude du problème limite

- Les problèmes initiale et intermédiaire sont bien posés. Ils se reformulent en des problèmes de minimisation convexe [F. Nier, 1990].
- Le problème limite est posé sur un domaine non borné $[0, +\infty[$.

- Les problèmes initiale et intermédiaire sont bien posés. Ils se reformulent en des problèmes de minimisation convexe [F. Nier, 1990].
- Le problème limite est posé sur un domaine non borné $[0, +\infty[$.

Theorem (1)

Soit $J_0(.)$ la fonctionnelle définie sur $\dot{H}_0^1(\mathbb{R}^+)$ par

$$J_0(U) = \frac{1}{2}\int_0^{+\infty} |U'|^2 - E_1^\infty[U],$$

où $E_1^\infty[U]$ est le mode fondamental de l'opérateur de Schrödinger. Le problème limite (4) admet une unique solution (U_0, E_1, ψ_1), et U_0 satisfait le problème de minimisation suivant :

$$J_0(U_0) = \inf_{U \in \dot{H}_0^1(\mathbb{R}^+)} J_0(U).$$

$$\dot{H}_0^1(\mathbb{R}^+) = \left\{U \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^+),\ U' \in L^2(\mathbb{R}^+),\ U(0) = 0, \text{ and } U \geq 0\right\}$$

Theorem (2)

Soit V_ε, $\tilde{V}_\varepsilon$ et U_0 les potentiels satisfaisant (2), (3) et (4) respectivement. Les estimations suivantes sont vérifiées

$$\|V_\varepsilon - \tilde{V}_\varepsilon\|_{H^1(0,1)} = \mathcal{O}(e^{-\frac{c}{\varepsilon^2}}),$$

$$\|\tilde{V}_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} U_0(\frac{\cdot}{\varepsilon})\|_{H^1(0,1)} = \mathcal{O}(e^{-\frac{c}{\varepsilon}}),$$

où c est une constante générique strictement positive et indépendante de ε.

- Soit $(\chi_p(Z), \Lambda_p)$ les éléments propres de $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dZ^2} + W$ avec conditions de Dirichlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_p}{dZ^2} + W\chi_p = \Lambda_p\chi_p; \quad Z \in [0, L].$$

- La densité électronique est donné par

$$n(Z) = \sum_{p=1}^{+\infty} n_p |\chi_p(Z)|^2.$$

- Dans le cas de statistique de Boltzmann,

$$n_p = \frac{N_s}{\mathcal{Z}} \exp\left(-\frac{\Lambda_p}{k_B T}\right), \quad \mathcal{Z} = \sum_{q=1}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\Lambda_q}{k_B T}\right),$$

où N_s est la densité surfacique supposé donné ($N_s = \int_0^L n(Z)dZ$).

- Le potentiel electrostatique W vérifie

$$-\frac{d^2 W}{dZ^2} = \frac{e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_r} n, \quad W(0) = 0, \frac{dW}{dZ}(L) = 0.$$

Remarques sur le scaling

- On adimensionne ce problème en posant,

$$z = \frac{Z}{L} \in [0,1], \quad W(Z) = (k_B T) V\left(\frac{Z}{L}\right), \quad \Lambda_p = (k_B T)\mathcal{E}_p, \quad \chi_p(Z) = \frac{1}{\sqrt{L}}\varphi_p\left(\frac{Z}{L}\right)$$

.

- On suppose que

$$\frac{\hbar^2}{2mL^2} = k_B T.$$

- $(\varphi_p, \mathcal{E}_p, V)$ vérifie le problème (2) avec

$$\varepsilon^3 = \left(\frac{\lambda_D}{L}\right)^2, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T \varepsilon_0 \varepsilon_r}{q^2 N}},$$

où $N = \dfrac{N_s}{L}$ est la densité volumique.

Etude du problème limite

- Pour tout $U \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+)$, $U \geq 0$, le mode fondamental de l'opérateur de Schrödinger est donné par :

$$E_1^\infty[U] = \inf_{\psi \in H_0^1(\mathbb{R}^+), \|\psi\|_{L^2}=1} \left(\int_0^{+\infty} |\psi'|^2 + \int_0^{+\infty} U\psi^2 \right).$$

- $E_1^\infty[U]$ n'est pas forcement une valeur propre (c'est la borne inférieure du spectre essentiel).

- Nous étudions les propriétés de $E_1^\infty[.]$ et nous établissons des conditions suffisantes sur le potentiel pour que $E_1^\infty[.]$ soit atteint.

Propriétés du mode fondamental de l'opérateur de Schrödinger sur $[0, +\infty[$

1. La fonction $U \mapsto E_1^\infty[U]$ est continue, concave, et croissante à valeur dans $\overline{\mathbb{R}^+} := [0, +\infty]$ t.q.
$$E_1^\infty[U] \leq \limsup_{\xi \to +\infty} U(\xi).$$

Propriétés du mode fondamental de l'opérateur de Schrödinger sur $[0, +\infty[$

1. La fonction $U \mapsto E_1^\infty[U]$ est continue, concave, et croissante à valeur dans $\overline{\mathbb{R}^+} := [0, +\infty]$ t.q.
$$E_1^\infty[U] \leq \limsup_{\xi \to +\infty} U(\xi).$$
2. Si $U \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+)$, $U \geq 0$ t.q. $E_1^\infty[U] < \liminf_{\xi \to +\infty} U(\xi)$, alors $E_1^\infty[U]$ est atteint par une unique fonction positive $\psi_1[U]$. En plus,
$$\frac{dE_1^\infty}{dU}[U].W = \int_0^{+\infty} |\psi_1[U]|^2 W d\xi$$
$\forall$ W in $L^\infty_c(\mathbb{R}^+) \hookrightarrow$ (Principe de concentration-compacité [P. L. Lions, 84]).

1. La fonction $U \mapsto E_1^\infty[U]$ est continue, concave, et croissante à valeur dans $\overline{\mathbb{R}^+} := [0,+\infty]$ t.q.
$$E_1^\infty[U] \leq \limsup_{\xi\to+\infty} U(\xi).$$
2. Si $U \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+)$, $U \geq 0$ t.q. $E_1^\infty[U] < \liminf_{\xi\to+\infty} U(\xi)$, alors $E_1^\infty[U]$ est atteint par une unique fonction positive $\psi_1[U]$. En plus,
$$\frac{dE_1^\infty}{dU}[U].W = \int_0^{+\infty} |\psi_1[U]|^2 W d\xi$$
$\forall$ W in $L_c^\infty(\mathbb{R}^+) \hookrightarrow$ (Principe de concentration-compacité [P. L. Lions, 84]).
3. Soit $U \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+)$ positive, $\lim_{\xi\to+\infty} U(\xi)$ existe, $U \leq \lim_{\xi\to+\infty} U(\xi)$, et $E_1^\infty[U] = \lim_{\xi\to+\infty} U(\xi)$. Alors,
$$\frac{dE_1^\infty}{dU}[U].W = 0$$
pour tout $W \in L_c^\infty(\mathbb{R}^+)$.

1. La fonction $U \mapsto E_1^\infty[U]$ est continue, concave, et croissante à valeur dans $\overline{\mathbb{R}^+} := [0,+\infty]$ t.q.
$$E_1^\infty[U] \leq \limsup_{\xi \to +\infty} U(\xi).$$
2. Si $U \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+)$, $U \geq 0$ t.q. $E_1^\infty[U] < \liminf_{\xi\to+\infty} U(\xi)$, alors $E_1^\infty[U]$ est atteint par une unique fonction positive $\psi_1[U]$. En plus,
$$\frac{dE_1^\infty}{dU}[U].W = \int_0^{+\infty} |\psi_1[U]|^2 W d\xi$$
$\forall$ W in $L_c^\infty(\mathbb{R}^+)$$\hookrightarrow$ (Principe de concentration-compacité [P. L. Lions, 84]).
3. Soit $U \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+)$ positive, $\lim_{\xi\to+\infty} U(\xi)$ existe, $U \leq \lim_{\xi\to+\infty} U(\xi)$, et $E_1^\infty[U] = \lim_{\xi\to+\infty} U(\xi)$. Alors,
$$\frac{dE_1^\infty}{dU}[U].W = 0$$
pour tout $W \in L_c^\infty(\mathbb{R}^+)$.
4. Pour tout $\alpha \geq 0$,
$$E_1^\infty[\alpha\sqrt{\xi}] = \alpha^{\frac{4}{5}} E_1^\infty[\sqrt{\xi}].$$

- Rappel : $J_0(U_0) = inf_{U \in \dot{H}_0^1(\mathbb{R}^+)} J_0(U)$, $J_0(U) = \frac{1}{2}\int_0^{+\infty} |U'|^2 - E_1^\infty[U]$.
- J_0 est continue, strictement convexe et coercive sur $\dot{H}_0^1(\mathbb{R}^+)$.
- L'équation d'Euler-Lagrange pour U_0 est

$$-U_0'' = \frac{dE_1^\infty}{dU}[U_0] \geq 0.$$

- U_0 est une fonction concave, continue et $\lim\limits_{+\infty} U_0$ existe dans $\bar{\mathbb{R}}^+$.
- Nous montrons en plus que $E_1^\infty[U_0] < \lim_{+\infty} U_0$ ce qui implique que $E_1^\infty[U_0]$ est atteint en une unique fonction positive ψ_1 et

$$\frac{dE_1^\infty}{dU}[U_0] = |\psi_1|^2.$$

- Changement de variables

$$\varphi_p(z) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\psi_p(\frac{z}{\varepsilon}), \quad \mathcal{E}_p = \frac{1}{\varepsilon^2}E_p, \quad V_\varepsilon(z) = \frac{1}{\varepsilon^2}U_\varepsilon(\frac{z}{\varepsilon}), \quad \xi = \frac{z}{\varepsilon}.$$

- Changement de variables

$$\varphi_p(z) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\psi_p(\frac{z}{\varepsilon}), \quad \mathcal{E}_p = \frac{1}{\varepsilon^2}E_p, \quad V_\varepsilon(z) = \frac{1}{\varepsilon^2}U_\varepsilon(\frac{z}{\varepsilon}), \quad \xi = \frac{z}{\varepsilon}.$$

$\Rightarrow$

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2\psi_p}{d\xi^2} + U_\varepsilon\psi_p = E_p\psi_p, & \xi \in \left[0, \dfrac{1}{\varepsilon}\right], \\ -\dfrac{d^2 U_\varepsilon}{d\xi^2} = \dfrac{1}{\tilde{\mathcal{Z}}}\displaystyle\sum_{p=1}^{+\infty} e^{\frac{-E_p}{\varepsilon^2}}|\psi_p|^2, & \tilde{\mathcal{Z}} = \displaystyle\sum_{p=1}^{+\infty} e^{\frac{-E_p}{\varepsilon^2}}. \end{cases}$$

- $(E_p)_{p\geq 1}$ sont simples, distincts et forment une suite croissante. En plus, $\exists$ un gap uniforme séparant E_1 et $(E_p)_{p\geq 2}$.

Analyse asymptotique (étude formelle)

- $(E_p)_{p\geq 1}$ sont simples, distincts et forment une suite croissante. En plus, $\exists$ un gap uniforme séparant E_1 et $(E_p)_{p\geq 2}$.
- $(e^{\frac{-E_p}{\varepsilon^2}})_{p\geq 2}$ sont tous donc négligeables devant le premier ($p = 1$) quand ε devient petit.

- $(E_p)_{p\geq 1}$ sont simples, distincts et forment une suite croissante. En plus, $\exists$ un gap uniforme séparant E_1 et $(E_p)_{p\geq 2}$.
- $(e^{\frac{-E_p}{\varepsilon^2}})_{p\geq 2}$ sont tous donc négligeables devant le premier ($p=1$) quand ε devient petit.
- $U_\varepsilon \sim \tilde{U}_\varepsilon$ lorsque $\varepsilon \to 0$ avec

$$\left\{ \begin{array}{l} -\dfrac{d^2\tilde{\psi}_1}{d\xi^2} + \tilde{U}_\varepsilon \tilde{\psi}_1 = \tilde{E}_1 \tilde{\psi}_1, \qquad \xi \in \left[0, \dfrac{1}{\varepsilon}\right], \\ \tilde{E}_1 = \displaystyle\inf_{\psi \in H_0^1(0,\frac{1}{\varepsilon}),\ \|\psi\|_{L^2}=1} \left\{ \int_0^{\frac{1}{\varepsilon}} |\psi'|^2 + \int_0^{\frac{1}{\varepsilon}} \tilde{U}\psi^2 \right\}, \\ -\dfrac{d^2\tilde{U}_\varepsilon}{d\xi^2} = |\tilde{\psi}_1|^2. \end{array} \right. \tag{5}$$

- $(E_p)_{p\geq 1}$ sont simples, distincts et forment une suite croissante. En plus, $\exists$ un gap uniforme séparant E_1 et $(E_p)_{p\geq 2}$.
- $(e^{\frac{-E_p}{\varepsilon^2}})_{p\geq 2}$ sont tous donc négligeables devant le premier ($p=1$) quand ε devient petit.
- $U_\varepsilon \sim \tilde{U}_\varepsilon$ lorsque $\varepsilon \to 0$ avec

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2\tilde{\psi}_1}{d\xi^2} + \tilde{U}_\varepsilon \tilde{\psi}_1 = \tilde{E}_1 \tilde{\psi}_1, \qquad \xi \in \left[0, \dfrac{1}{\varepsilon}\right], \\ \tilde{E}_1 = \inf\limits_{\psi \in H_0^1(0,\frac{1}{\varepsilon}),\ \|\psi\|_{L^2}=1} \left\{ \displaystyle\int_0^{\frac{1}{\varepsilon}} |\psi'|^2 + \int_0^{\frac{1}{\varepsilon}} \tilde{U}\psi^2 \right\}, \\ -\dfrac{d^2\tilde{U}_\varepsilon}{d\xi^2} = |\tilde{\psi}_1|^2. \end{cases} \tag{5}$$

- $\tilde{U}_\varepsilon \to U_0$ quand $\varepsilon \to 0$.

Analyse asymptotique (idées de la preuve du Théorème 2)

- On a

$$A_\varepsilon(\tilde{\psi}_1) = \min_{\phi \in H_0^1(0, M_\varepsilon),\ \|\phi\|_{L^2}=1} A_\varepsilon(\phi), \quad A_0(\psi_1) = \min_{\phi \in H_0^1(\mathbb{R}^+),\ \|\phi\|_{L^2}=1} A_0(\phi)$$

où ($M_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon}$)

$$A_\varepsilon(\phi) = \int_0^{M_\varepsilon} |\phi'(\xi)|^2 d\xi + \frac{1}{2} \int_0^{M_\varepsilon} \int_0^{M_\varepsilon} \phi^2(\xi)\phi^2(\zeta) \min(\xi, \zeta) d\xi d\zeta$$

$$A_0(\phi) = \int_0^{+\infty} |\phi'(\xi)|^2 d\xi + \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \phi^2(\xi)\phi^2(\zeta) \min(\xi, \zeta) d\xi d\zeta.$$

Analyse asymptotique (idées de la preuve du Théorème 2)

- On a

$$A_\varepsilon(\tilde{\psi}_1) = \min_{\phi \in H_0^1(0,M_\varepsilon),\ \|\phi\|_{L^2}=1} A_\varepsilon(\phi), \quad A_0(\psi_1) = \min_{\phi \in H_0^1(\mathbb{R}^+),\ \|\phi\|_{L^2}=1} A_0(\phi)$$

où $(M_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon})$

$$A_\varepsilon(\phi) = \int_0^{M_\varepsilon} |\phi'(\xi)|^2 d\xi + \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon}\int_0^{M_\varepsilon} \phi^2(\xi)\phi^2(\zeta)\min(\xi,\zeta)d\xi d\zeta$$

$$A_0(\phi) = \int_0^{+\infty} |\phi'(\xi)|^2 d\xi + \frac{1}{2}\int_0^{+\infty}\int_0^{+\infty} \phi^2(\xi)\phi^2(\zeta)\min(\xi,\zeta)d\xi d\zeta.$$

- En utilisant ces reformulations et le fait que ψ_1 décroît exponentiellement à l'infini, on peut montrer que

$$\left\| \frac{d}{d\xi}(\tilde{U}_\varepsilon - U_0) \right\|^2_{L^2(0,M_\varepsilon)} = \mathcal{O}(e^{-\frac{c}{\varepsilon}}),$$

IRMAR

- On a

$$A_\varepsilon(\tilde{\psi}_1) = \min_{\phi \in H_0^1(0, M_\varepsilon),\ \|\phi\|_{L^2}=1} A_\varepsilon(\phi), \quad A_0(\psi_1) = \min_{\phi \in H_0^1(\mathbb{R}^+),\ \|\phi\|_{L^2}=1} A_0(\phi)$$

où $(M_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon})$

$$A_\varepsilon(\phi) = \int_0^{M_\varepsilon} |\phi'(\xi)|^2 d\xi + \frac{1}{2} \int_0^{M_\varepsilon} \int_0^{M_\varepsilon} \phi^2(\xi)\phi^2(\zeta) \min(\xi, \zeta) d\xi d\zeta$$

$$A_0(\phi) = \int_0^{+\infty} |\phi'(\xi)|^2 d\xi + \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \phi^2(\xi)\phi^2(\zeta) \min(\xi, \zeta) d\xi d\zeta.$$

- En utilisant ces reformulations et le fait que ψ_1 décroît exponentiellement à l'infini, on peut montrer que

$$\left\| \frac{d}{d\xi}(\tilde{U}_\varepsilon - U_0) \right\|^2_{L^2(0, M_\varepsilon)} = \mathcal{O}(e^{-\frac{c}{\varepsilon}}),$$

- Ceci implique que

$$\|\tilde{V}_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} U_0(\frac{\cdot}{\varepsilon})\|_{H^1(0,1)} = \mathcal{O}(e^{-\frac{c}{\varepsilon}}).$$

- On a

$$J_\varepsilon(U_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} J_\varepsilon(U), \quad \tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} \tilde{J}_\varepsilon(U),$$

Les fonctionnelles J_ε et $\tilde{J}_\varepsilon$ sont données par

$$J_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 + \varepsilon^2 \log\left(\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\frac{E_p[U]}{\varepsilon^2}}\right)$$

$$\tilde{J}_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 - E_1[U].$$

Analyse asymptotique (idées de la preuve du Théorème 2)

- On a
$$J_\varepsilon(U_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} J_\varepsilon(U), \quad \tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} \tilde{J}_\varepsilon(U),$$
Les fonctionnelles J_ε et $\tilde{J}_\varepsilon$ sont données par
$$J_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 + \varepsilon^2 \log\left(\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\frac{E_p[U]}{\varepsilon^2}}\right)$$
$$\tilde{J}_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 - E_1[U].$$
- Comparer U_ε et $\tilde{U}_\varepsilon$ revient à comparer $J_\varepsilon(U_\varepsilon)$ et $J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)$
$$\|U_\varepsilon - \tilde{U}_\varepsilon\|^2_{H^1(0,M_\varepsilon)} \leq c|J_\varepsilon(U_\varepsilon) - J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)|.$$

- On a
$$J_\varepsilon(U_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} J_\varepsilon(U), \quad \tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} \tilde{J}_\varepsilon(U),$$
Les fonctionnelles J_ε et $\tilde{J}_\varepsilon$ sont données par
$$J_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 + \varepsilon^2 \log\left(\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\frac{E_p[U]}{\varepsilon^2}}\right)$$
$$\tilde{J}_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 - E_1[U].$$
- Comparer U_ε et $\tilde{U}_\varepsilon$ revient à comparer $J_\varepsilon(U_\varepsilon)$ et $J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)$
$$\|U_\varepsilon - \tilde{U}_\varepsilon\|^2_{H^1(0,M_\varepsilon)} \leq c|J_\varepsilon(U_\varepsilon) - J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)|.$$
- On a,
$$\tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) \leq \tilde{J}_\varepsilon(U_\varepsilon) \leq J_\varepsilon(U_\varepsilon) \leq J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon).$$

- On a
$$J_\varepsilon(U_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} J_\varepsilon(U), \quad \tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} \tilde{J}_\varepsilon(U),$$
Les fonctionnelles J_ε et $\tilde{J}_\varepsilon$ sont données par
$$J_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 + \varepsilon^2 \log\left(\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\frac{E_p[U]}{\varepsilon^2}}\right)$$
$$\tilde{J}_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 - E_1[U].$$
- Comparer U_ε et $\tilde{U}_\varepsilon$ revient à comparer $J_\varepsilon(U_\varepsilon)$ et $J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)$
$$\|U_\varepsilon - \tilde{U}_\varepsilon\|^2_{H^1(0,M_\varepsilon)} \leq c|J_\varepsilon(U_\varepsilon) - J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)|.$$
- On a,
$$\tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) \leq \tilde{J}_\varepsilon(U_\varepsilon) \leq J_\varepsilon(U_\varepsilon) \leq J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon).$$
- Il existe une constante $G > 0$ indépendante de ε t.q.
$$E_p[\tilde{U}_\varepsilon] - E_1[\tilde{U}_\varepsilon] \geq G \quad \forall p \geq 2.$$

Analyse asymptotique (idées de la preuve du Théorème 2)

- On a

$$J_\varepsilon(U_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} J_\varepsilon(U), \quad \tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) = \inf_{U \in H^{1,0}(0,M_\varepsilon)} \tilde{J}_\varepsilon(U),$$

  Les fonctionnelles J_ε et $\tilde{J}_\varepsilon$ sont données par

$$J_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 + \varepsilon^2 \log\left(\sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\frac{E_p[U]}{\varepsilon^2}}\right)$$

$$\tilde{J}_\varepsilon(U) = \frac{1}{2}\int_0^{M_\varepsilon} |U'|^2 - E_1[U].$$

- Comparer U_ε et $\tilde{U}_\varepsilon$ revient à comparer $J_\varepsilon(U_\varepsilon)$ et $J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)$

$$\|U_\varepsilon - \tilde{U}_\varepsilon\|^2_{H^1(0,M_\varepsilon)} \leq c|J_\varepsilon(U_\varepsilon) - J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon)|.$$

- On a,

$$\tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) \leq \tilde{J}_\varepsilon(U_\varepsilon) \leq J_\varepsilon(U_\varepsilon) \leq J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon).$$

- Il existe une constante $G > 0$ indépendante de ε t.q.

$$E_p[\tilde{U}_\varepsilon] - E_1[\tilde{U}_\varepsilon] \geq G \quad \forall p \geq 2.$$

- On en déduit que

$$J_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) = \tilde{J}_\varepsilon(\tilde{U}_\varepsilon) + \mathcal{O}(\varepsilon^2 e^{-\frac{c_3}{\varepsilon^2}}).$$

- Dans le cas de statistique de Fermi-Dirac,

$$n_p^{FD} = f_{FD}(\mathcal{E}_p - \mathcal{E}_F),$$

où $\mathcal{E}_F$ est le niveau de Fermi et

$$f_{FD}(u) = \log(1 + e^{-u}),$$

Dans le cas de statistique de Boltzmann $f_B(u) = e^{-u}$. L'équation de Poisson,

$$-\frac{d^2 V}{d\xi^2} = \sum_{p=1}^{+\infty} f_{B(FD)}(\mathcal{E}_p - \mathcal{E}_F)|\varphi_p|^2, \quad \sum_{p=1}^{+\infty} f_{B(FD)}(\mathcal{E}_p - \mathcal{E}_F) = \frac{1}{\varepsilon^3}.$$

Cette étude peut être généralisée au cas de Fermi-Dirac avec quelques complications techniques.

Remarques et perspectives

- Si V satisfait une condition de type Dirichlet en $z = 1$, une autre couche limite apparaît en ce point. Cette analyse peut être faite dans ce cas, mais le 1er valeur propre admet asymptotiquement une multiplicité 2.
- Le problème multidimensionnel est beaucoup plus compliqué. La localisation de la couche limite peut dépendre de la géométrie du bord du domaine. Ce type de problème est présent par exemple dans l'étude de l'équation de Schrödinger avec champ magnétique [B., Hellfer, A. Mohamed, 96], [V. Bonnaillie, 2005].
- R. El Hajj, N. Ben Abdallah, *High density limit of the stationary one dimensional Schrödinger-Poisson system*, SIAM Multiscale Model. Simul., Vol.7 (2008), No. 1, pp. 124-146.

Merci de votre attention