HAL
open science

Modélisation et étude des propriétés optiques des nanotubes de carbone

Benjamin Ricaud

To cite this version:

Benjamin Ricaud. Modélisation et étude des propriétés optiques des nanotubes de carbone. Physique mathématique [math-ph]. Université du Sud Toulon Var, 2007. Français. NNT : . tel-00183627v2

HAL Id: tel-00183627

https://theses.hal.science/tel-00183627v2

Submitted on 30 Oct 2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DU SUD-TOULON-VAR
Centre de Physique Théorique

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DU SUD-TOULON-VAR

Spécialité : Physique Mathématique

par

Benjamin RICAUD

sous la direction des Pr. Horia CORNEAN et Pierre DUCLOS

Titre :

Modélisation et étude des propriétés optiques des nanotubes de carbone

Modelling and Study of Optical Properties of Carbon Nanotubes

soutenue publiquement le 22 octobre 2007

JURY

Prof. François BENTOSELA	Université de la Méditerranée	
Prof. Horia CORNEAN	Université d'Aalborg, Danemark	Directeur
Prof. Pierre DUCLOS	Université du Sud-Toulon-Var	Directeur
Prof. Alain JOYE	Université de Grenoble	
Prof. Gheorghe NENCIU	Université de Bucarest, Roumanie	Rapporteur
Prof. Valentin ZAGREBNOV	Université de la Méditerranée	Rapporteur

Table des matières

Liste des notations **8**

English Summary **9**

Introduction **13**

1 Modèle mathématique **17**
1.1 Modélisation du nanotube 17
1.2 Réduction à une dimension 22
1.3 Conclusion 37

2 Potentiel externe et réponse linéaire **39**
2.1 Modèle perturbé 40
2.2 Equation de Liouville 42
2.3 Approximation linéaire 52

3 Spectre d'absorption optique **57**
3.1 Définition 57
3.1.1 Définition physique 57
3.1.2 Définition mathématique 58
3.2 Basse température 62
3.3 Formule finale 65

4 Hamiltonien avec interaction entre électrons **67**
4.1 Introduction 67
4.1.1 Une particule dans un potentiel périodique 67
4.1.2 L'espace de Fock 68
4.1.3 Interaction entre électrons 70
4.2 Réduction à un sous-espace 71
4.2.1 Quelques suppositions physiques 71
4.2.2 Sous-espace de l'exciton 73
4.3 Théorie de perturbation 83
4.3.1 Interaction faible 84
4.3.2 Grand nombre de particules 89
4.4 Conclusion 111

5 Exciton et spectre d'absorption **113**
5.1 Modèle sur la ligne infinie 113
5.2 L'exciton 124
5.3 Coefficient d'absorption optique 125

6 L'exciton **129**
6.1 Du modèle à N particules au modèle a deux particules 129
6.2 L'influence du rayon et de la chiralité 131
6.3 Modèles effectif pour les excitons dans les nanotubes de carbone 131
6.4 Une comparaison avec des résultats variationnels 161

Conclusion **173**

Annexes **175**

A Propriétés du potentiel électron-électron **179**
A.1 Potentiel électron-électron sur le cylindre 179
A.2 Potentiel électron-électron sur le tore 181
A.2.1 comportement du modèle (A.7) 182
A.2.2 comportement du modèle (A.9) 183
A.3 Potentiel électron-électron sur le cercle 187

B Détail de certains calculs **191**
B.1 Noyau et norme L^2 191
B.2 Borne relative avec deux potentiels 192
B.3 Résolvente compacte et perturbation bornée 192
B.4 Une estimation pour $\|(H-\mu)(H-z)^{-1}\|$ 192
B.5 Une estimation de matrice 193
B.6 Relativement compact et relativement borné 193
B.7 La formule de Krein 194

Bibliographie **197**

Liste des notations

H_α, 112
H_{exc}, 90, 98
M_G, 82
M_{ex}, 82
$\mathcal{H}_\alpha$, 112
$\widetilde{H}$, 114
$\widetilde{M}_G$, 93
$d_\infty(z)$, 114
$\mathcal{D}$, 90
E_G, 72
E_c, 72
E_v, 72
$F(t)$, 38
F_0, 38
H_1, 70
H_c, 19
H_{diag}, 22
$H_\infty(\alpha)$, 113
H_{offdiag}, 22
H^0_{exc}, 112
H_{ex}, 72
H^0_{ex}, 83
L, 16
M, 71
M_G, 92
N, 16
$P_{\overline{n}}$, 20
S^1, 15
S_c, 78
S_o, 78
S_v, 78
V_c^r, 17
$V_c^{r,L}$, 18
V_{at}, 16
$W(t)$, 39
Z_1, 61
$\mathcal{H}^N$, 21
$\mathcal{H}^c$, 88
$\mathcal{H}^d$, 87
$\mathcal{H}_0$, 21
$\mathcal{H}_1$, 17
$\mathcal{H}_c$, 16
$\mathcal{H}_c^N$, 19
$\mathcal{H}_{\ell^2}$, 21
Λ, 15
$\Omega(t,s)$, 41
$\mathcal{S}_L$, 21
$\hat{u}_j$, 78
$\hat{v}^0_\infty$, 113
$\hat{v}^k_\infty$, 113
$\hat{w}$, 89
$\hat{w}_*$, 90
$\hat{w}_{d*}$, 90
λ, 17
$\rho(t)$, 41
ρ_{eq}, 40
$\mathcal{T}_{L,r}$, 15
$\varepsilon_c(k)$, 71
$\varepsilon_v(k)$, 71
$\widehat{v_L}$, 68
$\widetilde{E}_G$, 89, 93
$\widetilde{W}(t,s)$, 42
$a(t)$, 38
$a_{c,k}$, 70
$cond$, 72
h_e, 122
$v_I(k,n_1)$, 78
v_L, 21
v^r_{eff}, 177
v_{pqst}, 68
val, 72
$\mathcal{B}(X)$, 25
$\mathcal{D}_d$, 82
$\mathcal{E}$, 70
$\mathcal{E}_0$, 87
$\mathcal{E}_N$, 87
$\mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N)$, 21

English Summary

Nanophysics is one of the most promising fields of scientific and technological research in the forthcoming years. The numerous perspectives of applications in various domains such as electronics, biology, computer science or optics are extremely exciting for experimental research. This also stretches theoretical understanding of the behaviour of matter at the atomic scale.

The discovery of nanotubes in 1991 has stimulated research on nanostructures. These nanotubes are extremely thin tubes made of carbon atoms, with a diameter of a few nanometers and a length of a few micrometers. Due to their smallness, they are difficult to handle and physicists suggest the use of optical techniques to help to detect and sort them. One of the technique commonly used is to probe the absorption spectrum, which consist in sending a weak monochromatic light on the nanotube and measure the absorbed light with respect to the frequency. It turns out experimentally that each nanotube possesses its own signature, showing peaks of absorption for certain particular frequencies, depending on its radius and chirality[1]. More and more precise experimental data have been published in the past few years in [PRL01], [Sc02], [PRB05], [Sc05] and there is now a theoretical need to relate the peaks in the optical absorption spectrum to the parameters of nanotubes in order to allow for better detection.

The optical absorption spectrum is the linear response to the light excitation of a sample, at low temperature. This response was studied theoretically for the general case of crystals, first with Frenkel [Fr], then extended by Slater and Shockley [SS], Wannier [Wa] and Elliot [El]. They explain, the absorption peaks by the existence, at the quantum scale, of quasi-particles systems named *excitons*. These excitons have a noticeable influence in presence of a strong interaction between electrons. Indeed, for the case of the nanotube, the smallness of the radius confines the electrons in a quasi one-dimensional structure, enhancing their mutual interactions. From these results, several theoretical studies have been carried out for the precise case of nanotubes [PRB91], [A97], [P1], [P2] as well as numerical simulations using *ab initio* methods [PRB05], [PRB05-2] giving the first numerical relations between radius and absorption peaks. But parts of the cited studies do not always use rigourously justified approximations. In particular, it is not clear if results of the first studies on crystals could be used for the particular shape of nanotubes. Secondly, recent studies do not provide an analytic relation between frequencies of peaks and the radius and chirality of the nanotube. This study intends first to justify rigourously each step done in showing the relation between absorption coefficient, the excitons and the radius and chirality of the nanotube and secondly to establish an almost analytical relation between peaks and parameters of the tube.

In chapter 1, the first part introduces the mathematical model describing the nanotube. The configuration space is a torus. There is a periodic potential due to ions, smooth, fixed with respect to time, which means that phonons are neglected. There is a large number of electrons, number proportional to the length of the tube, interacting via a weak "periodised" Coulomb potential. The effect of spin is neglected. The second part explains how low energy eigenstates (states that interest physicists) of this model can be approximated by states of a one-dimensional model with periodic potential and an effective potential between electrons. The main result is

[1] This caracterize the periodic pattern made by carbon atoms along the nanotube

the theorem 1.2.2 which shows an essential property for the one-dimensional reduction, using perturbation theory. A discussion at the end of the section explains how one can conclude the reduction using information on the spectrum of the one-dimensional model, and suggest a way to get this missing information.

Chapter 2 analyses the effect of light sent into the nanotube, now modelised by the one-dimensional system. This external perturbation is a time dependent classical electromagnetic field. It is treated by mean of linear response theory and the perturbation is chosen to be weak and switched on adiabatically. Statistical physics tools are used to express the reaction of the nanotube to light : the density matrix, solution of the Liouville equation is introduced. It is shown to exist and to be unique. The difficulty is to deal with the initial condition at $-\infty$ and the fact that the perturbation is an unbounded operator. The density matrix is expressed perturbatively up to the second order, as a sum of trace class operators.

Chapter 3 gives the expression of the absorption spectrum with respect to the eigenstates of the one-dimensional system presented in chapter 1, without the light perturbation. Since the absorption spectrum is proportional to the real part of the conductivity, this latter quantity is calculated using Kubo's method [Ku57]. The density matrix properties established in the preceding chapter are used. The final expression is given provided the nanotubes are at low temperature.

Chapter 4 is a study of the eigenstates of the one-dimensional system given in chapter 1. The Fock space is introduced in order to take into account the fermionic behaviour of the electrons and to allow to express quantum states of the system with combinations of eigenstates of the system without interaction between electrons. Some physical suppositions are made in the section 4.2.1 ; It is supposed that there are only two bands a conduction and a valence band. The difference in energy between the two bands is a function of the crystal momentum which possesses a minimum strictly positive at the origin and behaves quadratically around the origin. Is is supposed that the study of the Hamiltonian restricted to a particular subspace which is called the "exciton subspace", will give the physically relevant information to calculate the absorption spectrum. It is what Wannier [Wa] and Mahan [Ma] do. It is taken here as a physical assumption and is not justified rigourously from a mathematical point of view. A perturbative study is then done in the weak coupling limit between electrons and in the limit of a large but not infinite number of particles. The study of the system is reduced to the determination of the eigenstates of an effective Hamiltonian H_{exc}.

Chapter 5 uses the results of chapter 3 and 4 to give the final formula for the absorption spectrum. In the limit of weak coupling between electrons the eigenstates of H_{exc} can be approximated by the ones of an Hamiltonian h describing two particles on a line interacting through an attractive effective potential, with the center of mass removed. The absorption spectrum is expressed using eigenstates of this latter Hamiltonian, and a estimation of the error committed by the successive estimations is given.

Chapter 6 compares h to an Hamiltonian introduced in [CDR2]. It is shown that after the reduction from the tube to the line in this publication, the resulting Hamiltonian given for small radius is an approximation of h, for weak coupling. It hence justifies the approach of [CDR2] to determine the absorption spectrum. The study [CDR2] is then given. It shows the dependence of the eigenstates of the exciton with respect to the radius of the tube. Almost analytic formulas show that the binding strength of the system increases as the radius gets smaller. The last section is in fact the publication [CPR] where the results of [CDR2] are compared with a physical study using a variational approach. It is shown that results are in excellent agreement.

Finally, a concluding chapter summarises the results, points out the limits of the approach and suggests some further interesting research on the subject.

The work presented here establishes a rigourous relation between, on one hand, studies in theoretical physics on the absorption spectrum of semiconductors [El], [Wa], and on the other

hand, specific studies on excitons in semiconductor nanotubes [P1], [P2],[KCM]. It has been shown, with the help of perturbation theory, that all the studies have a common one-dimensional Hamiltonian from which one can extract the behaviour of a part of the absorption spectrum, the part related to excitons. The part of the work published in [CDR2] gives also almost analytic expressions approximating the spectrum of the exciton Hamiltonian with respect to the radius of the nanotube, for a small radius, and the part published in [CPR] compares theses results with a variational approach and the results are in excellent agreement. Some limitations of the study can be pointed out :

- The reduction of the problem to the exciton subspace made in chapter 4 is not rigourously justified, this subspace does not correspond to the subspace containing the eigenvectors associated to the lowest energies. Physicists know that systems more complex than excitons, formed by more than two quasi-particles, such as the biexciton, should exist and these systems possess energy levels lower than those of the exciton. They should appear in the formula of the absorption spectrum or at least a rigourous justification of why they do not appear is needed.
- All along the study several approximations were made using the perturbation theory, giving estimates of the errors but no attempt was made to calculate precisely the error bars.
- The question of the reduction done in chapter 1 to a one-dimensional problem for small radius r is still pending, waiting for some information on the behaviour of the limit operator with r.

An interesting extension of this work could be to study the biexciton contribution to the spectrum. For that one must consider a subspace of the Fock space wider than the one taken in chapter 4. This could justify the choice made in chapter 4 and the first point in the list of limitations, if it shows that peaks in absorption associated to biexcitons do not exist or can be neglected. The dependence of the spectrum of the one-dimensional Hamiltonian of chapter 1 on the parameter r has to be evaluated in order to conclude the reduction in one dimension. This could open a way to the generalisation of the study to different sorts of nanostructures such as nanowires and quantum waveguides since the procedure of reduction to one dimension should be similar. One can also take into account more than two bands, as suggested in [KM], which should broaden the validity of the study to more nanotubes. Eventually, a work with more hypothetical results could be to study the non-linear response of the system to light, see the remark at the end of chapter 2.

Introduction

"There is plenty of room at the bottom[2]", c'est par ces mots que le lauréat du prix Nobel Richard Feynman soulignait en 1959, l'importance des recherches à venir sur l'infiniment petit. Il suggéra que l'on pourrait mettre toutes les informations de l'*encyclopædia Britannica* sur une tête d'épingle si l'on pouvait écrire en mettant des atomes bout à bout. Ce physicien est l'un des premiers à avoir vu l'importance de la nanophysique, et presque 50 ans plus tard, cette branche de la physique est en plein essor.

De nombreux progrès techniques, parmi eux l'invention des microscopes à effet tunnel (1981) et à force atomique (1986), ont ouvert la voie à l'étude et la manipulation de structures à l'échelle de l'atome. La découverte des nanotubes de carbone en 1991 a aussi contribué à de nombreuses avancées techniques et théoriques dans les nanosciences. Ces tubes d'un diamètre de quelques nanomètres et d'une longueur de quelques microns, de part leur structure relativement simple, sont des formidables objets d'étude. La compréhension de ces matériaux et la maîtrise de leur fabrication à l'échelle industrielle pourrait permettre de rapides évolutions techniques. La physique à l'échelle du nanomètre est un des domaines les plus prometteurs de la recherche scientifique et technologique des prochaines années. Les perspectives d'applications dans des domaines aussi variés que l'électronique, la biologie, l'informatique ou encore l'optique sont nombreuses et fascinantes, et sont un stimulant extrêmement puissant pour les recherches expérimentales et appliquées à l'heure actuelle. Elles poussent conjointement la recherche théorique à se pencher sur l'étude des nano-objets afin de mieux comprendre et expliquer les phénomènes physiques à très petite échelle.

Le comportement d'objets de quelques dizaines de nanomètres est expliqué en utilisant le formalisme de la mécanique quantique (non relativiste). Cette théorie, née au XXe siècle a remporté de grand succès en décrivant correctement les structures électroniques des atomes et molécules, en expliquant le phénomène de conduction électrique ou encore la supraconductivité. Le formalisme est basé sur le postulat, entre autres, que tout système physique à très petite échelle, est décrit par son équation de Schrödinger associée qui est une équation vectorielle aux dérivées partielles. Mais il est très rare de trouver des solutions directes de cette équation, il n'existe que quelques cas comme par exemple l'atome d'hydrogène, ou une particule piégée dans une boite. La plupart du temps, il n'y a que deux alternatives possibles : la résolution par le calcul numérique avec l'utilisation d'ordinateurs, ou bien la résolution en utilisant la théorie des perturbations. C'est cette dernière que l'on va utiliser ici. Elle permet de trouver les solutions approchées d'un système que l'on ne peut pas résoudre analytiquement en connaissant les solutions exactes d'un système apparenté, la différence entre les deux systèmes étant une petite perturbation quantifiée par un paramètre. Les approximations sont contrôlées par un terme d'erreur donné, relatif à la perturbation.

[2]"il y a plein de place en bas", R. Feynman, discours devant la Société Américaine de Physique, 1959.

La réponse optique

Ce travail s'intéresse au spectre optique d'une catégorie particulière de nano-matériaux, appelés nanotubes de carbone. Les nanotubes de carbone sont de long tubes extrèmement fins composés d'atomes de carbone. Ils sont produits à partir de feuilles de graphite, et divers procédés mécaniques et chimiques permettent de faire s'enrouler ces feuilles sur elles-mêmes, formant ainsi des tubes. Les propriétés des nanotubes dépendent essentiellement de deux paramètres, leur rayon et leur chiralité. Cette dernière est l'angle selon lequel le nanotube s'est enroulé par rapport au maillage hexagonal initial. On pourra se reporter à [SDD] pour plus de détails.

De part leur taille et leur rayon extrêmement petit, de l'ordre du nanomètre, les nanotubes sont difficiles à discerner et à manipuler. Les physiciens suggèrent d'utiliser des procédés optiques afin de les repérer et de les trier. Pour cela, l'une des techniques couramment utilisée par les expérimentateurs travaillant en optique linéaire est d'envoyer une lumière monochromatique de faible intensité sur le nanotube et de mesurer la puissance lumineuse absorbée, en fonction de la fréquence. La courbe décrivant le rapport puissance absorbée sur puissance envoyée, en fonction de la fréquence, s'appelle le spectre optique. Chaque nanotube possède un spectre optique particulier qui est lié à son rayon et à sa chiralité, cette technique de mesure de la réponse optique permet ainsi de les différencier. Des données expérimentales de plus en plus précises ont été publiées ces dernières années, on peut citer [PRL01], [Sc02], [PRB05], [Sc05]. Elles ont mis en évidence des pics d'absorption caractéristiques à certaines fréquences précises qui dépendent du type de nanotube.

Les physiciens, voir [AM], [Ma], [El], expliquent ces pics par l'existence sur le nanotube d'*excitons*, des quasi-particules dont l'influence est détectable en présence de fortes intéractions entre électrons. Ils estiment que l'effet des excitons, qui est négligeables dans des structures à 3 dimensions, est ici renforcé par le fait que les électrons sont confinés sur le tube, qui est un espace quasi-unidimensionnel. La prise en compte de la petitesse du rayon du nanotube, qui caractérise la propriété d'unidimensionalité, est donc cruciale pour la compréhension du comportement optique.

L'étude du spectre d'absorption optique

L'objet de cette thèse est l'étude rigoureuse du spectre d'absorption optique des nanotubes semiconducteurs et donc du phénomène des excitons. Ce travail est restreint au cadre de l'optique linéaire et le spectre d'absorption optique est ici défini comme la réponse linéaire du matériau à l'excitation lumineuse. Il est aussi sous entendu dans tout ce qui va suivre que le spectre d'absorption optique est la réponse du matériau à basse température.

Certaines relations entre matériaux et spectre d'absorption sont bien connues des physiciens. L'étude du problème général de l'absorption de la lumière par les cristaux a commencé avec Frenkel [Fr] pour certains types de cristaux, a été ensuite étendue avec Slater et Shockley [SS] puis précisé par Wannier [Wa] et Elliot [El] qui arrivent à la conclusion que les quasi-particules appelées excitons jouent un role important dans l'absorption de la lumière. on pourra aussi se référer au livre de Mahan [AM, chap. 8].

Dans le cas précis des nanotubes, plusieurs travaux physiques ont déjà traité le problème théoriquement : [PRB91], [A97], [P1], [P2] ou avec l'aide d'ordinateurs en utilisant des méthodes dites *ab initio* : [PRB05], [PRB05-2], et ont établi certains résultats, confirmant par exemple la grande influence du rayon du tube sur la réponse optique.

Mais tous ces travaux ont des limites plus ou moins claires, des approximations plus ou moins bien justifiées qui demandent à être clarifiées. Aussi, il n'y a pas de relation précise déterminant le nanotube, i.e. une chiralité et un rayon, en fonction de certains pics observés dans le spectre d'absorption mesuré. On veut ici adopter un point de vue mathématique et

procéder à une approche rigoureuse du problème. Le but est de partir d'un modèle représentant le plus fidèlement possible un nanotube, de justifier chaque étape, chaque approximation, et d'obtenir à la fin de l'étude des résultats approchés analytiques avec un contrôle sur l'erreur.

Les étapes

Le chapitre 1 introduit le modèle mathématique décrivant le nanotube. L'espace des configurations est un tore à la surface duquel est présent un potentiel périodique et un grand nombre d'électrons intéragissant entre eux via un potentiel coulombien, faible. Il est ensuite expliqué comment les états de basse énergie de ce modèle peuvent être approximés par les états d'un modèle unidimensionnel avec un potentiel périodique et un potentiel effectif entre les électrons. Les informations sur le bas du spectre sont les plus importantes car ce sont elles qui permettent de différencier les nanotubes.

Le chapitre 2 analyse l'action de la lumière sur le nanotube, maintenant décrit par un modèle unidimensionnel. Cette perturbation extérieure est un champ électromagnétique classique variable dans le temps et polarisé dans la direction du tube, elle est traitée en utilisant la théorie de la réponse linéaire. La perturbation est choisie faible et allumée de manière adiabatique, elle est vue comme une petite perturbation du système. Des outils de la physique statistique sont utilisés pour rendre compte de la réaction du nanotube à la lumière : la matrice densité, solution de l'équation de Liouville, est introduite et exprimée perturbativement.

Le chapitre 3 donne l'expression du spectre d'absorption optique en fonction des états propres du système unidimensionnel présenté au chapitre 1, sans perturbation lumineuse. Comme le spectre d'absorption est proportionnel à la partie réelle de la conductivité, cette dernière grandeur est calculée en utilisant la même méthode que Kubo [Ku57]. Les propriétés de la matrice densité établies au chapitre précedent sont utilisées. L'expression finale est donnée à condition de faire la supposition que les nanotubes sont à basse température.

Le chapitre 4 étudie les états propres du système unidimensionnel donné au chapitre 1. L'espace de Fock est introduit afin de tenir compte du fait que les électrons sont des fermions et de permettre d'exprimer les états quantiques du modèle avec des combinaisons d'états du modèle où les électrons n'interagissent pas entre eux. Quelques suppositions physiques sont utilisées et l'étude est réduite au "sous espace de l'exciton", qui va donner la contribution de l'exciton au spectre d'absorption. Une étude perturbative est faite dans la limite de couplage faible entre électrons et dans la limite où le nombre de particules, proportionnel à la longueur du tube, est grand mais pas infini. L'étude se réduit alors à l'obtention des états propres d'un Hamiltonien effectif appelé H_{exc}.

Le chapitre 5 utilise les résultats des chapitres 3 et 4 pour donner la formule finale du spectre d'absorption. Dans la limite du couplage faible entre électrons, les états propres de H_{exc} sont exprimés en fonction des états propres d'un Hamiltonien décrivant deux particules sur la ligne interagissant via un potentiel attractif explicite, avec centre de masse séparé, et appelé Hamiltonien de l'exciton. Le spectre d'absorption est écrit en fonction des états propres de ce dernier opérateur, une estimation de l'erreur dû aux approximations successives est donnée.

Le chapitre 6 fait le lien entre le chapitre précédent et l'approche faite dans la publication [CDR2]. Dans un premier temps il montre qu'il y a une relation entre l'Hamiltonien de l'exciton obtenu ici et le modèle présenté dans [CDR2]. Il justifie donc l'application des résultats de cette publication dans le cadre de l'étude du spectre d'absorption optique. Dans un second temps, la publication est incluse dans le chapitre et elle donne une relation quasi analytique entre le rayon du tube et les états propres de l'exciton. Elle montre que l'énergie de liaison de l'exciton est renforcée quand le rayon du tube diminue. Enfin, le travail publié dans [CPR], qui consiste en une étude comparative entre les résultats de [CDR2] et une approche variationnelle, est présenté. Les deux études obtiennent des résultats très proches.

Enfin le chapitre de conclusion fait la synthèse des résultats obtenus, montre dans quelle limites ces résultats sont valables et donne des pistes pour l'extension de ce travail.

Chapitre 1

Modèle mathématique

1.1 Modélisation du nanotube

On considère le nanotube comme étant un cylindre fini de rayon r et de longueur L. A la surface de ce cylindre, se trouve un réseau d'atomes de carbones, fixes, agencés périodiquement. Chaque atome est composé d'un noyau et de six électrons. On fera l'hypothèse ici que seul un électron pourra se délocaliser et être vu comme une particule "libre", les deux électrons de coeur de l'atome de carbone restant localisés autour du noyau et les trois autres électrons participant aux liaisons inter-atomiques. On modélise donc le nanotube comme un système composé de N électrons libres à la surface d'un cylindre, lesquels sont soumis à un potentiel périodique dû au réseau composé des N ions. On choisit de supposer que le réseau est fixe, c'est-à-dire que les atomes sont immobiles et donc que l'on se place, du point du vue physique, dans l'approximation de Born oppenheimer où l'on néglige l'intéraction entre électrons et phonons. Comme usuellement en physique, pour la modélisation et l'étude de systèmes à réseaux périodiques, on choisit des conditions aux bords périodiques pour l'Hamiltonien décrivant le système. L'espace des configurations sera donc un tore dénoté $\mathcal{T}_{L,r}$

$$\mathcal{T}_{L,r} := \frac{L}{2\pi} S^1 \times r S^1,$$

où S^1 est le cercle de rayon unité. On appelle x et y les coordonnées d'un point sur le tube avec $x \in \Lambda := [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2})$ suivant l'axe du nanotube et $y \in [-\pi r, \pi r)$ suivant la circonférence. Par la suite, on appellera aussi $\mathcal{T}_{L,r}$ l'ensemble $\Lambda \times [-\pi r, \pi r)$.

Le réseau périodique

Le réseau périodique du nanotube de carbone peut prendre plusieurs configurations spatiales que les physiciens appellent "chiralités". Ce paramètre influe sur le comportement du nanotube

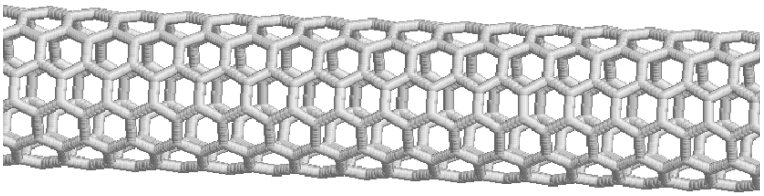

Fig. 1.1 – Image idéalisée d'un nanotube de carbone. Sur chaque sommet se trouve un atome de carbone. Les arrêtes symbolisent les liaisons entre atomes.

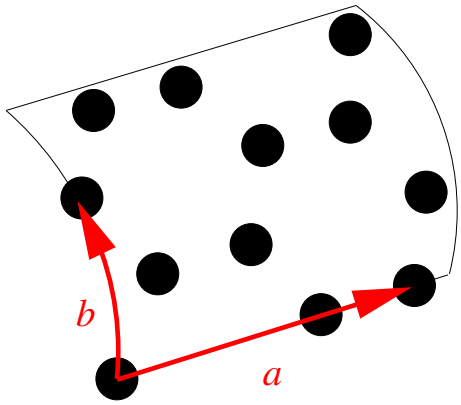

FIG. 1.2 – Périodicité du réseau atomique.

et doit être pris en compte. Premièrement, la chiralité détermine si le nanotube est conducteur ou semiconducteur [SDD] et pour les semiconducteurs, la lacune entre bande de valence et bande de conduction dépend de ce paramètre. Dans le présent travail, on supposera que la configuration du réseau est telle que les nanotubes étudiés sont semiconducteurs. On n'utilisera que deux hypothèses sur le potentiel dû aux atomes : *i*) le potentiel est périodique en x et y et *ii*) la fonction décrivant le potentiel doit être suffisamment régulière. Cette dernière supposition, malgré qu'elle soit assez restrictive, peut être justifiée et n'empèche pas d'obtenir des résultats cohérents avec la physique, Ashcroft et Mermin affirme sur ce choix [AM, Chap. 9] : "This approach might once have been regarded as an instructive but academic exercice. We know now however that in many cases this apparently unrealistic assumption gives results surprisingly close to the mark.".

On modélise le potentiel par la fonction $V_{\text{at}} \in C^\infty(\mathcal{T}_{L,r})$ et on désigne par a et b les périodes longitudinales et transversales respectives du réseau d'atomes, ce qui donne pour chaque x, y fixés $V_{\text{at}}(x+a, y) = V_{\text{at}}(x, y) = V_{\text{at}}(x, y+b)$. Il faut noter que ces périodes ne sont pas les périodes minimales du réseau et le rectangle $a \times b$ contient dans la plupart des configurations plus de 4 atomes. Les grandeurs L, N, a et b définies précédemment sont liées car la longueur du tube ainsi que le périmètre sont des multiples d'un nombre entier d'atomes. On suppose que dans le rectangle d'aire $a \times b$ il y a n atomes, comme illustré sur la figure 1.2, on choisit N pair et on obtient la relation :

$$\frac{L}{a} \times \frac{r}{b} \times n = N \in 2\mathbb{N},$$

où n est aussi le nombre d'électrons dans $a \times b$. En choisissant cette configuration, on garde toutes les informations sur le réseau et donc sur la chiralité. Ceci est important pour pouvoir étudier son influence.

On suppose que ce potentiel est attractif et on ne demandera pas d'autres précisions sur V_{at}, on obtiendra à la fin une expression des résultats comprenant un terme dépendant du potentiel atomique. Comme V_{at} est lisse on pourra borner ce terme et montrer qu'il a un effet limité sur le système (sans toutefois pouvoir quantifier précisément son action).

Hamiltonien et paramètres physiques

On suppose d'abord que l'on a un seul électron sur le tube où sont présents N ions ; on écrit l'espace des états quantiques pour un électron comme étant :

$$\mathcal{H}_c := L^2(\mathcal{T}_{L,r}) \simeq L^2(\Lambda) \otimes L^2(rS^1), \qquad r > 0.$$

Dans toute l'étude qui va suivre, il n'y a pas de terme dans l'Hamiltonien couplant les variables d'espace aux variables de spin, et par conséquent il n'est donc pas utile de le prendre en compte.

On utilisera plus tard le fait que les électrons sont des fermions, donc de spin demi-entier, mais ce sera uniquement dans la partie ou l'on travaillera dans l'espace de Fock. Dans ce contexte, l'Hamiltonien d'un électron sur le tube s'écrit :

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \otimes 1 + 1 \otimes -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_{\text{at}}(x,y) \tag{1.1}$$

avec m_e la masse de l'électron. On rappelle que V_{at} dépend des paramètres physiques ε, la permittivité du nanotube, et e, la charge d'un électron, de la manière suivante :

$$V_{\text{at}}(x,y) = \frac{e^2}{\varepsilon}\widetilde{V}_{\text{at}}(x,y)$$

où $\widetilde{V}_p$ est une fonction ne dépendant pas de constantes physiques. Il en sera de même pour le potentiel d'interaction entre électrons que l'on introduira dans la prochaine section. On effectue le changement de variables $\tilde{x} = x/a_0$, $\tilde{y} = y/a_0$ où

$$a_0 = \frac{\hbar^2\varepsilon}{m_e e^2},$$

et on exprimera l'énergie en multiple de la constante de Rydberg effective du matériau R_y :

$$R_y = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0}.$$

Ainsi les constantes physiques n'apparaîtront plus explicitement dans l'Hamiltonien.

En principe ε devrait dépendre du nanotube, mais d'après [P1] on peut supposer sa valeur fixe.

L'interaction entre électrons

Le but de ce travail étant d'étudier certaines propriétés optiques des nanotubes dépendantes fortement des interactions entre électrons, on va donc introduire dans l'Hamiltonien un potentiel décrivant ce couplage. On choisit naturellement le potentiel de Coulomb, inversément proportionnel à la distance dans $\mathbb{R}^3$, entre les deux particules. La forme explicite de cette distance exprimée dans les coordonnées du tore est assez délicate à manipuler et nous n'allons pas l'utiliser. On prendra plutôt le potentiel de Coulomb "périodisé" qu'utilisent les physiciens quand ils travaillent dans une boite finie, avec conditions périodiques aux bords.

On dénote par le couple (x,y), $x \in \mathbb{R}$, $y \in [-\pi r, \pi r)$, les coordonnées d'un point sur le cylindre infini de rayon r. Cet espace est approché par le tore quand L tend vers l'infini. On introduit la distance d_{12} entre deux particules évoluant à la surface du cylindre, de coordonnées (x_1,y_1) et (x_2,y_2) :

$$d_{12} := d_{12}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) := \sqrt{(x_1-x_2)^2 + 4r^2\sin^2\frac{y_1-y_2}{2r}}.$$

On justifie cette expression par le théorème de Pythagore, en précisant que $|2r\sin\left(\frac{y_1-y_2}{2r}\right)|$ est la longueur de la corde joignant deux points de coordonnées y_1 et y_2 sur le cercle de rayon r. On définit la fonction

$$V_c^r(x,y) := \frac{\lambda}{\sqrt{x^2 + 4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}} \qquad x \in \mathbb{R}, \quad y \in (-\pi r, \pi r)$$

avec $\lambda > 0$. l'expression ci-dessus avec $\lambda = 1$ est le potentiel de Coulomb sur le cylindre infini. il est utilisé par les physiciens, voir [P1], [P2], [KCM] et également dans divers travaux étudiants les nanotubes de carbones, [CDP], [CDR2].

On va choisir dans cette étude de ne traiter que le cas des faibles interactions entre électrons, ce qui explique la présence du paramètre λ, que l'on prendra petit. Ce point de vue perturbatif a été examiné par de nombreux physiciens, qui ont déjà montré que ce choix conduit bien à faire apparaître les quasi-particules appelées excitons de Wannier [Wa], [Ma, 8.2] et à observer une modification du spectre d'absorption optique [El].

Pour définir cette interaction entre électrons sur le tore on périodise V_c^r, avec période L, et avec le soucis de faire converger (dans un certain sens précisé plus tard) ce nouveau potentiel quand L tend vers l'infini, vers le potentiel V_c^r. Il faut remarquer que dans cette étude, les résultats pertinents seront obtenus pour L très grand. La fonction V_c^r appartient à $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}\times rS^1)$ et est de carré sommable à l'infini, voir l'annexe A.1 pour ses propriétés. La fonction sur $\mathbb{R}$: $x \mapsto V_c^r(x,y)$ n'est pas une fonction $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R})$ pour $y=0$, mais sa transformée de Fourier, notée $\widehat{V}_c^r$, existe pour tout $y \neq 0$ fixé, et possède l'expression explicite suivante

$$(\widehat{V}_c^r)(p,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} e^{-ipx}V_c^r(x,y)dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}}K_0(|2pr\sin(y/2)|)$$

où K_0 est la fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce, voir [AS, 9.6]. Cette fonction est continue sur $\mathbb{R}\setminus\{0\}$, singulière à l'origine où elle diverge comme un logarithme. A l'infini elle se comporte comme une exponentielle décroissante. La quantité suivante

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2m\pi x}{L}}\widehat{V}_c^r(\frac{2m\pi}{L},y)\cdot\frac{2\pi}{L}. \tag{1.2}$$

est donc bien définie pour $y \neq 0$ et est périodique en x de période L. Pour comprendre le comportement de cette fonction quand y tend vers zéro il est nécessaire de faire une petite analyse détaillée, voir l'annexe A.2. C'est en fait le mode $m=0$ de la transformée de Fourier inverse qui pose problème car V_c^r n'est pas intégrable sur $\mathbb{R}$. Si on décide de l'omettre, il apparaît une divergence quand y tend vers zéro pour tout x. On va donc proposer de faire un compromis en ajoutant à la quantité précédente un morceau du mode $m=0$:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V_c^r(x',y)dx'\frac{1}{L}$$

qui va permettre de n'avoir qu'une seule singularité en $x=y=0$. Le potentiel périodisé $V_c^{r,L}$ est donc défini comme suit :

$$\begin{aligned} V_c^{r,L}(x,y) &:= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2m\pi x}{L}}\widehat{V}_c^r(\frac{2m\pi}{L},y)\cdot\frac{2\pi}{L} + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V_c^r(x',y)dx'\frac{1}{L} \\ &= \frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2m\pi x}{L}}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-ipx'}V_c^r(x',y)dx' + \frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2m\pi x}{L}}\int_{|x'|\geq\frac{L}{2}} e^{-ipx'}V_c^r(x',y)dx' \end{aligned} \tag{1.3}$$

C'est une approximation du potentiel de Coulomb sur le cylindre car il converge au moins point par point vers V_c^r quand L est grand. Les propriétés de $V_c^{r,L}$ ainsi qu'une comparaison avec V_c^r sont montrées dans les annexes A.3 et A.2. Il est important de noter que $V_c^{r,L}$ est positif, ce qui est montré en annexe.

Un autre choix pour le potentiel d'interaction sur le cylindre peut être le potentiel écranté appelé aussi potentiel de Yukawa à courte portée :

$$V_Y(x,y) := \frac{\lambda e^{-k\sqrt{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}}}{\sqrt{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}}.$$

A première vue, celui-ci est intéressant car on peut bien définir sa transformée de Fourier. Mais les physiciens suggèrent que le phénomène d'écrantage est beaucoup moins fort en une dimension, et de nombreuses études sur les nanotubes utilisent un potentiel de Coulomb non écranté [A97], [KCM], [P1]. On préfèrera donc ici la définition (1.3) pour le potentiel.

Il faut remarquer que dans cette étude, avec ce choix de $V_c^{r,L}$, on étudiera le modèle à grand nombre de particules mais on ne pourra pas faire la limite thermodynamique c'est à dire faire tendre N vers l'infini car on ne peut pas sommer une infinité de potentiels de Coulomb.

L'Hamiltonien à N électrons

On va maintenant écrire l'Hamiltonien associé au système à N électrons. Cet hamiltonien est défini formellement dans $\mathcal{H}_c^N := \mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_c \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_c$ par

$$H_c := \sum_{j=1}^{N}(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + V_{\text{at}}(x_j, y_j)) + \frac{1}{2}\sum_{j\neq k=1}^{N} V_c^{r,L}(x_j - x_k, y_j - y_k).$$

On remarquera que cet Hamiltonien ne tient pas compte du spin des électrons. En effet, on néglige dans cette étude toute interaction avec le spin, notamment le couplage spin-orbite, il n'est donc pas utile d'inclure le spin dans l'Hamiltonien. Plus tard dans l'étude on tiendra compte du fait que les électrons sont des fermions, et on se placera dans un sous-espace "antisymetrique" permettant de traiter un Hamiltonien sans composante de spin, tout en prenant en compte la spécificité des électrons dû à leur spin demi-entier.

Comme on l'a vu dans la section précédente, le potentiel $V_c^{r,L}$ est singulier à l'origine, notamment il n'est pas L^2. On va voir que l'on peut définir H_c comme un opérateur autoadjoint associé à une forme quadratique. Soit t_v la forme quadratique de domaine

$$D(t_v) := \left\{ \psi \in L^2(\mathcal{T}_{L,r}^N), \sum_{j\neq k=1}^{N} \int_{\mathcal{T}_{L,r}^N} V_c^{r,L}(x_j - x_k, y_j - y_k)|\psi(\overline{x}, \overline{y})|^2 d\overline{x}d\overline{y} < \infty \right\},$$

avec $\overline{x} := (x_1, x_2, \cdots, x_N)$ et de même pour y, et agissant comme suit :

$$t_v(\psi, \psi) := \frac{1}{2}\sum_{j\neq k=1}^{N} \int_{\mathcal{T}_{L,r}^N} V_c^{r,L}(x_j - x_k, y_j - y_k)|\psi(\overline{x}, \overline{y})|^2 d\overline{x}d\overline{y},$$

c'est une forme positive car $V_c^{r,L}$ est positive, voir annexe A.2.2. On introduit

$$t_0(\psi, \psi) := \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\psi, \frac{\partial}{\partial x_j}\psi\right) + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\partial}{\partial y_j}\psi, \frac{\partial}{\partial y_j}\psi\right),$$

avec $D(t_0) := \mathcal{W}^1(\mathcal{T}_{L,r}^N)$ et

$$t_V(\psi, \psi) := \sum_{j=1}^{N} \int_{\mathcal{T}_{L,r}^N} V_{\text{at}}(x_j, y_j) \cdot |\psi(\overline{x}, \overline{y})|^2 d\overline{x}d\overline{y},$$

qui est bornée. On a que $C_0^\infty(\mathcal{T}_{L,r}^N) \subset D(t_v)$ car pour tout j, k, v_{jk} est une fonction localement $L^1(\mathbb{R}^2)$ et bornée à l'infini. On peut donc écrire :

$$C_0^\infty(\mathcal{T}_{L,r}^N) \subset D(t_0) \cap D(t_v).$$

Pour $\psi \in C_0^\infty(\mathcal{T}_{L,r}^N)$, on définit la fome quadratique sur le domaine dense $C_0^\infty(\mathcal{T}_{L,r}^N)$:

$$t_c(\psi, \psi) := t_0(\psi, \psi) + t_V(\psi, \psi) + t_v(\psi, \psi).$$

Lemme 1.1.1. *Pour $N < \infty$, la forme t_c est bornée inférieurement, avec borne indépendante de r, densément définie et fermée. Elle définit l'opérateur autoadjoint H_c.*

Démonstration. les formes t_0, t_v sont fermées, symétriques et non négatives. C'est une conséquence du fait qu'elles sont toutes définies sur leur domaine maximal, voir par exemple [K, Ex. VI.1.14-15]. Pour t_0, on peut utiliser la transformée de Fourier. Comme elles sont toutes deux non négatives, $t_0 + t_v$ est non négative et fermée, voir [K, Th. VI.1.31]. De plus $t_0 + t_v$ est densément définie, comme on a vu précédemment. La forme associée au potentiel des atomes est bornée car V_{at} est symétrique bornée. La forme t_c est donc une forme sectorielle, densément définie et fermée. On conclut la preuve en utilisant le premier théorème de représentation [K, VI.2.1]. □

1.2 Réduction à une dimension

Nous allons procéder à une première simplification du problème en utilisant le fait que le rayon du tube est très petit. En effet, c'est une propriété caractéristique des nanotubes de carbone qui entraine notamment le renforcement des interactions entre électrons.

On va établir ici le théorème 1.2.2 qui est une généralisation au cas à N particules répulsives sur un tore du théorème de [CDR2] qui est pour le cas à 2 particules attractives sur un cylindre. Ce dernier théorème permet d'approximer le système sur un cylindre par un système sur la ligne dont on connait le spectre. Le théorème 1.2.2 est une clef pour justifier que H_c peut être approximé par un modèle unidimensionel que l'on va appeler H_0 à condition de connaitre certaines informations sur le spectre de H_0. On discutera dans la conclusion de la portée de ce théorème.

On donnera aussi quelques propriétés du modèle décrit par H_0 avec la proposition 1.2.7.

Il est important de faire une première remarque : si l'on considère le problème physique du nanotube, le rayon r doit être un multiple de la période transversale du potentiel atomique, mais dans cette partie on fera abstraction de cela et on pourra même considérer des valeurs de r plus petites qu'une période. Le but est ici uniquement de montrer mathématiquement qu'il n'y a pas de problème à approximer le modèle d'étude par un modèle unidimensionnel.

Sur rS^1 l'opérateur $(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2})$ peut s'écrire, si on le réduit dans ses sous-espaces propres,

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \sum_{n\geq 1} \frac{n^2}{2r^2}(P_n + P_{-n})$$

où P_n est le projecteur orthogonal associé à la $n$ième valeur propre et est définit par

$$P_n := (\phi_n, \cdot)\phi_n, \quad \text{pour tout } n \in \mathbb{Z},$$

où ϕ_n est le vecteur propre :

$$\phi_n(y) := \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} e^{i\frac{n}{r}y}.$$

Notons que l'énergie du fondamental, nulle, est séparée de l'énergie de l'état excité le plus proche par la quantité $1/2r^2$ qui devient grande pour des rayons de tube petits. On introduit la notation

$$P_{\overline{n}} := P_{n_1,n_2,\cdots,n_N} := P_{n_1} \otimes P_{n_2} \otimes \cdots \otimes P_{n_N}.$$

où $n_j \in \mathbb{Z}$ est l'indice du $n_j$ème état propre associé à l'opérateur $(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y_j^2})$. On va montrer que l'Hamitonien projeté sur le sous espace fondamental

$$H_0 := P_{\overline{0}} H_c P_{\overline{0}}, \qquad \overline{0} = (0, 0, \cdots, 0)$$

est un bon candidat pour l'étude du spectre de basse énergie de H_c, pour des rayons r suffisamment petits. On introduit l'espace des configurations et l'espace des états à 1 particule

$$\mathcal{S}_L := \frac{L}{2\pi} S^1, \qquad \mathcal{H} := L^2(\mathcal{S}_L),$$

et par conséquent l'espace des états à N particules est :

$$\mathcal{H}^N := L^2(\mathcal{S}_L^N),$$

Le potentiel d'interaction entre électrons est maintenant

$$\begin{aligned} v_L(x_1 - x_2) :=& \frac{1}{(2\pi r)^2} \int_{-\pi r}^{\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) dy_1 dy_2 \\ =& \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y) dy. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Remarque 1.2.1. On verra dans l'annexe A.2.2 que l'on peut inverser projection et périodisation, c'est à dire que la projection de la périodisation de V_c^r est égale à la périodisation de la projection de V_c^r.

Le potentiel atomique projeté sur le cercle est

$$v_{\mathrm{at}}(x) := \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_{\mathrm{at}}(x, y) dy = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} V_{\mathrm{at}}(x, ry) dy.$$

Pour tout $x \in \mathcal{S}_L$, la fonction $V_{\mathrm{at}}(x, \cdot)$ est périodique de période $2\pi r$ ce qui entraîne que la fonction $V_{\mathrm{at}}(x, r\cdot)$ est périodique de période 2π et est donc indépendante de r. On a donc que $v_{\mathrm{at}}(x)$ est la valeur moyenne suivant l'axe transverse du potentiel en 2 dimensions au point x et est indépendant de r.

Agissant dans l'espace $\mathcal{H}^N$, on définit l'opérateur H_0 :

$$H_0 = \sum_{j=1}^{N} (-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + v_{\mathrm{at}}(x_j)) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k = 1}^{N} v_L(x_j - x_k). \tag{1.5}$$

On verra que l'Hamiltonien H_0 est auto-adjoint sur l'espace de Sobolev $D(H_0) = \mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N)$ au lemme 1.2.7.

On regarde maintenant comment se comportent les projetés de H_c sur les autres sous-espaces propres. En utilisant la base propre du Laplacien transverse, on peut travailler dans le nouvel espace de Hilbert suivant :

$$\mathcal{H}_{\ell^2} = \ell^2(\mathbb{Z}^N; L^2(\mathcal{S}_L^N)), \quad \mathcal{H}_{\ell^2} \ni \psi = \{\psi_{n_1, n_2, \cdots, n_N}\}_{n_1, n_2, \cdots, n_N \in \mathbb{Z}}, \ \psi_{n_1, n_2, \cdots, n_N} \in L^2(\mathcal{S}_L^N).$$

L'Hamiltonien est maintenant une matrice infinie avec chaque terme (indexé par $2N$ indices) agissant dans $L^2(\mathcal{S}_L^N)$.

Pour chaque élement de matrice, le potentiel périodique V_{at} ressenti par la particule de coordonnées (x_j, y_j) s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{aligned} P_{\overline{n}} V_{\mathrm{at}}(x_j, y_j) P_{\overline{m}} &= \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_{\mathrm{at}}(x_j, y_j) dy_j \prod_{l \geq 1} \delta_{n_l, m_l} P_{\overline{n}} \\ &= v_{\mathrm{at}}(x_j) \prod_{l \geq 1} \delta_{n_l, m_l} P_{\overline{n}}, \end{aligned} \tag{1.6}$$

où δ est le symbole de Kronecker, c'est à dire :

$$\delta_{n,m} = \begin{cases} 1 \text{ si } n = m, \\ 0 \text{ si } n \neq m \end{cases}.$$

On peut écrire maintenant chaque élément de H_c, agissant dans $L^2(\mathcal{S}_L^N)$, comme :

$$P_{\overline{n}} H_c P_{\overline{m}} = \left(\sum_{j=1}^{N} (-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{n_j^2}{2r^2} + v_{\text{at}}(x_j)) \right) \delta_{\overline{n},\overline{m}} P_{\overline{n}} + \\ + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j<k}}^{N} P_{\overline{n}} V_c^{r,L}(x_j - x_k, y_j - y_k) P_{\overline{m}}.$$

On peut séparer H_c en deux parties, la partie que l'on appellera *diagonale* où l'on a $n_j = m_j$ pour tous les j et qui est une somme directe d'opérateurs agissants dans $L^2(\mathcal{S}_L^N)$:

$$H_{\text{diag}} := \bigoplus_{n_1,n_2\cdots,n_N \geq 0} \left(H_0 + \frac{n_1^2}{2r^2} + \frac{n_2^2}{2r^2} + \cdots + \frac{n_N^2}{2r^2} \right). \tag{1.7}$$

Et la partie que l'on appellera *hors-diagonale* où l'on a au moins un j pour lequel $n_j \neq m_j$, dans ce cas la partie cinétique et les termes dûs au potentiel atomique disparaissent. On notera cette partie hors-diagonale agissant dans $\mathcal{H}_{\ell^2}$ par

$$H_{\text{offdiag}} := \sum_{\substack{\overline{n},\overline{m} \\ \overline{n}\neq\overline{m}}} P_{\overline{n}} H_c P_{\overline{m}} = \sum_{\substack{\overline{n},\overline{m} \\ \overline{n}\neq\overline{m}}} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j<k}}^{N} P_{\overline{n}} V_c^{r,L}(x_j - x_k, y_j - y_k) P_{\overline{m}} \\ = \sum_{\substack{j,k=1 \\ j<k}}^{N} \sum_{\substack{\overline{n},\overline{m} \\ \overline{n}\neq\overline{m}}} P_{\overline{n}} V_c^{r,L}(x_j - x_k, y_j - y_k) P_{\overline{m}}. \tag{1.8}$$

On a la relation suivante

$$H_c = H_{\text{diag}} + H_{\text{offdiag}},$$

et soit $R_{\text{diag}}(z)$ la résolvante $(H_{\text{diag}} - z)^{-1}$ définie pour $z \in \rho(H_{\text{diag}})$ et $R_c(z)$ la résolvante $(H_c - z)^{-1}$ définie pour $z \in \rho(H_c)$, on va maintenant démontrer que la différence entre les résolvantes associées à H_c et H_{diag} tend vers zéro quand r tend vers zéro.

Théorème 1.2.2. *Soit $1/2 < \gamma < 1$, $z \in \mathbb{C}$ tel que $d(z, \sigma(H_{\text{diag}})) > 0$. Il existe trois constantes $C_\gamma, C_N, C_1 > 0$ et $r_0 > 0$ tels que si $r < r_0$ et si l'on a la condition suivante*

$$C_\gamma \frac{r^{\gamma-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\varepsilon\alpha}} L^{2-\gamma} \left(1 + \frac{|z| + C_1}{d(z, \sigma(H_{\text{diag}}))} \right) \leq \frac{1}{2},$$

alors $z \in \rho(H_c)$, et l'on a l'estimation suivante :

$$\|R_c(z) - R_{\text{diag}}(z)\| \leq C_\gamma L^{3-\gamma} \frac{r^{\gamma-1/2}}{d(z, \sigma(H_{\text{diag}}))} \left(1 + \frac{C_1 + |z|}{d(z, \sigma(H_{\text{diag}}))} \right)$$

On va procéder en plusieurs étapes pour la preuve de ce théorème. Pour $z \in \rho(H_{\text{diag}})$ on introduit la décomposition polaire de l'opérateur $R_{\text{diag}}(z)$, voir [K, VI.7] : on écrit

$$R_{\text{diag}}(z) = R_{\text{diag}}^{\frac{1}{2}}(z) |R_{\text{diag}}(z)|^{\frac{1}{2}}$$

avec où $|R_{\text{diag}}(z)|^{\frac{1}{2}}$ est un opérateur positif et

$$R_{\text{diag}}^{\frac{1}{2}}(z) := \text{sgn}(R_{\text{diag}}(z))|R_{\text{diag}}(z)|^{\frac{1}{2}}.$$

Ainsi, pour $z \in \rho(H_{\text{diag}})$, si la quantité

$$K(z) := |R_{\text{diag}}(z)|^{\frac{1}{2}} H_{\text{offdiag}} R_{\text{diag}}^{\frac{1}{2}}(z)$$

possède une norme inférieure strictement à 1, l'équation de la résolvante symétrisée donne pour $z \in \rho(H_{\text{diag}}) \cap \rho(H_c)$

$$R_c(z) - R_{\text{diag}}(z) = R_{\text{diag}}^{\frac{1}{2}}(z) \frac{-K(z)}{1+K(z)} |R_{\text{diag}}(z)|^{\frac{1}{2}}. \tag{1.9}$$

Dans ce qui va suivre, on va s'attacher à démontrer que la condition $\|K(z)\| < 1$ est vraie pour r assez petit et pour certains z bien choisis.

Pour $\varepsilon > 0$ on définit l'opérateur

$$h_{00}(\varepsilon) := \bigoplus_{n_1, n_2 \cdots, n_N \geq 0} \left(\sum_{j=1}^{N} \frac{-\varepsilon}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{n_1^2}{2r^2} + \frac{n_2^2}{2r^2} + \cdots + \frac{n_N^2}{2r^2} \right) \tag{1.10}$$

avec domaine

$$D(h_{00}(\varepsilon)) = \bigoplus_{n_1, n_2 \cdots, n_N \geq 0} \mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N).$$

Soit les paramètres spectraux $\alpha < 0$, $\mu \in \rho(H_{\text{diag}})$. Pour $z \in \rho(H_{\text{diag}})$, on va décomposer l'opérateur K en plusieurs morceaux :

$$K(z) = |A|(z,\mu)|B|(\alpha,\mu,\varepsilon)\widetilde{K}(\alpha,\varepsilon)B(\alpha,\mu,\varepsilon)A(z,\mu). \tag{1.11}$$

où

$$A(z,\mu) := (H_{\text{diag}} - \mu)^{\frac{1}{2}} R_{\text{diag}}^{\frac{1}{2}}(z), \qquad |A|(z,\mu) := |R_{\text{diag}}(z)|^{\frac{1}{2}} (H_{\text{diag}} - \mu)^{\frac{1}{2}}$$
$$B(\alpha,\mu,\varepsilon) := (h_{00}(\varepsilon) + \frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}} (H_{\text{diag}} - \mu)^{-\frac{1}{2}} \qquad |B|(\alpha,\mu,\varepsilon) := (H_{\text{diag}} - \mu)^{-\frac{1}{2}} (h_{00}(\varepsilon) + \frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}$$
$$\widetilde{K}(\alpha,\varepsilon) := (h_{00}(\varepsilon) + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}} H_{\text{offdiag}} (\varepsilon h_{00} + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}}.$$

On introduit le symbole

$$T_x := \sum_{j=1}^{N} \frac{-1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \tag{1.12}$$

et on commence par noter que grâce au théorème spectral on a la propriété suivante :

Lemme 1.2.3. *Soit μ et z réels appartenant à l'ensemble résolvant de H_{diag}, alors*

$$\|(H_{\text{diag}} - \mu)^{\frac{1}{2}} R_{\text{diag}}^{\frac{1}{2}}(z)\|^2 \leq 1 + \frac{|z-\mu|}{d(z, \sigma(H_{\text{diag}}))}.$$

On va maintenant estimer le terme suivant : $B(\alpha,\mu,\varepsilon)$.

Lemme 1.2.4. *$\forall r > 0$, et $\forall 0 \leq \varepsilon \leq 1, \alpha < 0$, si*

$$\mu \leq -\alpha^2 < -2N \sup_x |v_{\text{at}}(x)|,$$

alors $\mu \in \rho(H_{\text{diag}})$ et

$$\|(h_{00}(\varepsilon) + \frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}(H_{\text{diag}} - \mu)^{-\frac{1}{2}}\|^2 \leq 1.$$

Démonstration. Dans un premier temps, puisque les deux opérateurs (définis en (1.7) et (1.10)) sont des sommes directes on a

$$\begin{aligned}
&\|(h_{00}(\varepsilon) + \frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}(H_{\text{diag}} - \mu)^{-\frac{1}{2}}\|^2 = \\
&= \sup_{\overline{n}} \|(P_{\overline{n}} h_{00}(\varepsilon) P_{\overline{n}} + \frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}(P_{\overline{n}} H_{\text{diag}} P_{\overline{n}} - \mu)^{-\frac{1}{2}}\|^2.
\end{aligned}$$

On introduit les notations

$$V_{\overline{x}} := \sum_{j=1}^{N} v_{\text{at}}(x_j), \qquad v_{\overline{x}} := \sum_{\substack{k,l=1 \\ k<l}}^{N} v_L(x_k - x_l),$$

le premier opérateur est borné et on verra au lemme 1.2.7 que le deuxième est relativement borné à $\sum_{j=1}^{N} \frac{-1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$ avec borne relative nulle. Pour $n_1, n_2 \cdots, n_N$ fixés, on introduit les notations

$$a_{\overline{n}} := \frac{\overline{n}^2}{2r^2}$$

et

$$R_{0\overline{n}}(\varepsilon, -\frac{\alpha^2}{2}) := (\varepsilon T_x + a_{\overline{n}} + \frac{\alpha^2}{2})^{-1}$$

agissant dans l'espace image de $P_{\overline{n}}$. Dans cet espace, puisque $v_{\overline{x}} \geq 0$, on a

$$\begin{aligned}
&R_{0\overline{n}}(\varepsilon, -\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}} P_{\overline{n}} H_{\text{diag}} P_{\overline{n}} R_{0\overline{n}}(\varepsilon, -\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}} \geq \\
&\geq R_{0\overline{n}}(\varepsilon, -\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}(T_x + V_{\overline{x}} + a_{\overline{n}} - \mu) R_{0\overline{n}}(\varepsilon, -\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}} \\
&= 1 + R_{0\overline{n}}(\varepsilon, -\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}((1-\varepsilon)T_x - \frac{\alpha^2}{2} - \mu + V_{\overline{x}}) R_{0\overline{n}}(\varepsilon, -\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}. \qquad (1.13)
\end{aligned}$$

De plus, soit

$$X(\varepsilon, \alpha, \mu) := (1-\varepsilon)T_x - \frac{\alpha^2}{2} - \mu \geq \frac{\alpha^2}{2},$$

car d'après les hypothèses $\frac{\alpha^2}{2} + \mu \leq -\frac{\alpha^2}{2}$, alors

$$X(\varepsilon, \alpha, \mu) + V_{\overline{x}} = X(\varepsilon, \alpha, \mu)^{\frac{1}{2}}(1 + X(\varepsilon, \alpha, \mu)^{-\frac{1}{2}} V_{\overline{x}} X(\varepsilon, \alpha, \mu)^{-\frac{1}{2}}) X(\varepsilon, \alpha, \mu)^{\frac{1}{2}}$$

et

$$\|X(\varepsilon, \alpha, \mu)^{-\frac{1}{2}} V_{\overline{x}} X(\varepsilon, \alpha, \mu)^{-\frac{1}{2}}\| \leq \|V_{\overline{x}}\| \frac{2}{\alpha^2}.$$

L'opérateur de multiplication v_{at} étant borné,

$$\|V_{\overline{x}}\| = \|\sum_{j=1}^{N} v_{\text{at}}(x_j)\| \leq N \sup_x |v_{\text{at}}(x)|,$$

on obtient donc que si $\alpha^2 > 2N \sup_x |v_{\text{at}}(x)|$ alors la quantité (1.13) est supérieure à 1 et est donc inversible, ce qui finit le lemme. □

On introduit maintenant la notation $\mathcal{B}(X)$ pour désigner l'ensemble des opérateurs bornés agissant sur X et à valeur dans X. On notera $\|\cdot\|_{\mathcal{B}(X)}$ pour la norme d'opérateur. On notera $l^2(\mathbb{Z}^N, L^2(\mathcal{S}_L^N))$ l'espace des fonctions de carré sommable définies sur $\mathbb{Z}^N$ et à valeur dans $L^2(\mathcal{S}_L^N)$.

Lemme 1.2.5. *Pour $N > 0$, α^2 choisit comme dans le lemme 1.2.4, $0 < \varepsilon \leq 1$, et pour $1/2 < \gamma < 1$, il existe un $r_0 > 0$ tel que pour tout $r < r_0$ on ait*

$$\|\widetilde{K}(\varepsilon,\alpha)\| = \left\|(\varepsilon h_{00} + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}} H_{\text{offdiag}} (\varepsilon h_{00} + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}}\right\|_{\mathcal{B}(l^2(\mathbb{Z}^N, L^2(\mathcal{S}_L^N)))} \leq const(\gamma) \cdot \frac{r^{\gamma-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\varepsilon\alpha}} N^{3-\gamma}. \tag{1.14}$$

Démonstration. On va d'abord remarquer, en observant la relation (1.8), que $\widetilde{K}(\varepsilon,\alpha)$ est composé d'une somme de $N(N-1)/2$ termes unitairement équivalents car H_c est invariant par l'échange de n'importe quel couple de particules. On a donc

$$\|\widetilde{K}(\varepsilon,\alpha)\| \leq \frac{N(N-1)}{2} \left\|(\varepsilon h_{00} + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}} \sum_{\substack{\overline{n},\overline{m} \\ \overline{n}\neq\overline{m}}} P_{\overline{n}} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) P_{\overline{m}} (\varepsilon h_{00} + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}}\right\|$$

Comme le potentiel ne dépend que de y_1 et y_2 on peut écrire

$$\begin{aligned} &P_{\overline{n}} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) P_{\overline{m}} = \\ &(P_{n_1} \otimes P_{n_2}) V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y_1 - y_2)(P_{m_1} \otimes P_{m_2}) \otimes (P_{n_3} P_{m_3} \otimes \cdots \otimes P_{n_N} P_{m_N}). \end{aligned} \tag{1.15}$$

On remarque avec cette expression que la somme sur $\overline{n}$ et $\overline{m}$ se réduit à la somme sur n_1, n_2, m_1 et m_2 avec $n_1 \neq m_1$ ou $n_2 \neq m_2$ pour satisfaire $\overline{n} \neq \overline{m}$. Et si l'on calcule le terme du potentiel d'interaction entre 2 particules de coordonnées (x_1, y_1) et (x_2, y_2) dans les sous-espaces associés à y_1 et y_2 :

$$\begin{aligned} &P_{n_1} P_{n_2} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) P_{m_1} P_{m_2} = \\ &= P_{n_1} P_{n_2} \frac{1}{(2\pi r)^2} \int_{-\pi r}^{\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) e^{i(n_1 - m_1)\frac{y_1}{r}} e^{i(n_2 - m_2)\frac{y_2}{r}} dy_1 dy_2 \; P_{m_1} P_{m_2}, \end{aligned}$$

en procédant au changement de variables suivant : $y = y_j - y_k$ et $Y = y_k$ cela donne

$$\begin{aligned} &= P_{n_1} P_{n_2} \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y) e^{i(n_1 - m_1)\frac{y}{r}} dy \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} e^{i((n_1 - m_1) + (n_2 - m_2))\frac{Y}{r}} dY \; P_{m_1} P_{m_2} \\ &= P_{n_1} P_{n_2} \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y) e^{i(n_1 - m_1)\frac{y}{r}} dy \cdot \delta_{((n_1 - m_1),(m_2 - n_2))} \; P_{m_1} P_{m_2}. \end{aligned} \tag{1.16}$$

D'après les relations (1.15) on sait que $n_1 \neq m_1$ ou $n_2 \neq m_2$ et la condition $n_1 - m_1 = m_2 - n_2$ de (1.16), impose que les termes non nuls sont tels que $n_1 \neq m_1$ et $n_2 \neq m_2$. On doit donc estimer

$$\left\|(\varepsilon h_{00} + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}} \sum_{\substack{n_1 \neq m_2 \\ n_2 \neq m_2}} P_{n_1} P_{n_2} V_c^{r,L}(x_1 - x_2, y_1 - y_2) P_{m_1} P_{m_2} (\varepsilon h_{00} + \frac{\alpha^2}{2})^{-\frac{1}{2}}\right\|. \tag{1.17}$$

Par ailleurs, grâge au théorème spectral, on a

$$\|[h_{00}(\varepsilon) + \frac{\alpha^2}{2}]^{-1/2} (-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{m_1^2}{2r^2} + \frac{m_2^2}{2r^2})^{\frac{1}{2}}\|^2 \leq 1,$$

et si l'on introduit la notation :

$$R_m(-\frac{\alpha^2}{2}) := (-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{m_1^2}{2r^2} + \frac{m_2^2}{2r^2})^{-1} P_{m_1} P_{m_2},$$

ceci permet d'écrire

$$\begin{aligned}
&\|\widetilde{K}(\varepsilon,\alpha)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H}^N)} \leq \\
&\leq \frac{N(N-1)}{2} \| \sum_{\substack{n_1\neq m_1\\ n_2\neq m_2}} R_n(-\frac{\alpha^2}{2}) V_c^{r,L}(x_1-x_2) R_m(-\frac{\alpha^2}{2}) \|_{\mathcal{B}(L^2(\mathcal{S}_L^2))}.
\end{aligned}$$

Comme la norme Schur-Holmgren majore la norme d'opérateur, on a l'estimation suivante :

$$\begin{aligned}
&\| \sum_{\substack{n_1\neq m_1\\ n_2\neq m_2}} R_n(-\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}} V_c^{r,L}(x_1-x_2) R_m(-\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}} \|_{\mathcal{B}(L^2(\mathcal{S}_L^2))} \leq \\
&\leq \sup_{m_1,m_2\in\mathbb{Z}} \sum_{\substack{n_1,n_2\in\mathbb{Z}\\ n_1\neq m_1, n_2\neq m_2}} \|R_n(-\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}} V_c^{r,L}(x_1-x_2) R_m(-\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}\|_{\mathcal{B}(L^2(\mathcal{S}_L^2))}. \qquad (1.18)
\end{aligned}$$

En utilisant la condition $n_1 - m_1 = m_2 - n_2$ de (1.16), la norme de $\widetilde{K}(\varepsilon,\alpha)$ est majorée par

$$\begin{aligned}
\sup_{m_1,m_2\in\mathbb{Z}} \sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ n_1\neq m_1}} \|(-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{n_1^2}{2r^2} + \frac{(m_1+m_2-n_1)^2}{2r^2})^{-\frac{1}{2}} P_{n_1} P_{n_2} \times \\
\times V_c^{r,L}(x_1-x_2) R_m(-\frac{\alpha^2}{2})^{\frac{1}{2}}\|.
\end{aligned}$$

On rappelle maintenant que si on a trois opérateurs bornés, positifs A, B et X tels que $A^2 \leq B^2$ alors

$$\|XA\|^2 = \|XA^2X\| \leq \|XB^2X\| = \|XB\|^2 \qquad (1.19)$$

et

$$\|AXA\| = \|\sqrt{X}A^2\sqrt{X}\| \leq \|\sqrt{X}B^2\sqrt{X}\| = \|BXB\|^2. \qquad (1.20)$$

Comme on a les inégalités

$$(-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{n_1^2}{2r^2} + \frac{(m_1+m_2-n_1)^2}{2r^2})^{-1} \leq (-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{n_1^2}{2r^2})^{-1}$$

et

$$(-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{m_1^2}{2r^2} + \frac{m_2^2}{2r^2})^{-1} \leq (-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{m_1^2}{2r^2})^{-1}$$

on utilise la relation (1.19) pour obtenir

$$\begin{aligned}
\|\widetilde{K}(\varepsilon,\alpha)\| \leq \frac{N(N-1)}{2} \sup_{m_1\in\mathbb{Z}} \sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ n_1\neq m_1}} \|(-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{n_1^2}{2r^2})^{-\frac{1}{2}} P_{n_1} P_{n_2} V_c^{r,L}(x_1-x_2) \times \\
\times P_{m_1} P_{m_2} (-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\alpha^2}{2} + \frac{m_1^2}{2r^2})^{-\frac{1}{2}}\|.
\end{aligned}$$

On introduit maintenant la notation

$$\begin{aligned} V_{m,n}^{r,L}(x) :=& P_m V_c^{r,L}(x) P_n = \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x,y) e^{i(m-n)\frac{y}{r}} dy \\ =& \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} V_c^{r,L}(x,ry) e^{i(m-n)y} dy. \end{aligned}$$

On peut écrire si l'on introduit $a, b > 0$ et si l'on procède au changement de variable $x = x_1 - x_2$, $X = x_2$

$$\begin{aligned} &(-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + a)^{-\frac{1}{2}} V_{n,m}^{r,L}(x_1 - x_2)(-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + b)^{-\frac{1}{2}} \overset{u.e.}{\sim} \\ &\overset{u.e.}{\sim} \left(\frac{\varepsilon}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial X}\right)\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial X} \end{pmatrix} + a\right)^{-\frac{1}{2}} V_{n,m}^{r,L}(x) \\ &\times \left(\frac{\varepsilon}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial X}\right)\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial X} \end{pmatrix} + b\right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

La matrice ci-dessus a comme valeurs propres $\frac{-3\pm\sqrt{5}}{2}$, alors, en utilisant la relation (1.20), la norme de l'expression ci-dessus est majorée par

$$\left\| \left(\frac{\varepsilon}{3-\sqrt{5}}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial X^2}\right) + a\right)^{-\frac{1}{2}} V_{n,m}^{r,L}(x) \left(\frac{\varepsilon}{3-\sqrt{5}}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial X^2}\right) + b\right)^{-\frac{1}{2}} \right\|_{\mathcal{B}(L^2(\mathcal{S}_L^2))}. \tag{1.21}$$

Grâce au théorème spectral, on a

$$\left\| \left(\frac{\varepsilon}{3-\sqrt{5}}(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial X^2}) + a\right)^{-\frac{1}{2}} (-\frac{1}{2}\frac{\varepsilon\partial^2}{\partial x^2} + a)^{\frac{1}{2}} \right\|^2 \leq 1.$$

On obtient par conséquent

$$\|\widetilde{K}(\varepsilon,\alpha)\| \leq \frac{N(N-1)}{2}\sup_{m\in\mathbb{Z}}\sum_{\substack{n\in\mathbb{Z}\\ n\neq m}} \|(-\varepsilon\partial_x^2 + \alpha^2 + \frac{m^2}{r^2})^{-1/2} V_{m,n}^{r,L}(-\varepsilon\partial_x^2 + \alpha^2 + \frac{n^2}{r^2})^{-1/2}\|. \tag{1.22}$$

On s'est donc ramené à estimer une expression agissant dans un espace à une dimension et indexé par deux paramètres n et m. Ceci est similaire à ce qui est traité dans [CDR2], excepté que l'on est sur un cercle de longueur L et non sur la droite. On va maintenant suivre la méthode de cet article. Afin de mieux voir les similitudes, on va introduire l'opérateur agissant sur $L^2(\mathcal{S}_L)$

$$\tilde{V}_{m,n}^{r,L} := (-\varepsilon\partial_x^2 + \alpha^2 + \frac{m^2}{r^2})^{-1/2} V_{m,n}^{r,L}(-\varepsilon\partial_x^2 + \alpha^2 + \frac{n^2}{r^2})^{-1/2}$$

On peut voir en annexe A.1 que l'on a la propriété suivante

$$V_c^r(x,y) = \frac{1}{r}V_c^1(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}),$$

qui donne la relation suivante, (voir annexe A.2.2 pour la première égalité) :

$$\begin{aligned}
V^{r,L}_{m,n}(x) &= \frac{1}{L}\sum_{p\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2p\pi x}{L}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2p\pi x'}{L}} \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{r} V^1_c(\frac{x'}{r}, y) e^{i(m-n)y} dy dx' + \\
&+ \frac{1}{L}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{r} V^1_c(\frac{x'}{r}, y) e^{i(m-n)y} dy dx' \\
&= \frac{1}{r}\frac{r}{L}\sum_{p\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2pr\pi}{L}\frac{x}{r}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2rp\pi x'}{L}} \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} V^1_c(x', y) e^{i(m-n)y} dy dx' + \\
&+ \frac{1}{r}\frac{r}{L}\int_{-\frac{L}{2r}}^{\frac{L}{2r}} \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} V^1_c(x', y) e^{i(m-n)y} dy dx' \\
&=: \frac{1}{r} V^{1,L/r}_{m,n}(\frac{x}{r})
\end{aligned}$$

avec $V^{1,L/r}_{m,n}$ périodique de période L/r.

On fait maintenant un changement d'échelle unitaire de $L^2(\mathcal{S}_L)$ dans $L^2(\mathcal{S}_L/r)$ avec l'opérateur $(Uf)(x) := r^{1/2} f(rx)$ et $(U^* f)(x) := r^{-1/2} f(x/r)$. Alors, on obtient :

$$U\tilde{V}^{r,L}_{m,n}U^* = r\cdot[-\varepsilon\partial_x^2 + r^2\alpha^2 + m^2]^{-1/2} V^{1,L/r}_{m,n}[-\varepsilon\partial_x^2 + r^2\alpha^2 + n^2]^{-1/2}. \tag{1.23}$$

On va donner d'abord une estimation importante pour $V^{1,L/r}_{m,n}$, établie dans le lemme suivant :

Lemme 1.2.6. *Pour tout $0 < \gamma \leq 1$ il existe $C(\gamma) > 0$ tel que pour tout $r > 0$, $L > 0$, $|m-n| \geq 1$ et $x \in [-L/(2r), L/(2r))$ on a l'estimation suivante :*

$$|V^{1,L/r}_{m,n}|(x) \leq \frac{C(\gamma)}{|n-m|^\gamma}\frac{1}{|x|^\gamma} + \frac{r^3}{L^3}\frac{20}{|n-m|}. \tag{1.24}$$

Démonstration. On rappelle que la transformée de Fourier d'une fonction $f \in L^2(r/L\mathcal{S}^1)$ sur le cercle $(r/L)\mathcal{S}^1$ est donnée par :

$$\hat{f}(p) := \frac{r}{L}\int_{-\frac{L}{2r}}^{\frac{L}{2r}} f(x) e^{-i\frac{2\pi r}{L}px} dx$$

et la transformée de Fourier inverse :

$$\check{f}(p) := \sum_{p\in\mathbb{Z}} f(p) e^{i\frac{2\pi r}{L}x}$$

On introduit la notation

$$v^1_{mn}(x) := \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} V^1_c(x,y) e^{i(m-n)y} dy. \tag{1.25}$$

On peut écrire

$$\begin{aligned}
V^{1,L/r}_{m,n}(x) &= \frac{r}{L}\sum_{p\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{L}prx} \int_{-L/2r}^{L/2r} e^{-i\frac{2\pi}{L}prs} v^1_{mn}(s) ds + \\
&+ \frac{r}{L}\sum_{p\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}prx} \int_{L/2r}^{\infty} 2\cos(\frac{2\pi}{L}prs) v^1_{mn}(s) ds \qquad (1.26) \\
&=: v^1_{mn}(x) + N_2(x). \qquad (1.27)
\end{aligned}$$

Pour le terme N_2, on va procéder comme dans l'annexe A.2.2 pour l'obtention de (A.25), on écrit

$$N_2(x) = \frac{2r}{L}\sum_{p\geq 1}\cos(\frac{2\pi}{L}prx)J(m)$$

où

$$J(m) := \int_{L/2r}^{\infty} 2\cos(\frac{2\pi}{L}prs)v_{mn}^1(s)ds.$$

En intégrant deux fois par parties on obtient

$$J(m) = -2\left(\frac{L}{2\pi rp}\right)^2\left((-1)^p(v_{mn}^1)'(\frac{L}{2r}) + \int_{L/2r}^{\infty}\cos(\frac{2\pi}{L}prs)(v_{mn}^1)''(s)ds\right),$$

et finalement

$$N_2(x) = -\frac{L}{\pi^2 r}\sum_{p\geq 1}\frac{\cos(\frac{2\pi}{L}prx)}{p^2}\left((-1)^p(v_{mn}^1)'(\frac{L}{2r}) + \int_{L/2r}^{\infty}\cos(\frac{2\pi}{L}prs)(v_{mn}^1)''(s)ds\right)$$

Grâce aux propriétés de symétrie de V_c^1 on peut écrire

$$v_{m,n}^1(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\cos[(m-n)y]}{[x^2+4\sin^2(y/2)]^{1/2}}dy.$$

En intégrant par parties on obtient :

$$v_{m,n}^1(x) = \frac{1}{2\pi(m-n)}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\sin[(m-n)y]\sin(y)}{[x^2+4\sin^2(y/2)]^{3/2}}dy \tag{1.28}$$

que l'on peut écrire comme :

$$v_{m,n}^1(x) = \frac{2}{\pi(m-n)}\int_{0}^{\frac{\pi}{2}}\frac{\sin[(m-n)y]\sin(y)}{[x^2+4\sin^2(y/2)]^{3/2}}dy. \tag{1.29}$$

On a aussi

$$\begin{aligned}
(v_{m,n}^1)'(s) &= -\frac{3}{2\pi(n-m)}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{s\sin[(n-m)y]\sin(y)}{[s^2+4\sin^2(y/2)]^{5/2}}dy\\
(v_{m,n}^1)''(s) &= \frac{1}{2\pi(n-m)}\int_{-\pi}^{\pi}\left(\frac{-3\sin[(n-m)y]\sin(y)}{[s^2+4\sin^2(y/2)]^{5/2}} + \frac{15s^2\sin[(n-m)y]\sin(y)}{[s^2+4\sin^2(y/2)]^{7/2}}\right)dy.
\end{aligned}$$

que l'on peut majorer par

$$\begin{aligned}
|(v_{m,n}^1)'(s)| &\leq \frac{3}{|n-m|}\frac{1}{s^4}\\
|(v_{m,n}^1)''(s)| &\leq \frac{1}{|n-m|}\left(\frac{3}{|s^5|} + \frac{15}{|s^5|}\right) = \frac{1}{|n-m|}\frac{18}{|s^5|}.
\end{aligned}$$

Et on peut écrire

$$\begin{aligned}
|N_2(x)| &\leq \frac{L}{\pi^2 r}\sum_{p\geq 1}\frac{1}{p^2}\frac{1}{|n-m|}\left(3(\frac{2r}{L})^4 + \frac{18}{4}(\frac{2r}{L})^4\right)\\
&\leq \frac{20}{|n-m|}\frac{r^3}{L^3}
\end{aligned}$$

On va maintenant majorer le terme v^1_{mn}. Comme $|\sin y| \geq |2y/\pi|$ on a la majoration suivante :

$$\frac{1}{(x^2+4\sin^2(y/2))^{3/2}} \leq \frac{1}{(x^2+4y^2/\pi^2)^{3/2}} \leq \frac{\pi^3}{8}\frac{1}{(x^2+y^2)^{3/2}}, \tag{1.30}$$

et on obtient pour $x \in [-L/2r, L/2r)$:

$$|v^1_{mn}(x)| \leq \frac{\pi^2}{4|n-m|}\int_0^{\pi/2} \frac{|\sin[(n-m)y]\sin(y)|}{[x^2+y^2]^{3/2}}dy.$$

Maintenant on emploie les inégalités (ici $0 < \gamma \leq 1$ est arbitraire) :

$$|\sin[(n-m)y]| \leq |n-m|^{1-\gamma}|y|^{1-\gamma}, \quad |\sin(y)| \leq |y|,$$

on fait le changement de variables suivant $s = y/|x|$ et on écrit :

$$|v^1_{mn}(x)| \leq \frac{\pi^2}{4|n-m|}\frac{|n-m|^{1-\gamma}}{|x|^\gamma}\int_0^\infty \frac{s^{2-\gamma}}{[1+s^2]^{3/2}}ds.$$

Ce qui finit la preuve du lemme en choisissant

$$C(\gamma) := \int_0^\infty \frac{s^{2-\gamma}}{[1+s^2]^{3/2}}ds = \frac{\Gamma(\frac{3}{2}-\frac{\gamma}{2})\Gamma(\frac{\gamma}{2})}{\sqrt{\pi}}.$$

□

Maintenant retournons à la relation (1.23), et estimons la norme. L'estimation (1.24) nous donne que $V^{1,L/r}_{m,n}$ est composée de deux parties, une fonction appartenant à $L^1(-L/2r, L/2r)$ et une fonction bornée en x. Pour la partie bornée, on peut prendre le supremum et écrire

$$\begin{aligned}&\|r\cdot[-\varepsilon\partial_x^2+r^2\alpha^2+m^2]^{-1/2}\frac{20r^3}{L^3|m-n|}[-\varepsilon\partial_x^2+r^2\alpha^2+n^2]^{-1/2}\| \leq \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{r^2\alpha^2+m^2}}\frac{20r^4}{L^3|m-n|}\frac{1}{\sqrt{r^2\alpha^2+n^2}}.\end{aligned}$$

Pour la partie non bornée, on va écrire

$$\begin{aligned}&\|[-\varepsilon\partial_x^2+r^2\alpha^2+m^2]^{-1/2}\frac{1}{|m-n|^\gamma|x|^\gamma}[-\varepsilon\partial_x^2+r^2\alpha^2+n^2]^{-1/2}\| \leq \\ &\|[-\varepsilon\partial_x^2+r^2\alpha^2+m^2]^{-1/2}\frac{1}{\sqrt{|m-n|^\gamma|x|^\gamma}}\|\cdot\|\frac{1}{\sqrt{|m-n|^\gamma|x|^\gamma}}[-\varepsilon\partial_x^2+r^2\alpha^2+n^2]^{-1/2}\|,\end{aligned}$$

et on peut écrire d'après l'annexe B.1, appliqué au cercle $(\mathcal{S}_L/r)$:

$$\begin{aligned}&\|\frac{1}{\sqrt{|m-n|^\gamma|x|^\gamma}}[-\varepsilon\partial_x^2+r^2\alpha^2+n^2]^{-1/2}\|_{HS} \leq \\ &\leq \frac{r}{L}\|\frac{1}{\sqrt{|m-n|^\gamma|x|^\gamma}}\|_{L^2(\mathcal{S}_L/r)}\|[\varepsilon(\frac{2\pi pr}{L})^2+r^2\alpha^2+n^2]^{-1/2}\|_{\ell^2}.\end{aligned}$$

On calcule pour $\gamma < 1$

$$\|\frac{1}{\sqrt{|m-n|^\gamma|x|^\gamma}}\|^2_{L^2(\mathcal{S}_L/r)} = \frac{1}{|n-m|^\gamma}\left(\frac{L}{2r}\right)^{1-\gamma}\frac{2}{1-\gamma}$$

et

$$\|[\varepsilon(\frac{2\pi pr}{L})^2 + r^2\alpha^2 + n^2]^{-1/2}\|_{\ell^2}^2 = \sum_{p\in\mathbb{Z}} \frac{1}{\varepsilon(\frac{2\pi pr}{L})^2 + r^2\alpha^2 + n^2}$$
$$= \frac{1}{r^2\alpha^2 + n^2} + \frac{2}{\varepsilon(\frac{2\pi r}{L})^2} \sum_{p\geq 1} \frac{1}{p^2 + \frac{r^2\alpha^2+n^2}{\varepsilon(\frac{2\pi r}{L})^2}}.$$

En estimant la somme par une intégrale :

$$\frac{2}{\varepsilon(\frac{2\pi r}{L})^2} \sum_{p\geq 1} \frac{1}{p^2 + \frac{r^2\alpha^2+n^2}{\varepsilon(\frac{2\pi r}{L})^2}} \leq \frac{2}{\varepsilon(\frac{2\pi r}{L})^2} \int_0^\infty \frac{1}{p^2 + \frac{r^2\alpha^2+n^2}{\varepsilon(\frac{2\pi r}{L})^2}} dp = \frac{L}{r\sqrt{\varepsilon}\sqrt{r^2\alpha^2+n^2}}$$

ce qui donne l'estimation suivante :

$$\|[\varepsilon(\frac{2\pi pr}{L})^2 + r^2\alpha^2 + n^2]^{-1/2}\|_{\ell^2}^2 \leq \frac{1}{r^2\alpha^2 + n^2} + \frac{L}{r\sqrt{\varepsilon}\sqrt{r^2\alpha^2+n^2}}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{r^2\alpha^2+n^2}} \left(\frac{1}{\sqrt{r^2\alpha^2+n^2}} + \frac{L}{r\sqrt{\varepsilon}} \right)$$
$$\leq \frac{1}{r\sqrt{r^2\alpha^2+n^2}} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{L}{\sqrt{\varepsilon}} \right)$$

Au total

$$\|r \cdot [-\varepsilon\partial_x^2 + r^2\alpha^2 + m^2]^{-1/2} \frac{C(\gamma)}{|m-n|^\gamma |x|^\gamma} [-\varepsilon\partial_x^2 + r^2\alpha^2 + 2n^2]^{-1/2}\|_{L^2(\mathcal{S}_L/r)} \leq$$
$$\leq r\frac{r}{L}\frac{2}{1-\gamma}\frac{C(\gamma)}{|n-m|^\gamma} \left(\frac{L}{2r}\right)^{1-\gamma} \frac{1}{(r^2\alpha^2+n^2)^{1/4}(r^2\alpha^2+m^2)^{1/4}} \frac{1}{r} \left(\frac{1}{\alpha} + \frac{L}{\sqrt{\varepsilon}}\right)$$
$$\leq C_2(\gamma)\frac{1}{|n-m|^\gamma} \frac{r^\gamma}{(r^2\alpha^2+n^2)^{1/4}(r^2\alpha^2+m^2)^{1/4}} \left(\frac{1}{\alpha L^\gamma} + \frac{L^{1-\gamma}}{\sqrt{\varepsilon}}\right), \qquad C_2(\gamma) := \frac{2^\gamma C(\gamma)}{(1-\gamma)}.$$

On a donc obtenu une borne supérieure pour la norme de l'opérateur de (1.23) qui a la forme :

$$||\tilde{V}_{m,n}^{r,L}||_{\mathcal{B}(\mathcal{S}_L)} \leq \frac{1}{\sqrt{r^2\alpha^2+m^2}} \frac{20r^4}{L^3|m-n|} \frac{1}{\sqrt{r^2\alpha^2+n^2}}$$
$$+ \frac{C_2(\gamma)}{1-\gamma}\frac{1}{|n-m|^\gamma} L^{1-\gamma} \frac{r^\gamma}{\sqrt{\varepsilon}(r^2\alpha^2+n^2)^{1/4}(r^2\alpha^2+m^2)^{1/4}} \tag{1.31}$$

On rappelle que l'on est interessé par une estimation de (1.22) et que l'on a $m \neq n$. On choisit $1/2 < \gamma < 1$. On doit examiner plusieurs cas :

1. Quand $m = 0$ et $|n| \geq 1$. Alors le premier terme de (1.31) est majoré par une expression du type $r^3\alpha^{-1}L^{-3}|n|^{-2}$. Le second terme est majoré par $r^{\gamma-1/2}\alpha^{-1/2}\varepsilon^{-1/2}L^{1-\gamma}|n|^{-1/2-\gamma}$. Les deux contributions sont sommables par rapport à n.

2. Fixons $m \neq 0$, et considérons tous les $n \neq m$. Quand $n = 0$, on obtient la même chose qu'au dessus mais pour m. Si $n \neq 0$, on peut majorer par le terme indépendant de r et α suivant :
$$\sup_{m\neq 0} |m|^{-1/2} \sum_{n\neq 0, n\neq m} \frac{1}{|n|^{1/2}|n-m|^\gamma}, \quad 1/2 < \gamma.$$

On peut utiliser soit l'inégalité de Hölder, ou bien l'on peut séparer la somme ci-dessus de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
&\sum_{n\neq 0, n\neq m} \frac{1}{|n|^{1/2}|n-m|^{\gamma}} \\
&= \left(\sum_{n\neq 0, n\neq m, |n|\leq |n-m|} + \sum_{n\neq 0, n\neq m, |n|>|n-m|} \right) \frac{1}{|n|^{1/2}|n-m|^{\gamma}} \\
&\leq \sum_{n\neq 0, n\neq m} \left(\frac{1}{|n|^{\gamma+1/2}} + \frac{1}{|n-m|^{1/2+\gamma}} \right) = \sum_{n\neq 0, n\neq m} \frac{2}{|n|^{\gamma+1/2}} \leq \mathrm{const}(\gamma).
\end{aligned}$$

Pour r assez petit, c'est le terme du cas numéro 1 qui devient prépondérant dans l'estimation, on prend γ proche de 1 et on en déduit l'estimation (1.14). □

On peut maintenant établir la preuve du théorème de cette section :

Preuve du théorème 1.2.2. On commence la preuve en remarquant que N et L sont proportionnels (voir début de ce chapitre). On fixe L (et donc N) et

$$\mu = -\alpha^2 = -4N \sup_x |v_{\mathrm{at}}(x)|,$$

ce qui entraine que $\mu \in \sigma(H_{\mathrm{diag}})$. On choisit aussi $\varepsilon = 1/2$. Par conséquent, on peut appliquer les lemmes 1.2.3, 1.2.4 et 1.2.5, et pour $z \in \rho(H_{\mathrm{diag}})$, en utilisant la relation (1.11), il existe $r_{00}(L,\gamma) > 0$ et une constante dépendant de γ : $C_\gamma > 0$ tel que l'on a pour $r \leq r_{00}$

$$\|K(z)\| \leq C_\gamma \frac{r^{\gamma-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\varepsilon\alpha}} L^{3-\gamma} \left(1 + \frac{|z+\alpha^2|}{d(z,\sigma(H_{\mathrm{diag}}))} \right),$$

car α et μ respectent bien les hypothèses du lemme 1.2.4 :

$$\mu \leq -\alpha^2 < -2N \sup_x |v_{\mathrm{at}}(x)|,$$

et $0 < \varepsilon < 1$. Pour certain z bien choisis tels que la condition sur z suivante soit vérifiée :

$$C_\gamma \frac{r^{\gamma-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\varepsilon\alpha}} L^{3-\gamma} \left(1 + \frac{|z+\alpha^2|}{d(z,\sigma(H_{\mathrm{diag}}))} \right) \leq \frac{1}{2},$$

on a alors $\|K(z)\| \leq 1/2$ et on utilise la relation (1.9) qui montre que $z \in \rho(H_c)$ et qui donne la majoration de la différence des résolvantes.

□

Proposition 1.2.7. *Nous avons les propriétés suivantes pour H_0*

i) H_0 est borné inférieurement et auto-adjoint sur son domaine $\mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N)$.

ii) H_0 possède seulement des valeurs propres isolées.

iii) Les valeurs propres $\{\lambda_k\}_{\lambda\in\mathbb{N}}$ de H_0 avec $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots$ se comportent asymptotiquement comme :

$$\lambda_k \overset{k\to\infty}{\sim} C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}.$$

où $C_N = N2^{N-1}\pi^{\frac{N}{2}}\Gamma(\frac{N}{2})$, Γ est la fonction gamma de Euler.

Démonstration. Pour $i)$, l'opérateur $(-\Delta) := -\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$ est auto-adjoint dans $\mathcal{H}^N$ avec comme domaine $\mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N)$ et non négatif. De plus, v_{at} est symétrique et borné. Pour chaque j et k, on va montrer que le potentiel d'intéraction entre deux particules de coordonnées x_j et x_k sur le cercle, est relativement borné à l'opérateur $(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2})$. Premièrement, $D(-\Delta) \subset D(v_L)$ car v_L est ici une fonction $L^2(\mathcal{S}_L)$, voir lemme A.2.4. Ensuite, si l'on procède au changement de variables suivant : $X = x_j - x_k$ et $Y = x_k$ on obtient :

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \overset{u.e.}{\simeq} -(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial X} \\ \frac{\partial}{\partial Y} \end{pmatrix} \geq -(\frac{3-\sqrt{5}}{4})(\frac{\partial}{\partial X}, \frac{\partial}{\partial Y}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial X} \\ \frac{\partial}{\partial Y} \end{pmatrix}.$$

Soit $0 < \varepsilon \leq 1$, on peut écrire

$$\begin{aligned} &\|v_L(x_j - x_k) \left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(-\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{-1} \|^2 \leq \\ &\leq \|v_L(X) \left(\sqrt{\varepsilon}\frac{3-\sqrt{5}}{4}(-\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\partial^2}{\partial Y^2}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{-1} \|^2. \end{aligned} \tag{1.32}$$

En utilisant le téorème spectral on obtient

$$\| \left(\sqrt{\varepsilon}\frac{3-\sqrt{5}}{4}(-\frac{\partial^2}{\partial X^2}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \left(\sqrt{\varepsilon}\frac{3-\sqrt{5}}{4}(-\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\partial^2}{\partial Y^2}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{-1} \|^2 \leq 1$$

et on peut donc majorer (1.32) par

$$\|v_L(X) \left(\sqrt{\varepsilon}\frac{3-\sqrt{5}}{4}(-\frac{\partial^2}{\partial X^2}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{-1} \|^2_{\mathcal{B}(L^2(\mathcal{S}_L))}$$

Avec l'aide [RS3, Th. XI.20] qui établit que pour deux fonctions $f, g \in L^2(\mathbb{R}^2)$ on la relation

$$\|f(x)g(-i\nabla)\|_{HS} \leq \frac{1}{2\pi}\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \cdot \|g\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}$$

on montre (voir annexe B.1), grâce à la géométrie du tore, on a de même pour $f, g \in L^2(\mathcal{S}_L)$

$$\|f(x)g(-i\nabla)\|_{HS} \leq \frac{1}{L}\|f\|_{L^2(\mathcal{S}_L^2)} \cdot \|g\|_{\ell^2}.$$

Ce qui permet d'écrire

$$\begin{aligned} &\|v_L(X) \left(\sqrt{\varepsilon}(-\frac{\partial^2}{\partial X^2}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right)^{-1} \|^2 \\ &\leq \frac{1}{L^2}\int_{\mathcal{S}_L} |v_L(X)|^2 dX \cdot \sum_{p\in\mathbb{Z}} \left| \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}(\frac{2\pi}{L}p)^2 + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}} \right|^2 \end{aligned}$$

Et comme on a d'une part $v_L \in L^2(\mathcal{S}_L)$ d'après A.2.4 avec c_1, c_2 tels que

$$\|v_L\|^2 \leq \frac{c_1}{r} + c_2$$

et d'autre part

$$\left(\frac{L^2}{\sqrt{\varepsilon}4\pi^2}\right)^2 \sum_{p\in\mathbb{Z}} \left| \frac{1}{p^2 + \frac{L^2}{\varepsilon 4\pi^2}} \right|^2 = \varepsilon + 2\left(\frac{L^2}{\sqrt{\varepsilon}4\pi^2}\right)^2 \sum_{p\geq 1} \left| \frac{1}{p^2 + \frac{L^2}{\varepsilon 4\pi^2}} \right|^2,$$

et on va majorer la somme par l'intégrale :

$$\sum_{p\geq 1}\left|\frac{1}{p^2+\frac{L^2}{\varepsilon 4\pi^2}}\right|^2 \leq \int_0^\infty \left|\frac{1}{p^2+\frac{L^2}{\varepsilon 4\pi^2}}\right|^2 dp$$
$$= \frac{\pi}{4}\left(\frac{\sqrt{\varepsilon}2\pi}{L}\right)^3$$

alors la quantité (1.32) est bornée, uniformément pour ε dans un intervalle borné. Par ailleurs, on a la relation

$$\|v_L(x_j-x_k)\left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(-\Delta)+\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)^{-1}\| \leq \|v_L(x_j-x_k)\left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(-\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}-\frac{\partial^2}{\partial x_k^2})+\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)^{-1}\|$$
$$\cdot \|\left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(-\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}-\frac{\partial^2}{\partial x_k^2})+\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)\left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(-\Delta)+\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)^{-1}\|$$

On peut montrer que le second facteur de cette expression est borné par 1 en utilisant la transformée de Fourier par exemple. on a donc

$$\|v_L(x_j-x_k)\left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}(-\Delta)+\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\right)^{-1}\|^2 \leq (\frac{c_1}{r}+c_2)(\frac{\varepsilon}{L^2}+\frac{\sqrt{\varepsilon}}{4L})$$

et comme on peut prendre ε aussi petit que l'on veut, chaque potentiel d'interaction est donc relativement borné au Laplacien à N particules avec borne relative nulle. On conclut par le théoreme de Kato-Rellich [RS2, X.2] que H_0 est auto-adjoint sur le domaine $\mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N)$. Pour $ii)$, la résolvante associée au Laplacien à N particules est compacte. En effet, $(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}+i)^{-1}$ est compacte[1] et avec l'équation de la résolvante on peut écrire :

$$(-\frac{1}{2}\Delta+i)^{-1} = (-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}+i)^{-1} + (-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}+i)^{-1}(\frac{1}{2}\Delta-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2})(-\frac{1}{2}\Delta+i)^{-1}$$

qui est composée de deux termes compacts car le deuxième terme du membre de droite est le produit d'un opérateur compact : $(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}+i)^{-1}$ et d'un opérateur borné[2] : $(\frac{1}{2}\Delta-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2})(-\frac{1}{2}\Delta+i)^{-1}$. On obtient que la résolvente associée a H_0 est compacte en écrivant l'équation de la résolvente sous la forme suivante[3] :

$$(H_0+i)^{-1} = (-\frac{1}{2}\Delta+i)^{-1} - (-\frac{1}{2}\Delta+i)^{-1}(-\frac{1}{2}\Delta-H_0)(-\frac{1}{2}\Delta+i)^{-1}(-\frac{1}{2}\Delta+i)(H_0+i)^{-1}. \quad (1.33)$$

et en utilisant la propriété $i)$ qui montre qu'il n'y a que des opérateurs bornés ou compacts. En conséquence, H_0 ne possède que des valeurs propres discrètes. Pour $iii)$, comme la perturbation est relativement bornée à $(-\frac{1}{2}\Delta)$ avec borne relative 0, on écrit pour $\psi \in D(-\Delta)$, $\varepsilon > 0$ et $b(\varepsilon) > 0$:

$$\left|\left(\psi, (H_0-(-\frac{1}{2}\Delta))\psi\right)\right| \leq \varepsilon(\psi, (-\frac{1}{2}\Delta)\psi) + b(\varepsilon)\|\psi\|^2$$

ainsi

$$(1-\varepsilon)\left((-\frac{1}{2}\Delta)\psi,\psi\right) - b(\varepsilon) \leq (H_0\psi,\psi) \leq (1+\varepsilon)\left((-\frac{1}{2}\Delta)\psi,\psi\right) + b(\varepsilon).$$

[1] démontré par exemple en calculant la norme Hilbert-Schmidt de la transformée de Fourier de cet opérateur.
[2] On peut voir que l'opérateur est borné en utilisant le théorème du graphe fermé par exemple
[3] Pour plus de détails, se reporter à l'appendice B.3.

On utilise maintenant le principe du minimax [RS4, XIII.1]. Soit $\{\lambda_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ les valeurs propres de H_0 et $\{E_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ les valeurs propres de $(-\frac{1}{2}\Delta)$ avec conditions de bords périodiques, alors pour chaque k on peut ecrire

$$(1-\varepsilon)E_k - b(\varepsilon) \leq \lambda_k \leq (1+\varepsilon)E_k + b(\varepsilon) \tag{1.34}$$

Il est établit dans [RS4, XIII.15] que les valeurs propres $\widetilde{E}_k$ associées à l'Hamiltonien dans une boite de dimension N et de coté L avec les conditions de Dirichlet ou Neumann aux bords se comportent asymptotiquement comme

$$\widetilde{E}_k \overset{k\to\infty}{\sim} C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}$$

où $C_N = N2^{N-1}\pi^{\frac{N}{2}}\Gamma(\frac{N}{2})$, Γ étant la fonction gamma d'Euler. On utilise la technique dite "Dirichlet-Neumann bracketing" pour montrer que les conditions périodiques aux bords mènent au même résultat pour les E_k. De (1.34) et pour $E_k \neq 0$ on déduit

$$\left|\frac{\lambda_k}{E_k} - 1\right| \leq \varepsilon + \frac{b(\varepsilon)}{E_k}.$$

Soit $\eta > 0$ et $\varepsilon = \frac{\eta}{2}$, si l'on choisit k_η tel que

$$E_{k_\eta} \geq \frac{2}{\eta} b(\varepsilon) \tag{1.35}$$

alors

$$\left|\frac{\lambda_{k_\eta}}{E_{k_\eta}} - 1\right| \leq \eta \tag{1.36}$$

Alors, pour tout $\eta > 0$, puisque E_k croit avec k et au moins pour k grand, la condition (1.35) peut être satisfaite et il existe $k_\eta \in \mathbb{N}$ tel que pour $E_k \geq E_{k_\eta}$ l'équation (1.36) est vérifiée. On déduit que les valeurs propres λ_k ont le même comportement asymptotique que les E_k. De plus, comme les valeurs propres s'accumulent à l'infini, on déduit avec la compacité de la résolvente de H_0 la propriété de *ii)* que les λ_k sont toutes isolées. □

1.3 Conclusion

Après avoir introduit le modèle mathématique pour le nanotube de carbone, avec l'Hamiltonien H_c, on a utilisé une des propriétés clefs de ces nanotubes : leur faible diamètre, afin de réduire le problème à l'étude de H_0, un Hamiltonien à une dimension. Le théorème 1.2.2 donne un résultat essentiel pour la réduction à une dimension, mais il n'est pas suffisant pour montrer un lien entre les spectres de H_c et H_0. En effet, pour établir la stabilité du spectre à l'aide de la théorie des perturbations, il faudrait aussi connaître certaines informations sur le spectre de H_0. Par exemple, il faudrait être assuré que l'on peut tracer un contour dans le plan spectral autour de chaque valeur propre isolée de H_0 et entourant uniquement celle-là pour tout r inférieur à un $r_0 > 0$ suffisamment petit. Dans les chapitres suivants de la présente étude, les informations collectées sur le comportement du spectre de l'opérateur H_0 par rapport à r ne seront pas suffisantes pour montrer que les spectres de H_c et H_0 sont asymptotiques lorsque r tend vers zéro.

L'affirmation selon laquelle le spectre de basse énergie de H_c peut être approximé par celui de H_0 pour r suffisamment petit est donc une conjecture, tant que le comportement du spectre de H_0 par rapport à r n'a pas été établi précisément. Parmi les pistes à explorer qui pourraient permettre d'obtenir cette information, on peut citer les travaux de [BD] où un problème à N

particules en trois dimensions à été réduit à un problème unidimensionnel, ainsi que [CDP] où un modèle à deux particules sur un cylindre infini avec un potentiel d'interaction similaire à v_L est approximé par un modèle avec une interaction ponctuelle sur la ligne. L'idée est d'établir que l'opérateur H_0 est asymptotique, lorsque r tend vers zéro, à un opérateur dont le spectre est calculable suffisamment précisément, comme par exemple le cas où les interactions entre électrons sont remplacées par des interactions ponctuelles. On pourra ainsi bénéficier de l'abondante littérature au sujet des modèles de bosons et fermions en une dimension[4]. On peut aussi suggérer le modèle de Girardeau [Gi] comme candidat sérieux pour l'opérateur limite.

Même si le traitement rigoureux est incomplet, on peut raisonnablement penser que la conjecture est vrai pour les nanotubes examinés par les physiciens. En effet, des études numériques comme [PRB95] affirme que le nanotube a un comportement unidimensionnel et des observations expérimentales [PRL01] montrent que le nanotube peut être considéré comme une structure unidimensionnelle[5].

On fait une dernière remarque sur la portée du théorème 1.2.2 en notant que l'on doit se limiter au spectre de basse énergie de H_c car la condition sur z du théorème implique que z doit grandir moins vite qu'une constante multipliée par $1/\sqrt{r}$, ce qui ne peut pas être satisfait pour les parties de H_{diag} du type $H_0 + n/r^2$ avec $n > 0$. Mais ce qui intéresse les physiciens pour la caractérisation des nanotubes est uniquement le spectre de basse énergie, La réduction à une dimension donnée ici est donc tout à fait appropriée.

Quelques propriétés de H_0 ont été énoncées à la proposition 1.2.7 et on va continuer l'analyse de cet opérateur dans les chapitres suivant. On va notamment étudier l'influence de certains paramètres de H_0, comme λ, le paramètre de couplage faible, ou F_0, le paramètre qui va permettre d'obtenir la réponse linéaire du système à l'action de la lumière. Dans tous ces chapitres intermédiaires le rayon sera supposé fixe, assez petit et non nul, et cela sera suffisant. On verra l'influence du rayon sur une partie du spectre de H_0 au chapitre 6, et on reviendra sur H_c à la fin du travail.

Avec la réduction à une dimension, on peut remarquer aussi la séparation entre le problème de l'étude de l'influence du paramètre de chiralité et celui de l'influence du rayon du tube. La chiralité est l'information sur la périodicité du réseau d'atomes, qui est contenue dans V_{at}. Celle-ci est entièrement conservée à l'intérieur de l'opérateur H_{diag}, car les termes hors diagonaux de H_c dans la base du Laplacien transverse ne contiennent pas d'expression dépendante du potentiel atomique, on peut le voir avec la relation (1.6). Ainsi, les états propres de H_c dépendront de la chiralité de la même manière que les états propres de H_{diag}, les corrections données par la théorie de perturbation ne dépendront pas de la chiralité. L'influence de la chiralité sur le bas du spectre sera donc donnée directement par l'analyse de H_0. Avec cette propriété, on verra dans les prochains chapitres que l'effet de la chiralité et du rayon peuvent être étudiés séparément.

[4] voir par exemple l'introduction de [OBBG] pour un aperçu de cette littérature.

[5] Expérimentalement, la lumière envoyée sur le nanotube doit être polarisée suivant l'axe du tube pour pouvoir observer des pics d'absorption aux énergies qui nous intéressent, si la lumière est polarisée perpendiculairement l'étude montre qu'il n'y a pas d'absorption.

Chapitre 2

Potentiel externe et réponse linéaire

Dans les expériences de physique sur la mesure de la réponse optique linéaire, une lumière monochromatique, de faible amplitude et de fréquence variable, est envoyée sur le nanotube. Une partie de cette lumière est absorbée par les électrons et permet au sytème tube+N électrons de passer dans un état excité. L'autre partie, non absorbée, traverse le nanotube et est mesurée. Le rapport de l'intensité envoyée sur l'intensité mesurée en sortie donne le spectre d'absorption, en fonction de la fréquence de la lumière. Ainsi absorption et états du système sont liés. Pour obtenir le spectre d'absorption, deux problèmes distincts doivent être étudiés :

- il faut connaître les états propres du tube avec N électrons soumis à un champ électromagnétique dépendant du temps. Ce ne sont bien sûr pas les mêmes que pour le système sans lumière mais, à champ électromagnétique faible, on peut faire une étude perturbative.
- il faut déterminer quelles sont les transitions entre états possibles et donnant lieu à absorption de lumière et dans quelle proportion. Ceci est fait au chapitre 3.

Le but de ce chapitre est d'étudier le premier point et d'exprimer de manière perturbative le spectre du système avec champ électromagnétique en fonction des états du système non perturbé. Dû au grand nombre de particules, on préfèrera ici caractériser indirectement les états en calculant la quantité appelée en physique statistique "matrice densité" du système. On retrouvera les états propres plus tard dans l'étude, au chapitre 3.

Du point de vue mathématique, on part du modèle à N électrons sur le cercle de périmètre L, introduit au chapitre précédent, et on applique un champ électromagnétique classique, dépendant du temps, modélisant la lumière. On cherche à connaître la réponse linéaire du système à la perturbation lumineuse et on va voir au chapitre 3 que celle-ci est reliée à la conductivité. Comme cela est fait par exemple par Kubo [Ku57], on utilise donc la théorie de la réponse linéaire afin d'obtenir la conductivité, puis le spectre d'absorption optique à partir de cette conductivité.

La théorie de la réponse linéaire, largement utilisé dans la littérature physique, suppose que le champ perturbatif est faible et appliqué de façon quasi-adiabatique. Le terme "quasi-adiabatique" signifiant ici que l'amplitude du champ doit être augmentée dans le temps graduellement, de façon exponentielle, en partant de zéro au temps $t = -\infty$ (pas de perturbation), jusqu'à une valeur non nulle à $t = 0$ où l'on observe l'état du système. La perturbation est ainsi suffisamment "douce" pour permettre d'exprimer les caractéristiques du système à $t = 0$ en fonction des caractéristiques du système non perturbé. Ceci est une approche perturbative, ce qui implique que le résultat sera une approximation où l'on contrôlera le terme d'erreur. Ce terme d'erreur tendra vers zéro dans la limite de champ faible. Au premier ordre de la perturbation, on obtiendra ainsi la "réponse linéaire" du système à la perturbation.

Pour un système à grand nombre de particules, il est plus aisé d'exprimer ses états dans le formalisme de la seconde quantification. Le système est ainsi caractérisé par une matrice densité représentant la probabilité pour le système de se trouver dans un certain état. La connaissance

de cette matrice permet d'obtenir la valeur moyenne de n'importe quelle quantité physique décrivant le système [LL5, §5]. On va ici mettre en place tous les objets et outils du cadre de la physique statistique quantique nécessaires à la description des différents états excités du système nanoscopique.

Pour commencer, dans la section 2.1 on présente le modèle décrivant le nanotube avec lumière. Ensuite, dans la section 2.2 on montre l'existence et l'unicité de la matrice densité associée au modèle perturbé et enfin dans la section 2.3 on donne une expression perturbative de celle-ci, jusqu'à l'ordre 1 par rapport à l'amplitude du champ électromagnétique.

La difficulté de ce chapitre réside dans le fait que l'on veut résoudre une équation différentielle à condition initiale au temps $t = -\infty$ et avec une perturbation dépendante du temps non bornée.

2.1 Modèle perturbé

Pour modéliser la lumière monochromatique incidente, on introduit le champ électrique que l'on notera $F(t)$, d'amplitude $F_0 > 0$ composé d'une oscillation de fréquence $\omega > 0$ et d'un terme caractérisant l'allumage adiabatique, contrôlé avec le paramètre $\eta > 0$:

$$F(t) := F_0 \cos(\omega t) e^{\eta t},$$

avec la variable de temps $t \in (-\infty, 0]$, et on rappelle que l'espace est unidimensionnel. Etant donné que l'on est sur un cercle, il n'est pas possible de définir la perturbation due à la lumière comme on le fait habituellement dans la jauge de Coulomb, à partir du champ électrique, car le potentiel associé n'est pas périodique. On va donc utiliser une autre jauge. Soit la fonction

$$a(t) = \mathrm{Re}\left(\frac{e^{i\omega t + \eta t}}{i\omega + \eta}\right) = \frac{\eta \cos(\omega t) + \omega \sin(\omega t)}{\omega^2 + \eta^2} e^{\eta t}, \tag{2.1}$$

$$a'(t) = \mathrm{Re}(e^{i\omega t + \eta t}) = \cos(\omega t) e^{\eta t} \tag{2.2}$$

où le signe "prime" dénote ici la dérivée par rapport au temps. On a

$$F(t) = F_0 a'(t).$$

On a définit dans la section 1.2 l'espace des états quantiques à N électrons sur le cercle $\mathcal{S}_L$: $\mathcal{H}^N = L^2(\mathcal{S}_L^N)$. Dans la jauge de Weyl[1] (ou jauge Hamiltonienne ou encore jauge temporelle), le système à N électrons avec perturbation lumineuse est décrit par l'Hamiltonien $H(t)$ agissant dans $\mathcal{H}^N$:

$$H(t) \quad = \quad = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \left\{ \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} - a(t) F_0 \right)^2 + v_{\mathrm{at}}(x_j) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k = 1}^{N} v_L(x_j - x_k).$$

où on rappelle que $v_{\mathrm{at}} \in C^\infty(\mathcal{S}_L)$ est le potentiel périodique modélisant le réseau d'atomes et v_L est le potentiel modélisant l'interaction entre deux électrons définit en (1.4).

Soit les opérateurs définis sur l'espace de Sobolev suivants :

$$P_j := \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \qquad \text{avec} \quad D(P_j) = \mathcal{W}^1(\mathcal{S}_L) \qquad \text{et} \quad P := \sum_{j=1}^{N} P_j,$$

$$W(t) := -a(t) F_0 P + \frac{1}{2} N a^2(t) F_0^2. \tag{2.3}$$

[1] voir par exemple [FST, 2.1] pour une description de la transformation de jauge. Cette jauge est aussi appelée jauge Hamiltonienne ou encore jauge temporelle. On pourra aussi se référer au papier de Aharonov-Bohm [AB] où elle est introduite.

On a la relation

$$H(t) = H_0 + W(t),$$

où H_0 est notre système non perturbé défini en (1.5).

Proposition 2.1.1. *$\forall N \geq 1, t \in \mathbb{R}$ le domaine de $H(t)$ est indépendant de t et $H(t)$ est auto-adjoint sur le domaine $D(H_0)$. De plus, pour tout F_0 choisi dans un intervalle borné, il existe $c \in \mathbb{R}^*$ tel que l'on a les propriétés suivantes :*

$$\sup_{t\in(-\infty,0]} \|W(t)(H_0+ic)^{-1}\| \leq 1, \qquad \textit{et} \qquad \sup_{t\in(-\infty,0]} \|(H_0+ic)(H(t)+ic)^{-1}\| < 3.$$

Démonstration. On rappelle que l'on a vu à la proposition 1.2.7 que H_0 est auto-adjoint sur le domaine $\mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N)$. Comme le terme $a^2(t)F_0^2$ est borné uniformément en t, l'opérateur suivant

$$H(t) - H_0 = -a(t)F_0 \sum_{j=1}^{N} P_j + \frac{1}{2} N a^2(t) F_0^2$$

est bien définit sur $D(H_0)$ puisque $D(H_0) \subset D(P_j)$. Ensuite pour $u \in D(H_0)$, $\varepsilon > 0$

$$\begin{aligned}
\|\sum_{j=1}^{N} P_j u\|^2 = \left((\sum_{j=1}^{N} P_j)^2 u, u \right) &\leq \varepsilon \|(\sum_{j=1}^{N} P_j)^2 u\| \cdot \frac{1}{\varepsilon}\|u\| \\
&\leq \frac{1}{2}\varepsilon^2 \|(\sum_{j=1}^{N} P_j)^2 u\|^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2}\|u\|^2 \\
&\leq \frac{\varepsilon^2 N^2}{2} \|\sum_{j=1}^{N} P_j^2 u\|^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2}\|u\|^2 = \frac{\varepsilon^2 N^2}{2}\|\Delta u\|^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2}\|u\|^2
\end{aligned}$$

La perturbation est donc relativement bornée au Laplacien avec borne relative nulle pour N fixé. On introduit l'opérateur $V := H_0 - \frac{1}{2}\Delta$ qui est relativement borné à Δ d'après la preuve de la proposition 1.2.7. On conclut d'après l'annexe B.2 que pour $u \in D(H_0)$ il existe deux constantes $c_1(r, \lambda, N), c_2(r, \lambda, N) > 0$ telles que

$$\|Pu\| \leq \varepsilon c_1(r, N)\|H_0 u\| + \frac{c_2(r, N)}{\varepsilon}\|u\|$$

On rappelle que les paramètres $r > 0, \lambda > 0$ ont une valeur fixe dans ce chapitre, P est donc relativement borné à H_0 avec borne relative nulle, ceci implique, en utilisant le théoreme de Kato-Rellich, que $H(t)$ est auto-adjoint sur le domaine $D(H_0)$.

Par ailleurs, on peut écrire pour $c \neq 0$ et $u = (H_0 + ic)^{-1}\phi \in D(H_0)$

$$\begin{aligned}
\|P(H_0+ic)^{-1}\phi\| &\leq \varepsilon N\sqrt{2}\|H_0(H_0+ic)^{-1}\phi\| + f(\varepsilon)\|(H_0+ic)^{-1}\phi\| \\
&\leq \varepsilon N\sqrt{2}\|\phi\| + \frac{f(\varepsilon)}{|c|} \cdot \|\phi\|
\end{aligned}$$

car d'après le théorème spectral

$$\|H_0(H_0+ic)^{-1}\| = \sup_{\lambda\in\sigma(H_0)} \frac{\lambda}{\lambda + ic} = 1.$$

On a donc

$$\|W(t)(H_0+ic)^{-1}\phi\| \leq F_0 a(t)\varepsilon N\sqrt{2}\|\phi\| + \frac{2F_0 a(t) f(\varepsilon) + F_0^2 a^2(t) N}{2|c|} \cdot \|\phi\|$$

On rappelle qu'il existe une constante $c_1 > 0$ telle que $a(t) \leq c_1$ pour tout $t \in (-\infty, 0]$ et que F_0 est choisit dans un intervalle borné. Pour N fixé, soit $\xi > 0$ tel que $F_0 a(t)\varepsilon N\sqrt{2} = \xi/2$, il existe c tel que

$$\frac{2F_0 a(t) f(\varepsilon) + F_0^2 a^2(t) N}{2|c|} \leq \frac{\xi}{2}.$$

Alors on a

$$\|W(t)(H_0 + ic)^{-1}\phi\| \leq \xi \cdot \|\phi\|.$$

On peut choisir c pour que $\xi = 1/2$. Sous cette condition, on peut écrire avec l'équation de la résolvente

$$(H(t) + ic)^{-1} = (H_0 + ic)^{-1} + (H_0 + ic)^{-1}\left(1 - W(t)(H_0 + ic)^{-1}\right)^{-1}$$

et

$$\|(H_0 + ic)(H(t) + ic)^{-1}\| \leq 1 + \left(1 - \|W(t)(H_0 + ic)^{-1}\|\right)^{-1} \leq 3.$$

□

2.2 Equation de Liouville

On veut savoir l'évolution temporelle de notre système à N électrons soumis à la perturbation due au champ électromagnétique défini précédemment. Pour cela on a besoin d'introduire certaines notions et quantités dérivées du formalisme de la physique statistique. A chaque système quantique composé d'un grand nombre de particules, on associe un opérateur à trace noté ρ et appelé *matrice densité*. Au temps $t = -\infty$ notre système est non perturbé et à l'équilibre. Sa matrice densité ρ_{eq}, opérateur agissant sur $\mathcal{H}^N$, est donnée par la distribution de Gibbs [LL5, §35] :

$$\rho_{eq} := \frac{1}{\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}^N}(e^{-\beta H_0})} e^{-\beta H_0} \tag{2.4}$$

où $\beta = \frac{1}{KT} > 0$, K est la constante de Boltzmann, T est la température du système et $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}^N}$ est la trace prise sur $\mathcal{H}^N$. On verra au lemme 2.2.8 que ρ_{eq} est un opérateur à trace. On veut maintenant connaître l'expression de la matrice densité $\rho(t)$ associée à $H(t)$ pour un temps t quelconque. Cette matrice dépendante du temps est la solution de l'équation de Liouville [LL5, §6] suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho \quad = \quad i[\rho, H], \quad \text{avec condition initiale} \quad \rho(-\infty) = \rho_{eq}. \tag{2.5}$$

L'équation ci-dessus doit être comprise au sens fort sur $D(H_0)$ mais on va voir plus tard dans cette section que la relation est vraie sur $\mathcal{H}^N$. On établit dans ce qui suit l'existence et l'unicité de la solution de (2.5) dans la norme trace. Enfin dans la dernière sous-section on donne un développement de $\rho(t)$ à l'ordre 2 en puissances de F_0.

Soit

$$\rho(t, s) := U(t, s)\rho_{eq}U^*(t, s) \tag{2.6}$$

où $U(t, s)$ est le propagateur[2] associé à l'équation de Schrödinger dépendante du temps suivante : pour $\psi_0 \in D(H_0)$ et $s, t \in \mathbb{R}$

$$\frac{1}{i}\frac{\partial U}{\partial t}(t, s)\psi_0 + H(t)U(t, s)\psi_0 = 0, \qquad U(s, s) = \mathrm{Id}. \tag{2.7}$$

[2]Voir définition dans [RS2, X.12]

On introduit la notation

$$\dot{A}(s,t) := \frac{\partial A}{\partial t}(t,s).$$

Au moins formellement on a :

$$\begin{aligned}\dot{\rho}(t,s) &= \dot{U}(t,s)\rho_{eq}U^*(t,s) + U(t,s)\rho_{eq}\dot{U}^*(t,s)\\ &= -iH(t)\rho(t,s) + i\rho(t,s)H(t)\\ &= i[\rho(t,s), H(t)]\end{aligned}$$

donc $\rho(t,s)$ défini en (2.6) est un candidat pour être solution de l'équation de Liouville. Mais la condition initiale à moins l'infini n'est pas vérifiée. On introduit l'opérateur unitaire suivant, fortement continu sur $D(H_0)$

$$\Omega(t,s) := e^{iH_0(t-s)}U(t,s),$$

et on montre que

$$\rho(t) := e^{-iH_0t}\Omega(t,0)\lim_{s\to-\infty}\Omega^*(s,0)\rho_{eq}\lim_{s\to-\infty}\Omega(s,0)\Omega^*(t,0)e^{iH_0t} \tag{2.8}$$

est solution de (2.5) et que cette solution est unique.

Proposition 2.2.1. *$\forall\psi_0 \in D(H_0)$, $\forall t_0, t \in \mathbb{R}$, l'équation suivante possède une solution unique $\psi \in D(H_0)$,*

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H(t)\psi(t) \\ \psi(t_0) = \psi_0 \end{cases}. \tag{2.9}$$

Ceci définit un propagateur $U : \mathbb{R}\times\mathbb{R} \to \mathcal{B}(\mathcal{H}^N)$ tel que $\psi(t) = U(t,t_0)\psi_0$. Il est unitaire, fortement continu. De plus il est fortement différentiable par rapport à la première variable sur $D(H_0)$. Il préserve $D(H_0)$ et obéit sur $D(H_0)$ à la relation suivante :

$$U(t,s) = \mathrm{Id} - i\int_s^t H(\sigma)U(\sigma,s)d\sigma.$$

Démonstration. Ces propriétés sont obtenues à l'aide du théoreme X.70 de [RS2, X.12]. On va vérifier les hypothèses de ce théorème. On sait déjà par la proposition 2.1.1 que $D(H(t)) = D(H_0)$ pour tout $t \in \mathbb{R}$. On définit

$$\begin{aligned} C : \mathbb{R}\times\mathbb{R} &\to \mathcal{B}(\mathcal{H}^N)\\ (t,s) &\mapsto C(t,s) = \frac{H(t)-H(s)}{t-s}(H(s)+i)^{-1}\end{aligned}$$

que l'on peut écrire de la manière suivante :

$$C(t,s) = -F_0\frac{a(t)-a(s)}{t-s}P(H(s)+i)^{-1} + \frac{1}{2}NF_0^2\frac{a^2(t)-a^2(s)}{t-s}(H(s)+i)^{-1}.$$

On veut montrer que C est continue dans ses deux variables en tant qu'opérateur borné. L'opérateur $P(H(s)+i)^{-1}$ est borné, et pour n'importe quel point s_0, la première équation de la résolvente donne :

$$\|P(H(s)+i)^{-1}\| \le \|P(H(s_0)+i)^{-1}\| + |s-s_0|\|P(H(s_0)+i)^{-1}\|\|(H(s)+i)^{-1}\|. \tag{2.10}$$

On a aussi que

$$\begin{aligned}
\|P(H(s)+i)^{-1} - P(H(t)+i)^{-1}\| &= \|P(H(s)+i)^{-1}(H(t)-H(s))(H(t)+i)^{-1}\| \\
&= \|P(H(s)+i)^{-1}F_0\left(a(t)-a(s)\right)P(H(t)+i)^{-1} \\
&\quad +P(H(s)+i)^{-1}N\frac{F_0^2}{2}\left(a^2(t)-a^2(s)\right)(H(t)+i)^{-1}\| \\
&\leq \|P(H(s)+i)^{-1}\|F_0|a(t)-a(s)|\ \|P(H(t)+i)^{-1}\| \\
&\quad +\|P(H(s)+i)^{-1}\|\ N\frac{F_0^2}{2}|a^2(t)-a^2(s)|\ \|(H(t)+i)^{-1}\|.
\end{aligned}$$

Maintenant, avec la première estimation 2.10 et puisque a est une fonction continue et périodique, il existe $\varepsilon > 0$ et $\eta(\varepsilon) > 0$ tel que pour $|t-s| < \eta(\varepsilon)$ on a $\|P(H(s)+i)^{-1} - P(H(t)+i)^{-1}\| \leq \varepsilon$. Pour $s \neq t \in \mathbb{R}$, $\frac{a(t)-a(s)}{t-s}$ est continue par rapport s and t. Soit $t_0 \in [s,t]$, avec le théorème des accroissements finis et comme a est analytique on peut écrire

$$a(t) - a(s) = (t-s)a'(\alpha(s,t)),$$

avec $\alpha(t,s) \in]s,t[$ et

$$a'(\alpha(t,s)) - a'(t_0) = (\alpha(t,s)-t_0)(a''(t_0) + \varepsilon(\alpha(t,s)-t_0))$$

avec $\lim_{t\to t_0} \varepsilon(t-t_0) = 0$. Donc pour tout s et t,

$$|\frac{a(t)-a(s)}{t-s} - a'(t_0)| \leq |\alpha(t,s)-t_0| \cdot |a''(t_0) + \varepsilon(\alpha(t,s)-t_0)|$$

et l'on a

$$|\alpha(t,s)-t_0| \leq \max\{|t-t_0|, |s-t_0|\} \leq |t-t_0| + |s-t_0| = \|(t,s)-(t_0,t_0)\|_1$$

donc

$$|\frac{a(t)-a(s)}{t-s} - a'(t_0)| \leq const \cdot \|(t,s)-(t_0,t_0)\|_1$$

qui montre la continuité dans les deux variables de la fonction $\frac{a(t)-a(s)}{t-s}$ en t_0. On conclut que C est continu sur $\mathbb{R}\times\mathbb{R}$ et l'on peut appliquer le théorème X.70. □

On introduit maintenant l'opérateur défini sur le domaine $D(P) = D(H_0^{\frac{1}{2}})$ et avec $s,t \in \mathbb{R}$:

$$\widetilde{W}(t,s) := e^{iH_0(t-s)}W(t)e^{-iH_0(t-s)} = -a(t)F_0e^{iH_0(t-s)}Pe^{-iH_0(t-s)} + \frac{1}{2}F_0^2a^2(t)N.$$

Lemme 2.2.2. *Pour tout $s \in \mathbb{R}$, la fonction $t \mapsto \Omega(t,s)$ est fortement différentiable sur $D(H_0)$ et sa dérivée est :*

$$\dot{\Omega}(t,s) = -i\widetilde{W}(t,s)\Omega(t,s).$$

Cet opérateur est solution de l'équation intégrale suivante :

$$\Omega(t,s) = 1 - i\int_s^t \widetilde{W}(\sigma,s)\Omega(\sigma,s)d\sigma \qquad \text{sur } D(H_0). \tag{2.11}$$

Démonstration. Par définition, $\Omega(t,s) = e^{iH_0(t-s)}U(t,s)$ où les deux facteurs sont unitaires et fortement différentiables par rapport à t sur $D(H_0)$ (proposition 2.2.1 et théorème de Stone). On peut écrire pour $\psi \in D(H_0)$ et $h \neq 0$

$$\begin{aligned}\frac{\Omega(t+h,s)-\Omega(t,s)}{h}\psi =& \frac{e^{iH_0(t+h-s)}U(t+h,s)-e^{iH_0(t-s)}U(t,s)}{h}\psi \\ =& e^{iH_0(t+h-s)}\frac{U(t+h,s)-U(t,s)}{h}\psi + \frac{e^{iH_0(t+h-s)}-e^{iH_0(t-s)}}{h}U(t,s)\psi.\end{aligned}$$

D'après la proposition 2.2.1 on a que $U(t,s)$ préserve $D(H_0)$, ceci permet de différencier le terme exponentiel au sens fort sur $D(H_0)$. Et quand on prend la limite h tend vers zéro, pour tout $\psi \in D(H_0)$,

$$\begin{aligned}\dot{\Omega}(t,s) = \lim_{h\to 0}\frac{\Omega(t+h,s)-\Omega(t,s)}{h}\psi =& e^{iH_0(t-s)}\dot{U}(t,s)\psi + ie^{iH_0(t-s)}H_0U(t,s)\psi \\ =& -ie^{iH_0(t-s)}W(t)e^{-iH_0(t-s)}e^{iH_0(t-s)}U(t,s)\psi \\ =& -i\widetilde{W}(t,s)\Omega(t,s).\end{aligned}$$

et l'on peut écrire

$$\begin{aligned}\Omega(t,s) =& \Omega(s,s) - i\int_s^t \widetilde{W}(\sigma,s)\Omega(\sigma,s)d\sigma \\ =& \mathrm{Id} - i\int_s^t \widetilde{W}(\sigma,s)\Omega(\sigma,s)d\sigma.\end{aligned}$$

□

Le lemme suivant sera utile pour étudier la limite $\Omega(\cdot,s)$ en $-\infty$.

Lemme 2.2.3. *Il existe $c \in \mathbb{R}^*$ tel que*

$$\sup_{t,s\in(-\infty,0]} \|(H(t)+ic)U(t,s)(H(t)+ic)^{-1}\| < \infty.$$

Démonstration. On définit pour $\psi \in \mathcal{H}^N$, $\phi \in D(H_0)$ et tout $s,t \in (-\infty,0]$

$$f_s(t) := \langle \phi, F_s(t)\psi\rangle, \qquad F_s(t) := U^*(t,s)(H(t)+ic)U(t,s)(H(t)+ic)^{-1}.$$

Pour s et t fixés, F_s est un opérateur borné d'après le théorème du graphe fermé[3] puisque U est unitaire, préserve $D(H_0)$ et $H(t)$ est fermé sur $D(H_0)$. On veut montrer que la borne est uniforme en s et t. On calcule la dérivée de F_s. On a pour $h > 0$,

$$\begin{aligned}&\frac{f_s(t_0+h)-f_s(t_0)}{h} = \\ &= \frac{1}{h}\left(\langle U(t_0+h,s)\phi, (H(t_0+h)+ic)U(t_0+h,s)(H(t_0+h)+ic)^{-1}\psi\rangle - f_s(t_0)\right) \\ &= \frac{1}{h}\langle (U(t_0+h,s)-U(t_0,s))\phi, (H(t_0+h)+ic)U(t_0+h,s)(H(t_0+h)+ic)^{-1}\psi\rangle \\ &+ \frac{1}{h}\langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0+h)-H(t_0))U(t_0+h,s)(H(t_0+h)+ic)^{-1}\psi\rangle \\ &+ \frac{1}{h}\langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0)+ic)(U(t_0+h,s)-U(t_0,s))(H(t_0+h)+ic)^{-1}\psi\rangle \\ &+ \frac{1}{h}\langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0)+ic)U(t_0,s)\left((H(t_0+h)+ic)^{-1}-(H(t_0)+ic)^{-1}\right)\psi\rangle\end{aligned}$$

[3] Voir par exemple [K] Th. 5.20.

et si l'on prend la limite $h \to 0$,

$$\begin{aligned}
&\lim_{h\to 0} \frac{f_s(t_0+h)-f_s(t_0)}{h} = \\
&= \langle(-iH(t_0)U(t_0,s))\phi, (H(t_0)+ic)U(t_0,s)(H(t_0)+ic)^{-1}\psi\rangle \\
&- F_0 a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, PU(t_0,s)(H(t_0)+ic)^{-1}\psi\rangle \\
&+ F_0^2 a(t_0)a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, U(t_0,s)(H(t_0)+ic)^{-1}\psi\rangle \\
&+ \langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0)+ic)(-iH(t_0)U(t_0,s))(H(t_0)+ic)^{-1}\psi\rangle \\
&- F_0 a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0)+ic)U(t_0,s)\left((H(t_0)+ic)^{-1}P(H(t_0)+ic)^{-1}\right)\psi\rangle \\
&+ F_0^2 a(t_0)a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0)+ic)U(t_0,s)\left((H(t_0)+ic)^{-1}(H(t_0)+ic)^{-1}\right)\psi\rangle.
\end{aligned}$$

Le premier et quatrième termes montrent pourquoi l'on avait besoin de prendre $\phi \in D(H_0)$ mais comme ces deux termes se compensent :

$$\begin{aligned}
f_s'(t_0) = &- F_0 a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, PU(t_0,s)(H(t_0)+ic)^{-1}\psi\rangle \\
&+ F_0^2 a(t_0)a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, U(t_0,s)(H(t_0)+ic)^{-1}\psi\rangle \\
&- F_0 a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0)+ic)U(t_0,s)\left((H(t_0)+ic)^{-1}P(H(t_0)+ic)^{-1}\right)\psi\rangle \\
&+ F_0^2 a(t_0)a'(t_0)\langle U(t_0,s)\phi, (H(t_0)+ic)U(t_0,s)\left((H(t_0)+ic)^{-1}(H(t_0)+ic)^{-1}\right)\psi\rangle \\
=:&\langle\phi, F_s'(t)\psi\rangle.
\end{aligned}$$

On obtient donc que l'opérateur F_s est dérivable au sens faible sur le domaine de H_0, et comme l'expression de F_s' ci-dessus est bornée sur $\mathcal{H}^N$ et que le calcul a été fait pour tout $\psi \in \mathcal{H}^N$ et tout ϕ dans un sous espace dense de $\mathcal{H}^N$, F_s est donc dérivable en norme par rapport a t avec dérivée pour tout $\tau \in \mathbb{R}_-$:

$$\begin{aligned}
F_s'(\tau) = &- F_0 a'(\tau)U^*(\tau,s)PU(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1} - \\
&- F_0 a'(\tau)U^*(\tau,s)(H(t)+ic)U(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1}P(H(\tau)+ic)^{-1} + \\
&+ F_0^2 a(\tau)a'(\tau)(H(\tau)+ic)^{-1} + \\
&+ F_0^2 a(\tau)a'(\tau)U^*(\tau,s)(H(t)+ic)U(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-2}
\end{aligned}$$

On écrit alors :

$$\begin{aligned}
F_s(t) =& F_s(s) + \int_s^t F_s'(\tau)d\tau = \mathrm{Id} + \int_s^t F_s'(\tau)d\tau \\
=& \mathrm{Id} - F_0 \int_s^t a'(\tau)U^*(\tau,s)PU(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1}d\tau \\
&- F_0 \int_s^t a'(\tau)U^*(\tau,s)(H(t)+ic)U(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1}P(H(\tau)+ic)^{-1}d\tau \\
&+ F_0^2 \int_s^t a(\tau)a'(\tau)(H(\tau)+ic)^{-1}d\tau \\
&+ F_0^2 \int_s^t a(\tau)a'(\tau)U^*(\tau,s)(H(t)+ic)U(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-2}d\tau
\end{aligned}$$

et

$$
\begin{aligned}
&F_s(t) = \\
&= \mathrm{Id} - F_0 \int_s^t a'(\tau) U^*(\tau,s) P(H(\tau)+ic)^{-1} U(\tau,s) U^*(\tau,s)(H(\tau)+ic) U(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1} d\tau \\
&- F_0 \int_s^t a'(\tau) F_s(\tau) P(H(\tau)+ic)^{-1} d\tau \\
&+ F_0^2 \int_s^t a(\tau)a'(\tau) U^*(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1} U(\tau,s) U^*(\tau,s)(H(\tau)+ic) U(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1} d\tau \\
&+ F_0^2 \int_s^t a(\tau)a'(\tau) F_s(\tau)(H(\tau)+ic)^{-1} d\tau
\end{aligned}
$$

donc

$$
\begin{aligned}
F_s(t) =& \mathrm{Id} - F_0 \int_s^t a'(\tau) \left(U^*(\tau,s) P(H(\tau)+ic)^{-1} U(\tau,s) F_s(\tau) + F_s(\tau) P(H(\tau)+ic)^{-1} \right) d\tau \\
&+ F_0^2 \int_s^t a(\tau)a'(\tau) \left(U^*(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1} U(\tau,s) F_s(\tau) + F_s(\tau)(H(\tau)+ic)^{-1} \right) d\tau.
\end{aligned} \tag{2.12}
$$

On obtient en utilisant la proposition 2.1.1 que pour tout $t, s \in (-\infty, 0]$ il existe un $c \in \mathbb{R}^*$ tel que

$$
\sup_{\tau \in (-\infty,0]} \|P(H(\tau)+ic)^{-1}\| = \sup_{\tau \in (-\infty,0]} \|P(H_0+i)^{-1}(H_0+i)(H(\tau)+ic)^{-1}\| < \infty
$$

et comme $U(\tau, s)$ est unitaire, on a

$$
\|F_s(t)\| \leq 1 + const \cdot \int_s^t 2 \left(F_0 |a'(\tau)| + F_0^2 |a(\tau)a'(\tau)| \right) \|F_s(\tau)\| d\tau
$$

En utilisant le lemme de Grönwall [Gr],

$$
\|F_s(t)\| \leq \exp \left(2const \cdot \int_s^t \left(F_0 |a'(\tau)| + F_0^2 |a(\tau)a'(\tau)| \right) d\tau \right).
$$

On rappelle que $a'(t) = \cos(\omega t) e^{\eta t}$ et donc le membre de droite est borné et de plus il est borné uniformément par rapport à t et $s \in (-\infty, 0]$. □

Lemme 2.2.4. *Pour $s \in (-\infty, 0]$ fixé, on a*

$$
\begin{aligned}
\lim_{t_0 \to -\infty} \Omega(t_0, s)(H_0+i)^{-1} &= \Omega^+(s)(H_0+i)^{-1} \\
\lim_{t_0 \to -\infty} \Omega^*(t_0, s)(H_0+i)^{-1} &= \Omega^{*+}(s)(H_0+i)^{-1},
\end{aligned}
$$

et $\Omega^{*+}(s) = \Omega^{+*}(s)$.

Remarque 2.2.5. Le résultat du lemme entraîne aussi la propriété suivante :

$$
\begin{aligned}
\operatorname*{s-lim}_{t_0 \to -\infty} \Omega(t_0, s) &=: \Omega^+(s) \\
\operatorname*{s-lim}_{t_0 \to -\infty} \Omega^*(t_0, s) &=: \Omega^{*+}(s) = \Omega^{+*}(s),
\end{aligned}
$$

car la convergence en norme implique la convergence forte, et $\Omega(\cdot, s), \Omega^*(\cdot, s)$ sont unitaires et convergent fortement sur un domaine dense de $\mathcal{H}^N$.

Démonstration. D'après le lemme 2.2.2 et pour $s, t \in \mathbb{R}_-$, on écrit Ω comme

$$\Omega(t,s) = \mathrm{Id} - i\int_s^t \widetilde{W}(\tau,s)\Omega(\tau,s)d\tau \quad \text{sur} \quad D(H_0)$$

et pour $\psi \in D(H_0)$ et $c \in \mathbb{R}^*$

$$\begin{aligned}
\|(\Omega(t_2,s)-\Omega(t_1,s))\psi\| =& \|\int_{t_1}^{t_2} \widetilde{W}(\tau,s)\Omega(\tau,s)d\tau\psi\| \\
\leq& \|F_0\int_{t_1}^{t_2} e^{iH_0(\tau-s)}a(\tau)PU(\tau,s)d\tau\psi\| \\
&+ \|\frac{1}{2}NF_0^2\int_{t_1}^{t_2} a^2(\tau)e^{iH_0(\tau-s)}U(\tau,s)d\tau\psi\| \\
\leq& \|\int_{t_1}^{t_2} e^{iH_0(\tau-s)}a(\tau)P(H(\tau)+ic)^{-1}(H(\tau)+ic)U(\tau,s) \\
&(H(\tau)+ic)^{-1}(H(\tau)+ic)(H_0+i)^{-1}(H_0+i)\psi d\tau\| \\
&+ const\cdot|\int_{t_1}^{t_2} a^2(\tau)d\tau|\cdot\|\psi\|, \qquad (2.13)
\end{aligned}$$

et avec les lemmes 2.1.1 et 2.2.3 on peut trouver c tel que

$$\sup_{\tau\in(-\infty,0]} \|P(H(\tau)+ic)^{-1}\|\cdot\|(H(\tau)+ic)U(\tau,s)(H(\tau)+ic)^{-1}\|\cdot\|(H(\tau)+ic)(H_0+i)^{-1}\| < c_1$$

avec $c_1 > 0$, et par conséquent

$$\|(\Omega(t_2,s)-\Omega(t_1,s))\psi\| \leq c_1\int_{t_1}^{t_2}|a(\tau)||d\tau|\cdot\|(H_0+i)\psi\| + const\cdot|\int_{t_1}^{t_2} a^2(\tau)d\tau|\cdot\|\psi\|, \quad (2.14)$$

et puisque les fonctions a et a^2 sont intégrables sur $\mathbb{R}_-$,

$$\|(\Omega(t_2,s)-\Omega(t_1,s))\psi\| \xrightarrow{t_1,t_2\to-\infty} 0.$$

La famille d'operateurs $\{\Omega(t,s)\}_t$ est unitaire, donc la suite de vecteurs $\{\Omega(t,s)\phi\}_t$ avec $\phi \in \mathcal{H}^N$ est de Cauchy et $\Omega(.,s)$ converge fortement sur $\mathcal{H}^N$. On dénote cette limite par $\Omega^+(s)$. C'est un opérateur borné d'après le principe de la borne uniforme.

On obtient aussi, si on introduit $\psi =: (H_0+i)^{-1}\varphi$, avec $\varphi \in \mathcal{H}^N$, dans la relation (2.14) :

$$\begin{aligned}
\|(\Omega(t_2,s)-\Omega(t_1,s))(H_0+i)^{-1}\varphi\| \leq c_1\int_{t_1}^{t_2}|a(\tau)||d\tau|\cdot\|\varphi\| + \\
+ const\cdot|\int_{t_1}^{t_2} a^2(\tau)d\tau|\cdot\|(H_0+i)^{-1}\|\cdot\|\varphi\|,
\end{aligned}$$

et donc on a aussi que $\left\{\Omega(t,s)(H_0+i)^{-1}\right\}_t$ est de Cauchy et tend en norme vers un opérateur borné. Alors nécessairement cet opérateur est égal à $\Omega^+(s)(H_0+i)^{-1}$. Maintenant, pour l'adjoint, on utilise sur $D(H_0)$

$$\begin{aligned}
\Omega^*(t,s) &= \mathrm{Id} + i\int_s^t \Omega^*(\tau,s)\widetilde{W}(\tau,s)d\tau \\
&= \mathrm{Id} - iF_0\int_s^t U^*(\tau,s)a(\tau)P(H_0+i)^{-1}(H_0+i)e^{-iH_0(\tau-s)}d\tau \\
&+ \frac{1}{2}NF_0^2 i\int_s^t U^*(\tau,s)e^{-iH_0(\tau-s)}a^2(\tau)d\tau
\end{aligned}$$

donc pour $\psi \in D(H_0)$

$$\|(\Omega^*(t_2,s)-\Omega^*(t_1,s))\psi\| \leq F_0 \int_{t_1}^{t_2} |a(\tau)|\|P(H_0+i)^{-1}\|\|(H_0+i)e^{-iH_0(\tau-s)}\psi\|d\tau$$
$$+ N\frac{F_0^2}{2}\int_{t_1}^{t_2} |a^2(\tau)|d\tau\|\psi\|.$$

Cela montre que $\Omega^*(.,s)\psi$ est de Cauchy en $-\infty$. En procédant de la même manière que pour $\Omega(.,s)$, on conclut sur la convergence $\Omega(t,s)^*(H_0+i)^{-1}$.

On écrit maintenant, comme $\Omega^{*+}(s), \Omega^+(s)$ sont bornés et $\Omega^*(t,s), \Omega(t,s)$ sont unitaires,

$$\Omega^{*+}(s)\Omega^+(s) = \underset{t\to-\infty}{\text{s-lim}}\, \Omega^*(t,s) \underset{t\to-\infty}{\text{s-lim}}\, \Omega(t,s) = \underset{t\to-\infty}{\text{s-lim}}\, \Omega^*(t,s)\Omega(t,s) = 1,$$

qui montre que $\Omega^{*+}(s) = \Omega^{+*}(s)$ sur $\mathcal{H}^N$. □

Corollaire 2.2.6. *Pour tout $s \in (-\infty, 0]$, les quantités*

$$\|H_0\Omega^+(s)(H_0+i)^{-1}\|, \qquad \|H_0\Omega^{*+}(s)(H_0+i)^{-1}\|$$

sont bornées uniformément en s.

Démonstration. Ceci vient directement des proposition et lemmes 2.1.1, 2.2.3 et 2.2.4. Soit $\phi \in D(H_0)$, $\psi \in \mathcal{H}^N$, il existe $c \in \mathbb{R}_-$ tel que

$$|(H_0\phi, \Omega^+(s)(H_0+i)^{-1}\psi)| = |(H_0\phi, \lim_{t\to-\infty} e^{iH_0(t-s)}U(t,s)(H_0+i)^{-1}\psi)|$$
$$= \lim_{t\to-\infty} |(H_0\phi, e^{iH_0(t-s)}U(t,s)(H_0+i)^{-1}\psi)|$$
$$= \lim_{t\to-\infty} |(H_0e^{-iH_0(t-s)}\phi, (H(t)+ic)^{-1}(H(t)+ic)U(t,s)(H(t)+ic)^{-1}(H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}\psi)|$$
$$\leq \lim_{t\to-\infty} \|\phi\|\|H_0(H(t)+ic)^{-1}\|\|(H(t)+ic)U(t,s)(H(t)+ic)^{-1}\|\times$$
$$\times \|(H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}\|\|\psi\| \leq const\|\phi\|\|\psi\|.$$

Par densité, ce résultat est valide dans $\mathcal{H}^N$. Pour la deuxième estimation, on rappelle que le propagateur U a la propriété suivante : $U^*(t,s) = U(s,t)$. Soit $\phi \in D(H_0)$, $\psi \in \mathcal{H}^N$, il existe $c \in \mathbb{R}_-$ tel que

$$|(H_0\phi, \Omega^{*+}(s)(H_0+i)^{-1}\psi)| = |(H_0\phi, \lim_{t\to-\infty} U^*(t,s)e^{-iH_0(t-s)}(H_0+i)^{-1}\psi)|$$
$$= \lim_{t\to-\infty} |(H_0\phi, U(s,t)(H_0+i)^{-1}e^{-iH_0(t-s)}\psi)|$$
$$= \lim_{t\to-\infty} |(H_0\phi, (H(s)+ic)^{-1}(H(s)+ic)U(s,t)(H(s)+ic)^{-1}(H(s)+ic)(H_0+i)^{-1}e^{-iH_0(t-s)}\psi)|$$
$$\leq \lim_{t\to-\infty} \|\phi\|\|H_0(H(s)+ic)^{-1}\|\|(H(s)+ic)U(s,t)(H(s)+ic)^{-1}\|\times$$
$$\times \|(H(s)+ic)(H_0+i)^{-1}\|\|\psi\| \leq const\|\phi\|\|\psi\|.$$

Par densité, ce résultat est valide dans $\mathcal{H}^N$.

□

On va maintenant montrer l'existence et l'unicité de la solution de l'équation de Liouville. On rappelle la définition donnée en (2.8) :

$$\rho(t) := e^{-iH_0t}\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^+(0)\Omega^*(t,0)e^{iH_0t}. \tag{2.15}$$

On peut écrire cela comme

$$\begin{aligned}\rho(t) =& e^{-iH_0t}(H_0+i)^{-1}(H_0+i)\Omega(t,0)(H_0+i)^{-1}(H_0+i)\Omega^{+*}(0)(H_0+i)^{-1}\times \\ &\times (H_0+i)\rho_{eq}(H_0+i)(H_0+i)^{-1}\Omega^{+}(0)(H_0+i)(H_0+i)^{-1}\Omega^{*}(t,0)e^{-iH_0t} \end{aligned} \tag{2.16}$$

et cela montre que cet opérateur est bien défini et est à trace puisque $(H_0+i)\rho_{eq}(H_0+i)$ est à trace d'après le lemme 2.2.8 et les autres facteurs sont bornés.

Théorème 2.2.7. *Pour tout $N > 1$ et $t \in (-\infty, 0]$, la famille d'opérateurs à trace :*

$$\rho(t) = e^{-iH_0t}\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)e^{iH_0t},$$

est différentiable au sens de la norme trace et est l'unique solution de l'équation de Liouville sur $\mathcal{H}^N$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho \quad = \quad i[\rho, H], \tag{2.17}$$

avec condition initiale en $t = -\infty$: $\rho(-\infty) = \rho_{eq}$.

On désigne par $\|\cdot\|_1$ la norme trace. Pour la preuve on a besoin du lemme préliminaire suivant :

Lemme 2.2.8. *Pour tout $\beta > 0$ et $n > 0$ On a*
i) $e^{-\beta H_0}$ est un opérateur à trace.
ii) $\|H_0^n e^{-\beta H_0}\|_1 < \infty$.

Démonstration. D'après le lemme 1.2.7, H_0 est auto-adjoint, borné inférieurement et possède seulement des valeurs propres, qui s'accumulent à l'infini. Aussi, en utilisant la propriété sur les valeurs propres *iii*) du lemme 1.2.7 et le théorème spectral :

$$\|e^{-\beta H_0}\|_1 = \sum_{\lambda\in\sigma(H_0)} e^{-\beta\lambda} < \infty$$

Pour *ii*), le théorème spectral donne

$$\|H_0^n e^{-\beta H_0}\|_1 = \sum_{\lambda\in\sigma(H_0)} |\lambda|^n e^{-\beta\lambda}$$

qui est aussi fini puisque $\beta > 0$ et $n > 0$. □

Preuve du théorème 2.2.7. Pour tout $t \in (-\infty, 0]$, on va montrer que $\rho(t)$ respecte les conditions initiales :

$$\begin{aligned}\|\rho(t)-\rho_{eq}\|_1 =& \|e^{-iH_0t}\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)e^{iH_0t}-\rho_{eq}\|_1 \\ =&\|e^{-iH_0t}(\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)-\rho_{eq})e^{iH_0t}\|_1 \\ =&\|\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)-\rho_{eq}\|_1 \\ \leq&\|\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}(\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)-\mathrm{Id})\|_1+\|(\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)-\mathrm{Id})\rho_{eq}\|_1 \\ \leq&\|\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}(H_0+i)(H_0+i)^{-1}(\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)-\mathrm{Id})\|_1+ \\ &+\|(\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)-\mathrm{Id})(H_0+i)^{-1}(H_0+i)\rho_{eq}\|_1 \\ \leq&\|\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}(H_0+i)\|_1\|(H_0+i)^{-1}(\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)-\mathrm{Id})\|+ \\ &+\|(\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)-\mathrm{Id})(H_0+i)^{-1}\|\|(H_0+i)\rho_{eq}\|_1.\end{aligned}$$

Premièrement on a d'après le lemme 2.2.8 que $\|(H_0+i)\rho_{eq}\|_1$ est borné, et deuxièmement, en utilisant le corollaire 2.2.6, avec le lemme 2.2.4 on déduit que

$$\|\rho(t)-\rho_{eq}\|_1 \xrightarrow{t\to-\infty} 0.$$

On va vérifier maintenant que cette expression est solution de l'équation différentielle. On note que $H(t)\rho(t)$ est borné, ceci peut être prouvé en utilisant (2.16). On a pour chaque $t \in (-\infty,0]$ et $h>0$ et pour $\psi \in D(H_0)$

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\rho(t+h)-\rho(t)}{h} - i[\rho(t),H(t)]\right)\psi \\
=&\frac{e^{-iH_0(t+h)}-e^{-iH_0t}}{h}\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)e^{iH_0(t)}\psi \\
&+e^{-iH_0(t+h)}\frac{\Omega(t+h,0)-\Omega(t,0)}{h}\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)e^{iH_0t}\psi + iH(t)\rho(t)\psi \\
&+e^{-iH_0(t+h)}\Omega(t+h,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\frac{\Omega^{*}(t+h,0)-\Omega^{*}(t,0)}{h}e^{iH_0t}\psi \\
&+e^{-iH_0(t+h)}\Omega(t+h,0)\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t+h,0)\frac{e^{iH_0(t+h)}-e^{iH_0(t)}}{h}\psi - i\rho(t)H(t)\psi \\
=:&a_1\psi + a_2\psi
\end{aligned}$$

On considère le premier terme, a_1 :

$$\begin{aligned}
a_1 :=& \left(\frac{e^{-iH_0(t+h)}-e^{-iH_0t}}{h}\Omega(t,0) + e^{-iH_0(t+h)}\frac{\Omega(t+h,0)-\Omega(t,0)}{h} + iH(t)e^{-iH_0(t)}\Omega(t,0)\right)\times \\
&\times \Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)e^{iH_0t}
\end{aligned}$$

On note premièrement que l'opérateur

$$(H_0+i)^2\rho_{eq}\Omega^{+}(0)\Omega^{*}(t,0)e^{iH_0t} \tag{2.18}$$

appartient à la classe trace puisque $(H_0+i)^2\rho_{eq}$ est à trace d'après le lemme 2.2.8 et les autres opérateurs sont bornés. Deuxièmement l'opérateur

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{e^{-iH_0(t+h)}-e^{-iH_0t}}{h}\Omega(t,0) + e^{-iH_0(t+h)}\frac{\Omega(t+h,0)-\Omega(t,0)}{h} + iH(t)e^{-iH_0(t)}\Omega(t,0)\right)\times \\
&\times \Omega^{+*}(0)(H_0+i)^{-1}(H_0+i)^{-1}
\end{aligned} \tag{2.19}$$

est borné puisque on sait d'après la proposition 2.2.1 que Ω préserve $D(H_0)$, et d'après le corollaire 2.2.6, que Ω^{+*} préserve $D(H_0)$. On rappelle que $(H_0+i)^{-1}$ est compact (car l'espace des configurations $\mathcal{S}_L$ est compact). On va montrer que (2.19) est convergent en norme. On a pour $\psi \in \mathcal{H}^N$

$$\lim_{h\to 0}\frac{e^{-iH_0(t+h)}-e^{-iH_0t}}{h}\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)(H_0+i)^{-1}\psi = -iH_0e^{-iH_0t}\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)(H_0+i)^{-1}\psi$$

puisque $\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0)(H_0+i)^{-1}\psi \in D(H_0)$. Pour $\phi \in D(H_0)$, d'après le lemme 2.2.2 :

$$\lim_{h\to 0}\frac{\Omega(t+h,0)-\Omega(t,0)}{h}e^{-iH_0(t+h)}\phi = -i\widetilde{W}(t,0)\Omega(t,0)e^{-iH_0t}\phi.$$

Donc (2.19) est convergent en norme car $(H_0+i)^{-1}$ est compact et les autres facteurs sont fortement convergent. Maintenant, puisque a_1 est composé de 2.18 et 2.19, ceci est convergent au sens de la norme trace et

$$\lim_{h\to 0}\|a_1\|_1 = \|-i(H_0+W(t))\rho(t)+iH(t)\rho(t)\|_1 = 0$$

On procède de manière similaire pour a_2, mais en regardant plutôt a_2^*. On obtient

$$\lim_{h\to 0}\|a_2\|_1 = \|(-i(H_0+W(t))\rho(t)+iH(t)\rho(t))^*\|_1 = 0.$$

Et on conclut :

$$\|\frac{\rho(t+h)-\rho(t)}{h} - i[\rho(t),H(t)]\|_1 \xrightarrow{h\to 0} 0 \tag{2.20}$$

On doit montrer maintenant que cette solution est unique : on suppose qu'il existe une autre solution $\widetilde{\rho}(t)$, et on définit

$$\begin{aligned} Y(t) :=& e^{-iH_0t}\Omega(t,0)\Omega^{+*}(0), \\ \dot{Y}(t) =& -iH(t)Y(t) \quad \text{sur} \quad D(H_0) \end{aligned}$$

On remarque que $Y(t)$ préserve $D(H_0)$. Alors, pour $\phi,\psi\in D(H_0)$

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\langle\phi,(\widetilde{\rho}(t)-\rho(t))\psi\rangle = \frac{d}{dt}\langle Y(t)\phi,(Y^*(t)\widetilde{\rho}(t)Y(t)-\rho_{eq})\,Y(t)\psi\rangle \\ &= \langle\dot{Y}(t)\phi,(Y^*(t)\widetilde{\rho}(t)Y(t)-\rho_{eq})\,Y(t)\psi\rangle + \langle Y(t)\phi,\left(\frac{d}{dt}\,(Y^*(t)\widetilde{\rho}(t)Y(t)-\rho_{eq})\right)Y(t)\psi\rangle \\ &+ \langle Y(t)\phi,(Y^*(t)\widetilde{\rho}(t)Y(t)-\rho_{eq})\,\dot{Y}(t)\psi\rangle \end{aligned}$$

et le premier et dernier termes s'annulent, donc

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\langle\phi,(\widetilde{\rho}(t)-\rho(t))\psi\rangle = \langle\phi,\left(\dot{Y}^*(t)\widetilde{\rho}(t)Y(t)+Y^*(t)\dot{\widetilde{\rho}}(t)Y(t)+Y^*(t)\widetilde{\rho}(t)\dot{Y}(t)\right)\psi\rangle \\ &= \langle\phi,(iY^*(t)H(t)\widetilde{\rho}(t)Y(t)+iY^*(t)[\widetilde{\rho}(t),H(t)]Y(t)-iY^*(t)\widetilde{\rho}(t)H(t)Y(t))\,\psi\rangle = 0. \end{aligned}$$

Et comme le résultat donne 0, il peut être étendu à $\phi,\psi\in\mathcal{H}^N$. Et d'après les conditions initiales :

$$\lim_{t\to-\infty}\|\widetilde{\rho}(t)-\rho(t)\|_1 \le \lim_{t\to-\infty}\|\widetilde{\rho}(t)-\rho_{eq}\|_1 + \lim_{t\to-\infty}\|\rho(t)-\rho_{eq}\|_1 = 0$$

donc $\widetilde{\rho}(t)=\rho(t)$. □

2.3 Approximation linéaire

La section précédente a permis d'obtenir deux expressions *implicites* pour le matrice densité au temps t. La première, la relation (2.15) donne ρ en fonction de Ω mais ce dernier n'est pas connu explicitement. La deuxième est donnée par l'équation de Liouville :

$$\rho(t) = \rho_{eq} + i\int_{-\infty}^{t}[\rho(\tau),H(\tau)]d\tau. \tag{2.21}$$

A partir de cette expression on peut obtenir une formule explicite pour $\rho(t)$ si l'on itère la relation, c'est-à-dire si l'on remplace l'opérateur $\rho(\tau)$ présent à l'intérieur du commutateur par l'expression (2.21) elle-même et que l'on répète cette procédure à l'infini. Pour cela, il faut que la

série ainsi obtenue soit convergente. De plus, chaque itération va élever le nombre d'opérateurs H présents à l'intérieur des commutateurs ce qui peut rendre l'expression résultante non bornée et donc plus à trace.

On va ici procéder à un nombre très limité d'itérations permettant de prouver que l'on a toujours un terme de classe trace exprimé en fonction de ρ_{eq} et H, avec un terme de reste que l'on pourra borné dans la norme trace et rendre aussi petit que l'on veut. En effet, H dépendant de F_0, on va voir que l'on peut jouer sur ce paramètre pour rendre le reste petit. On va donc montrer maintenant que $\rho(0)$, la matrice densité au temps $t = 0$, peut s'écrire :

$$\rho(0) = \rho_{eq} + F_0\rho_1(0) + \mathcal{O}(F_0^2)$$

avec

$$\rho_1(0) := i\int_{-\infty}^{0} a(\sigma)e^{i\sigma H_0}[P, \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}d\sigma. \tag{2.22}$$

$\rho_1(0)$ est un opérateur à trace comme on va le voir dans le $i)$ du lemme qui suit.

Remarque 2.3.1. On fera un commentaire sur la possibilité de développer l'expression de ρ à un ordre plus élevé à la fin de ce chapitre, en remarque 2.3.4.

On montre d'abord les propriétés suivantes :

Lemme 2.3.2. *Pour tout $t \in (-\infty, 0]$,*

i) les opérateurs $\rho_{eq}P$, $P\rho_{eq}P$ et $\rho_{eq}P^2$ ainsi que ρ_1 sont de classe trace,

ii) les opérateurs $\rho(t)P$, $P\rho(t)P$ et $\rho(t)P^2$ appartiennent à la classe trace et sont uniformément bornés en t,

iii) la solution $\rho(t)$ de l'équation de Liouville peut s'écrire :

$$\rho(t) \quad = \quad \rho_{eq} - iF_0\int_{-\infty}^{t} a(s)e^{i(s-t)H_0}[\rho(s), P]e^{-i(s-t)H_0}ds, \tag{2.23}$$

au sens de la norme trace.

Démonstration. Pour $i)$, on va utiliser les résultats du lemme 2.2.8 et écrire

$$\|P\rho_{eq}\|_1 = \|P(H_0 + i)^{-1}\| \cdot \|(H_0 + i)\rho_{eq}\|_1,$$

et comme P est relativement borné à H_0, ceci montre que $P\rho_{eq}$ est de classe trace. On procède de la même manière pour $P\rho_{eq}P$ et $\rho_{eq}P^2$. On a donc

$$\|\rho_1(0)\|_1 \leq \int_{-\infty}^{0} |a(\sigma)|\|[P, \rho_{eq}]\|_1 d\sigma < \infty.$$

Pour $ii)$, on peut écrire

$$\begin{aligned}(P^2\rho(t))^* = \big(&P^2(H_0 + i)^{-1}e^{-iH_0t}(H_0 + i)\Omega(t, 0)(H_0 + i)^{-1}(H_0 + i)\Omega^{+*}(0)(H_0 + i)^{-1}\\ &\cdot(H_0 + i)\rho_{eq}^{\frac{1}{2}}(H_0 + i)(H_0 + i)^{-1}\Omega^{+}(0)(H_0 + i)e^{-iH_0t}(H_0 + i)^{-1}\Omega^{*}(t, 0)\big)^*\end{aligned}$$

où, d'après la section précédente, $P^2(H_0+i)^{-1}$, $(H_0+i)\Omega(t, 0)(H_0+i)^{-1}$, $(H_0+i)\Omega^{+*}(0)(H_0+i)^{-1}$ et $(H_0 + i)^{-1}\Omega^{+}(0)(H_0 + i)$ sont bornés uniformément en t, et $(H_0 + i)\rho_{eq}^{\frac{1}{2}}(H_0 + i)$ est de classe trace. On utilise les mêmes arguments pour prouver que $\rho(t)P$ et $P\rho(t)P$ sont à trace.

Pour $iii)$, soit

$$\widetilde{\rho}(t) := e^{itH_0}\rho(t)e^{-itH_0}, \qquad \widetilde{W}(t, s) = e^{iH_0(t-s)}W(t)e^{-iH_0(t-s)}.$$

$\widetilde{\rho}(t)$ est un opérateur de classe trace et il préserve le domaine de H_0. Alors pour sur $D(H_0)$

$$\begin{aligned}\dot{\widetilde{\rho}}(t) =&(iH_0\widetilde{\rho}(t) + ie^{itH_0}[\rho(t), H(t)]e^{-itH_0} - i\widetilde{\rho}(t)H_0)\\ =&- i[\widetilde{\rho}(t), H_0] + i[\widetilde{\rho}(t), H_0 + \widetilde{W}(t,0)]\\ =&i[\widetilde{\rho}(t), \widetilde{W}(t,0)].\end{aligned} \tag{2.24}$$

Pour prouver que cette relation est vrai en norme trace, on peut procéder de la même manière que pour la preuve du théorème 2.2.7 en écrivant la dérivée de $\widetilde{\rho}$ comme une expression composée d'opérateurs fortement convergents, d'opérateurs compacts et d'opérateurs à trace. Les deux premiers type d'opérateurs donnent la convergence en norme et la présence d'opérateur à trace permet de conclure sur la convergence au sens de la norme trace.

On a aussi

$$\|\widetilde{\rho}(t) - \rho_{eq}\|_1 = \|e^{iH_0t}(\rho(t) - \rho_{eq})e^{-iH_0t}\|_1 = \|\rho(t) - \rho_{eq}\|_1$$

et on obtient $\lim_{t\to-\infty}\widetilde{\rho}(t) = \rho_{eq}$ en norme trace. On peut écrire d'après (2.24)

$$\begin{aligned}\widetilde{\rho}(t) =&\rho_{eq} + i\int_{-\infty}^{t}[\widetilde{\rho}(s), \widetilde{W}(s,0)]ds\\ =&\rho_{eq} + i\int_{-\infty}^{t} e^{isH_0}[\rho(s), W(s)]e^{-isH_0}ds\end{aligned}$$

alors

$$\begin{aligned}\rho(t) &= e^{itH_0}\left(\rho_{eq} + i\int_{-\infty}^{t} e^{isH_0}[\rho(s), W(s)]e^{-isH_0}ds\right)e^{-itH_0}\\ &= \rho_{eq} + i\int_{-\infty}^{t} e^{i(s-t)H_0}[\rho(s), W(s)]e^{-i(s-t)H_0}ds\end{aligned}$$

et d'après la définition de $W(s)$ en (2.3) on obtient (2.23). □

Lemme 2.3.3. *L'opérateur*

$$Pe^{iH_0t}P(H_0+i)^{-1}$$

est borné.

Démonstration. On écrit

$$Pe^{iH_0t}P(H_0+i)^{-1} = P(H_0+i)^{-\frac{1}{2}}e^{iH_0t}(H_0+i)^{\frac{1}{2}}(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}P(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}(P^2+1)(H_0+i)^{-1}.$$

Comme $D(P^2) = D(H_0)$, $(P^2+1)(H_0+i)^{-1}$ est borné d'après le théorème du graphe fermé. On a

$$\|(H_0+i)^{\frac{1}{2}}(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}\|^2 = \|(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}(H_0+i)(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}\| \leq 1 + \|(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}V(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}\|$$

et comme d'une part on a $H_0 = P^2/2 + V$ avec V est un opérateur relativement borné au Laplacien avec borne relative plus petite que 1 (d'après la preuve de la proposition 1.2.7) et d'autre part que la relative bornitude au sens des opérateurs entraîne la relative bornitude au sens des formes, voir [K, Th. VI.1.38] on conclut que $(H_0+i)^{\frac{1}{2}}(P^2+1)^{-\frac{1}{2}}$ est borné. On procède de la même manière pour $P(H_0+i)^{-\frac{1}{2}}$. □

On veut maintenant développer $\rho(t)$ en puissances de F_0 au temps $t = 0$, afin d'obtenir le terme linéaire. Le lemme ci-dessus montre que $\rho_1(0)$ définit en (2.22) ainsi que $(\rho_1(0)P)$ sont des opérateurs à trace et le point $iii)$ permet d'écrire :

$$\rho(0) = \rho_{eq} + F_0\rho_1(0) + \mathcal{R}(0)$$

où

$$\mathcal{R}(0) := \rho(0) - \rho_{eq} - F_0\rho_1(0) = iF_0 \int_{-\infty}^{0} a(\sigma)e^{i\sigma H_0}[P, \rho(\sigma) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}d\sigma. \tag{2.25}$$

qui est de classe trace d'après $i)$ et $ii)$. On peut déduire qu'il est au moins d'ordre F_0^2 en réécrivant $\rho(0) - \rho_{eq}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(0) =& - F_0^2 \int_{-\infty}^{0} a(\sigma)e^{i\sigma H_0}[P, \int_{-\infty}^{\sigma} a(s)e^{isH_0}[P, \rho(s)]e^{-isH_0}ds]e^{-i\sigma H_0}d\sigma \\ =& - F_0^2 \int_{-\infty}^{0}\int_{-\infty}^{\sigma} a(\sigma)a(s)e^{i\sigma H_0}[P, e^{isH_0}[P, \rho(s)]e^{-isH_0}]e^{-i\sigma H_0}dsd\sigma,\end{aligned}$$

et à l'aide de la propriété $ii)$ du lemme 2.3.2 et du lemme 2.3.3, on peut montrer que cette quantité appartient à la classe trace.

Remarque 2.3.4. On peut se demander légitimement ici si le développement en puissances de F_0 peut être effectuée à un ordre plus élevé. Il est impératif que tous les termes du développement soient de classe trace, et dans la preuve du lemme 2.3.2 on a utilisé ρ pour contrôler l'opérateur non borné P ainsi que P^2. Ceci est rendu possible grâce au fait que les opérateurs Ω, Ω^+ et leur adjoints préservent le domaine de H_0, propriété établie dans la section précédente. Si l'on peut prouver que ces derniers opérateurs préservent le domaine d'opérateurs composés de puissances plus élevées de H_0, alors, puisque P est relativement borné à H_0, des puissances supérieures à 2 d'opérateurs P pourront être contrôlées par ρ et le développement en F_0 pourra être effectué plus avant.

Chapitre 3

Spectre d'absorption optique

Ce chapitre a pour but d'introduire la définition du spectre d'absorption optique et d'exprimer cette quantité en fonction des états propres du nanotube avec interactions entre électrons. On a vu en introduction que le spectre d'absorption caractérise la réponse linéaire du système à la perturbation lumineuse, c'est donc dans ce cadre de la réponse linéaire que l'on va travailler.

Pour obtenir la formule finale, on utilisera la supposition faite en introduction que le système est à basse température.

3.1 Définition

3.1.1 Définition physique

Pour calculer ce spectre d'absorption on va utiliser la relation donnée par Mahan, voir [Ma, chap. 8] : dans un semiconducteur, la puissance lumineuse absorbée est reliée à la conductivité du materiau et il définit donc le spectre d'absorption $\alpha(\omega)$ comme étant la partie réelle de la conductivité $\sigma(\omega)$ du matériau :

$$\alpha(\omega) = \mathrm{Re}(\sigma(\omega)).$$

La variable ω étant la pulsation du champ électromagnétique envoyé sur le nanotube. On a donc besoin d'une expression de la conductivité dans le cadre de la réponse linéaire, et c'est ce qui est donné dans [Ma, sec. 3.8] où est décrite la méthode de Kubo. D'après cette référence, La conductivité est le rapport entre le courant induit dans le matériau et le champ électrique appliqué sur ce dernier. On connait les caractéristiques du champ électrique appliqué, et le courant $J(t)$ au temps t est par définition la valeur moyenne du moment des électrons dans le nanotube, Mahan donne donc la formule (formelle) suivante :

$$J(t) = \mathrm{Tr}(\rho(t)P)$$

où P est le moment total des électrons. Il écrit pour un champ électrique faible la série de Taylor :

$$J(t) = \mathrm{Tr}(\rho_{eq}P) + F_0 \left.\frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}(\rho(t)P)\right|_{F_0=0} + \mathcal{O}(F_0^2).$$

La conductivité au temps $t = 0$, dans le cadre de la réponse linéaire est finalement donnée par la relation :

$$\sigma(\omega) = \left.\frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}(\rho(0)P)\right|_{F_0=0}.$$

3.1.2 Définition mathématique

Pour l'approche rigoureuse qui va suivre, on va prendre la relation

$$\alpha(\omega) = \mathrm{Re}\, \frac{\partial}{\partial F_0} \mathrm{Tr}(\rho(0)P)\Big|_{F_0=0} \tag{3.1}$$

comme définition mathématique du coefficient d'absorption optique. On va montrer d'abord que la quantité (3.1) est bien définie. On rappelle que l'on peut écrire d'après la section 2.3 l'expansion avec des termes de classe trace suivante :

$$\rho(0) = \rho_{eq} + F_0\rho_1(0) + \mathcal{O}(F_0^2).$$

On peut écrire

$$\mathrm{Tr}(\rho(0)P) = \mathrm{Tr}(\rho_{eq}P) + F_0\mathrm{Tr}(\rho_1(0)P) + \mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P)$$

où

$$\mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P) = iF_0 \int_{-\infty}^{0} a(\sigma)\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}[P, \rho(0) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}P\right) d\sigma. \tag{3.2}$$

D'après le point $i)$ du lemme 2.3.2 on a que $\mathrm{Tr}(\rho_{eq}P)$ est bien défini, et d'après le point $ii)$ de ce lemme on a que $\mathrm{Tr}(\rho_1(0)P)$ est bien défini. De plus on a

$$\frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}(\rho_{eq}P) = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}(\rho_1(0)P) = 0$$

puisque ρ_{eq} et $\rho_1(0)$ ne dépendent pas de F_0. On va dans ce qui suit étudier le terme $\mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P)$ et montrer au lemme 3.1.3 qu'il est bien défini ainsi que sa dérivée en $F_0 = 0$ et que cette dérivée est nulle en ce point. Ce qui permettra d'écrire pour le coefficient d'absorption la formule suivante :

$$\alpha(\omega) = \mathrm{Re}\mathrm{Tr}(\rho_1(0)P) = \int_{-\infty}^{0} \mathrm{Tr}(e^{iH_0\sigma}[P, \rho_{eq}]e^{-iH_0\sigma}P)a(\sigma)d\sigma. \tag{3.3}$$

Remarque 3.1.1. On ne peut pas traiter le terme de reste $\mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P)$ comme les deux premiers termes avec le lemme 2.3.2 car si l'on utilise l'équation (2.21) pour exprimer ce terme, il apparait l'opérateur ρP^3 dont on ne peut pas établir qu'il est de classe trace avec les lemmes établis précedemment.

On établit d'abord un lemme technique :

Lemme 3.1.2. *Pour tout $N > 1$, $\eta > 0$, pour F_0 dans n'importe quel intervalle borné et $t \in (-\infty, 0]$, il existe des constantes positives c_1, c_2, c_3, c_4 dépendantes de N et η telles que l'on a les propriétés suivantes :*

$$\begin{aligned}
&\|(\Omega^*(t,0) - 1)(H_0 + i)^{-1}\| \leq (F_0 + F_0^2) \cdot c_1,\\
&\|(\Omega^+(0) - 1)(H_0 + i)^{-1}\| \leq (F_0 + F_0^2) \cdot c_2,\\
&\|((H_0 + i)\Omega(t,0)(H_0 + i)^{-1} - 1)(H_0 + i)^{-1}\| \leq (F_0 + F_0^2) \cdot c_3,\\
&\|((H_0 + i)\Omega^{+*}(0)(H_0 + i)^{-1} - 1)(H_0 + i)^{-1}\| \leq (F_0 + F_0^2) \cdot c_4.
\end{aligned}$$

Démonstration. Pour $\psi \in \mathcal{H}^N$, on a

$$\begin{aligned}
\|(\Omega^*(t,0) - 1)(H_0 + i)^{-1}\psi\| =& \|\int_0^t \Omega^*(\tau,0)\widetilde{W}(\tau,0)d\tau(H_0 + i)^{-1}\psi\|\\
\leq& F_0 \int_0^t |a(\tau)|\|Pe^{-iH_0\tau}(H_0 + i)^{-1}\| \cdot \|\psi\|d\tau\\
&+ \frac{N}{2}F_0^2 \int_0^t a^2(\tau)d\tau\|(H_0 + i)^{-1}\| \cdot \|\psi\|.
\end{aligned}$$

et comme a est intégrable sur $(-\infty, 0]$ on obtient la première estimation. Pour la seconde estimation on écrit pour $\psi \in \mathcal{H}^N$

$$\Omega^+(0)(H_0+i)^{-1}\psi - (H_0+i)^{-1}\psi = -i\int_0^{-\infty} \widetilde{W}(\tau,0)\Omega(\tau,0)(H_0+i)^{-1}d\tau\psi.$$

et puisque $\Omega(\tau,0)$ préserve $D(H_0)$, il existe une constante $c_2 > 0$ telle que

$$\|(\Omega(t,0)-1)(H_0+i)^{-1}\psi\| \leq (F_0+F_0^2)\cdot c_2\|\psi\|. \tag{3.4}$$

Pour la troisième, on commence par écrire l'opérateur borné suivant

$$(H_0+i)\Omega(t,0)(H_0+i)^{-1} = (H_0+i)(H(t)+ic)^{-1}(H(t)+ic)\Omega(t,0)(H(t)+ic)^{-1}(H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}$$

avec $c \in \mathbb{R}^*$ et

$$\begin{aligned}&(H(t)+ic)\Omega(t,0)(H(t)+ic)^{-1} = (H(t)+ic)e^{iH_0(t-s)}U(t,0)(H(t)+ic)^{-1}\\ &= (H(t)+ic)e^{iH_0(t-s)}(H(t)+ic)^{-1}U(t,0)U^*(t,0)(H(t)+ic)U(t,0)(H(t)+ic)^{-1}\\ &=: A(t)F(t)\end{aligned}$$

où $A(t) := (H(t)+ic)e^{iH_0(t-s)}(H(t)+ic)^{-1}U(t,0)$ est borné et l'opérateur borné

$$F(t) := U^*(t,0)(H(t)+ic)U(t,0)(H(t)+ic)^{-1}$$

est défini similairement à $F_s(t)$ de la preuve du lemme 2.2.3. En suivant la preuve de ce lemme, on obtient

$$\begin{aligned}F(t) =&\mathrm{Id} - F_0\int_0^t a'(\tau)\left(U^*(\tau,0)P(H(\tau)+ic)^{-1}U(\tau,0)F(\tau) + F(\tau)P(H(\tau)+ic)^{-1}\right)d\tau\\ &+ F_0^2\int_0^t a(\tau)a'(\tau)\left(U^*(\tau,0)(H(\tau)+ic)^{-1}U(\tau,0)F(\tau) + F(\tau)(H(\tau)+ic)^{-1}\right)d\tau.\end{aligned} \tag{3.5}$$

et

$$\|F(t)\| \leq \exp\left(2const\cdot\int_0^t \left(F_0|a'(\tau)| + F_0^2|a(\tau)a'(\tau)|\right)d\tau\right) \tag{3.6}$$

qui est borné uniformément en F_0 pour F_0 dans un intervalle borné et en $t \in (-\infty, 0]$. On écrit,

$$(H_0+i)\Omega(t,0)(H_0+i)^{-1} = (H_0+i)(H(t)+ic)^{-1}A(t)F(t)(H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}$$

et

$$\begin{aligned}\left((H_0+i)\Omega(t,0)(H_0+i)^{-1}-1\right)(H_0+i)^{-1} =&(H_0+i)(H(t)+ic)^{-1}\left(A(t)F(t)-1\right)(H_0+i)^{-1}\times\\ &\times(H_0+i)(H(t)+ic)(H_0+i)^{-2}.\end{aligned}$$

On va montrer que la quantité suivante tend vers zéro quand F_0 tend vers zéro :

$$\left(A(t)F(t)-1\right)(H_0+i)^{-1} = A(t)\left(F(t)-1\right)(H_0+i)^{-1} + \left(A(t)-1\right)(H_0+i)^{-1}.$$

D'une part, avec l'équation (3.5) et en utilisant que $U(\tau,0)$ et $U^*(\tau,0)$ sont unitaires, que $P(H(t)+ic)$ est borné uniformément en t et F_0 d'après le lemme 2.1.1 pour un c assez grand et que $F(t)$ aussi d'après ce que l'on vient de voir en (3.6), on obtient

$$\|F(t)-1\| \leq (F_0+F_0^2)\cdot const.$$

D'autre part,

$$\begin{aligned}
A(t)-1 =&(H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}e^{iH_0(t-s)}(H_0+i)(H(t)+ic)^{-1}U(t,0)-1\\
=&(H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}\left(e^{iH_0(t-s)}(H_0+i)(H(t)+ic)^{-1}U(t,0)-1\right)+\\
&+\left((H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}-1\right)\\
=&(H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}\times\\
&\times\left(e^{iH_0(t-s)}(H_0+i)(H(t)+ic)^{-1}U(t,0)-\Omega(t,0)+\Omega(t,0)-1\right)+\\
&+\left((H(t)+ic)(H_0+i)^{-1}-1\right).
\end{aligned}$$

Pour le premier terme

$$e^{iH_0(t-s)}(H_0+i)(H(t)+i)^{-1}U(t,0)-\Omega(t,0)=e^{iH_0(t-s)}\left((H_0+i)(H(t)+i)^{-1}-1\right)U(t,0),$$

et en utilisant l'équation de la résolvente

$$(H(t)+i)^{-1}=(H_0+i)^{-1}-(H_0+i)^{-1}W(t)(H(t)+i)^{-1}, \tag{3.7}$$

on obtient

$$\begin{aligned}
&(H_0+i)(H(t)+i)^{-1}-1=-W(t)(H(t)+i)^{-1}=(F_0a(t)P-\frac{1}{2}F_0^2a^2(t)N)(H(t)+i)^{-1} \quad (3.8)\\
&(H(t)+i)(H_0+i)^{-1}-1=W(t)(H_0+i)^{-1}=(-F_0a(t)P+\frac{1}{2}F_0^2a^2(t)N)(H_0+i)^{-1}.
\end{aligned}$$

En prenant la norme de l'expression ci-dessus et en appliquant le lemme 2.1.1 d'une part et avec (3.4) d'autre part, on déduit que

$$\|A(t)-1\|\leq(F_0+F_0^2)\cdot const.$$

On a donc prouvé qu'il existe une constante $c_3>0$ telle que :

$$\|\left((H_0+i)\Omega(t,0)(H_0+i)^{-1}-1\right)(H_0+i)^{-1}\|\leq(F_0+F_0^2)\cdot c_3.$$

Pour la dernière estimation du lemme, on va utiliser que $U^*(t,s)=U(s,t)$ et donc

$$(H_0+i)\Omega^{*+}(0)(H_0+i)^{-1}=\lim_{t\to\infty}(H_0+i)U(0,t)e^{-iH_0t}(H_0+i)^{-1}.$$

On peut ensuite estimer

$$((H_0+i)U(0,t)e^{-iH_0t}(H_0+i)^{-1}-1)(H_0+i)^{-1}$$

de la même manière que précedemment, et comme cette quantité est bornée uniformément en t, ce qui peut être montré à l'aide du lemme 2.2.3, le passage à la limite $t\to-\infty$ ne changera pas l'estimation. Il existe donc une constante $c_4>0$ telle que

$$\|\left((H_0+i)\Omega^{+*}(0)(H_0+i)^{-1}-1\right)(H_0+i)^{-1}\|\leq(F_0+F_0^2)\cdot c_4.$$

□

Maintenant on peut établir :

Lemme 3.1.3. *Pour tout $N>1$, $\eta>0$, il existe une constante $c_{10}(N,\eta)=:c_{10}>0$ telle que l'on a les estimations suivantes :*

i)

$$|\mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P)| \leq (F_0 + F_0^2)c_{10}$$

ii)

$$\frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P)\Big|_{F_0=0} = 0.$$

Démonstration. On a

$$\mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P) = iF_0 \int_{-\infty}^{0} a(\sigma)\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}[P, \rho(0) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}P\right) d\sigma. \tag{3.9}$$

On rappelle que la quantité suivante est bornée :

$$\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}P(\rho(0) - \rho_{eq})e^{-i\sigma H_0}P\right) = \mathrm{Tr}\left(e^{-i\sigma H_0}Pe^{i\sigma H_0}P(\rho(0) - \rho_{eq})\right)$$

et on veut l'estimer par rapport à F_0. On introduit la notation

$$A := e^{-i\sigma H_0}Pe^{i\sigma H_0}P,$$

On remarque d'abord que $\|A(H_0 + i)^{-1}\|$ est borné d'après le lemme 2.3.3. On a

$$\begin{aligned}\|A(\rho(0) - \rho_{eq})\|_1 =& \|A(\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\Omega^{+}(0) - \rho_{eq})\|_1 \\ \leq& \|A\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}\left(\Omega^{+}(0) - \mathrm{Id}\right)\|_1 + \|A(\Omega^{+*}(0) - \mathrm{Id})\rho_{eq}\|_1.\end{aligned} \tag{3.10}$$

Pour le premier terme, on a :

$$\begin{aligned}&\|A\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}(\Omega^{+}(0) - \mathrm{Id})\|_1 = \\ &= \|A(H_0 + i)^{-1}(H_0 + i)\Omega^{+*}(0)(H_0 + i)^{-1}(H_0 + i)\rho_{eq}(H_0 + i)(H_0 + i)^{-1}(\Omega^{+}(0) - \mathrm{Id})\|_1\end{aligned}$$

et comme $A(H_0 + i)^{-1}$,$(H_0 + i)\Omega^{+*}(0)(H_0 + i)^{-1}$ sont bornés uniformément en F_0 d'après le lemme 3.1.2, $(H_0 + i)\rho_{eq}(H_0 + i)$ est de classe trace, et

$$\|(H_0 + i)^{-1}(\Omega^{+}(0) - \mathrm{Id})\| \leq (F_0 + F_0^2) \cdot c_2,$$

d'après le lemme 3.1.2, alors,

$$\|A\Omega^{+*}(0)\rho_{eq}(\Omega^{+}(0) - \mathrm{Id})\|_1 \leq (F_0 + F_0^2) \cdot const.$$

Pour le second terme de (3.10), en utilisant le lemme 3.1.2 on obtient :

$$\begin{aligned}\|A(\Omega^{+*}(0) - \mathrm{Id})\rho_{eq}\|_1 \leq& \|A(H_0 + i)^{-1}(H_0 + i)(\Omega^{+*}(0) - \mathrm{Id})(H_0 + i)^{-2}(H_0 + i)^2\rho_{eq}\|_1 \\ \leq& (F_0 + F_0^2) \cdot const.\end{aligned}$$

On conclut qu'il existe une constante $c_{10} > 0$ telle que

$$\begin{aligned}|\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}P(\rho(0) - \rho_{eq})e^{-i\sigma H_0}P\right)| \leq& \|e^{i\sigma H_0}P(\rho(0) - \rho_{eq})e^{-i\sigma H_0}P\|_1 \\ \leq& (F_0 + F_0^2) \cdot c_{10}.\end{aligned} \tag{3.11}$$

Ce résultat implique *i)*.

Pour *ii)*, on va montrer que la quantité pour l'instant formelle :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}(\mathcal{R}(0)P) =& i\int_{-\infty}^{0} a(\sigma)\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}[P, \rho(0) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}P\right) d\sigma + \\ &+ iF_0 \int_{-\infty}^{0} a(\sigma)\frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}[P, \rho(0) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}P\right) d\sigma\end{aligned} \tag{3.12}$$

est vrai en $F_0 = 0$. Puisque pour $F_0 = 0$ il n'y a pas de perturbation de H_0, $\rho(0, F_0 = 0) = \rho_{eq}$ et

$$\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}[P, \rho(0, F_0 = 0) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}P\right) = 0,$$

le premier terme de (3.12) est nul. Pour $F_0 > 0$,

$$\frac{1}{F_0 - 0}\left(\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}[P, \rho(0) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}P\right) - 0\right),$$

et la limite de ce terme quand F_0 tend vers zéro est la dérivée de la trace en $F_0 = 0$. On a vu précédemment (eq. (3.11)) que cette quantité est bornée uniformément en F_0 au voisinage de zéro :

$$\| \frac{1}{F_0}\mathrm{Tr}\left(e^{i\sigma H_0}[P, \rho(0) - \rho_{eq}]e^{-i\sigma H_0}P\right) \| \leq const.$$

Donc la limite de ce terme existe quand F_0 tend vers zéro et est une quantité bornée. Ceci montre que le deuxième terme de (3.12) est égal à zéro en $F_0 = 0$ puisque a est intégrable sur $(-\infty, 0]$. On conclut avec (3.9) :

$$\frac{\partial}{\partial F_0}\mathrm{Tr}((\rho(0) - \rho_{eq} - \rho_1(0))P)\Big|_{F_0=0} = 0. \tag{3.13}$$

□

3.2 Basse température

On va maintenant simplifier l'expression (3.3) en utilisant le fait que les physiciens font leurs expériences sur les nanotubes à basse température, ce qui signifie que le paramètre β est très grand. D'après ce que l'on a vu précédemment, on peut écrire

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}(\rho_1(0)P) &= i\int_{-\infty}^{0} \mathrm{Tr}(e^{iH_0u}[P, \rho_{eq}]e^{-iH_0u}P)a(u)du \\
&= i\int_{-\infty}^{0} \mathrm{Tr}(e^{iH_0u}Pe^{-iH_0u}\rho_{eq}P - \rho_{eq}e^{iH_0u}Pe^{-iH_0u}P)a(u)du \\
&= i\int_{-\infty}^{0} \mathrm{Tr}(Pe^{iH_0u}Pe^{-iH_0u}\rho_{eq} - \rho_{eq}e^{iH_0u}Pe^{-iH_0u}P)a(u)du
\end{aligned}$$

où on a utilisé que ρ_{eq} commute avec H_0, ainsi que la cyclicité de la trace. On introduit la notation

$$Z := \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}^N}(e^{-\beta H_0}),$$

et on rappelle que ρ_{eq} est définit en (2.4). On peut maintenant écrire dans la base de H_0 :

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}(\rho_1(0)P) = \\
&= \frac{i}{Z}\int_{-\infty}^{0}\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta\lambda_k}\left(< \psi_k, Pe^{iH_0u}Pe^{-iH_0u}\psi_k > - < \psi_k, e^{iH_0u}Pe^{-iH_0u}P\psi_k >\right)a(u)du \\
&= \frac{i}{Z}\int_{-\infty}^{0}\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta\lambda_k}\left(e^{-i\lambda_k u} < P\psi_k, e^{iH_0u}P\psi_k > - e^{i\lambda_k u} < P\psi_k, e^{-iH_0u}P\psi_k >\right)a(u)du
\end{aligned} \tag{3.14}$$

On va aussi écrire

$$Z = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}^N}(e^{-\beta H_0}) = \sum_{k\geq 0} < \psi_k|e^{-\beta\lambda_k}|\psi_k >= \sum_{k\geq 0} e^{-\beta\lambda_k}.$$

et on introduit

$$Z_1 := \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}^N}(e^{-\beta H_0 - \lambda_0}) = \sum_{k\geq 0} e^{-i(\lambda_k - \lambda_0)}.$$

La quantité que l'on doit calculer devient

$$\begin{aligned}&\mathrm{Tr}(\rho_1(0)P) = \\ &= \frac{i}{Z_1}\int_{-\infty}^{0}\Big(e^{-i\lambda_0 u} < P\psi_0, e^{iH_0 u}P\psi_0 > -e^{i\lambda_0 u} < P\psi_0, e^{-iH_0 u}P\psi_0 >\Big)\, a(u)du + \mathcal{R} \qquad (3.15)\end{aligned}$$

où $\mathcal{R} := \mathcal{R}(\beta, \eta, N)$ est :

$$\mathcal{R} := \frac{i}{Z_1}\int_{-\infty}^{0}\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta(\lambda_k - \lambda_0)}\Big(e^{-i\lambda_k u} < P\psi_k, e^{iH_0 u}P\psi_k > -e^{i\lambda_k u} < P\psi_k, e^{-iH_0 u}P\psi_k >\Big)\, a(u)du.$$

Lemme 3.2.1. *Pour N, η fixés, il existe $c_1(N), c_2(N) > 0$ telles que pour β assez grand la quantité $\mathcal{R}(\beta, \eta, N)$ est bornée par :*

$$|\mathcal{R}| \leq \frac{1}{\eta}\left(c_1(N)e^{-\frac{\beta C_N}{L^2}} + \frac{c_2(N)}{\beta^{\frac{N}{2}+2}}\right) \xrightarrow{\beta\to\infty} 0.$$

Démonstration. On peut majorer $\mathcal{R}$ par

$$|\mathcal{R}| \leq \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{0}\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta(\lambda_k - \lambda_0)} 2\|P\psi_k\|^2 a(u)du.$$

Soit ψ_k un vecteur propre de (1.5) avec valeur propre λ_k. On a vu que P est relativement borné par rapport au Laplacien avec borne relative nulle à la proposition 2.1.1 et comme les potentiels sont aussi relativement bornés avec borne relative nulle, avec l'annexe B.2, on peut écrire, si N est fixe, pour $\varepsilon > 0$:

$$\|P\psi_k\|^2 \leq \frac{\varepsilon^2 N^2}{2}\lambda_k^2 + \frac{1}{\varepsilon^2}$$

alors

$$|\mathcal{R}| \leq \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{0} a(u)du \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta(\lambda_k - \lambda_0)}\left(\varepsilon^2 N^2 \lambda_k^2 + \frac{2}{\varepsilon^2}\right).$$

D'après le théorème 1.2.7 les valeurs propres λ_k se comportent asymtotiquement comme

$$\lambda_k \overset{k\to\infty}{\sim} C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}$$

et la quantité

$$e^{-\beta(\lambda_k - \lambda_0)}\left(\varepsilon^2 N^2 \lambda_k^2 + \frac{2}{\varepsilon^2}\right)$$

est donc sommable par rapport à k. On va utiliser maintenant la formule d'Euler-MacLaurin pour estimer la somme. Soit f une fonction dérivable et $n \in \mathbb{N}$, on a :

$$\sum_{k=1}^{n-1} f(k) = \int_0^n f(t)dt + \frac{1}{2}[f(n) - f(0)] + \int_0^n B_1(t)f'(t)dt,$$

avec B_1 un polynôme de Bernoulli. On peut écrire

$$\begin{aligned}\int_0^n B_1(t)f'(t)dt &= \int_0^1 (t-\frac{1}{2})f'(t)dt + \int_1^n B_1(t)f'(t)dt \\ &= -\frac{1}{2}(f(1)-f(0)) + \int_0^1 tf'(t)dt + \int_1^n B_1(t)f'(t)dt,\end{aligned}$$

On va approximer $(\lambda_k - \lambda_0)$ par $C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}$, ce qui donne

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} &= \int_0^{\infty} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} dk - \frac{e^{-\beta \frac{C_N}{L^2}}}{2} + \int_0^1 \frac{\beta C_N}{L^2} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} \frac{2}{N} k^{\frac{2}{N}} dk \\ &\quad + \int_1^{\infty} B_1(t) \frac{\beta C_N}{L^2} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} \frac{2}{N} k^{\frac{2}{N}-1} dk.\end{aligned}$$

On calcule maintenant les intégrales et on obtient

$$\begin{aligned}&\int_0^{\infty} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} dk = \left(\frac{L^2}{\beta C_N}\right)^{\frac{N}{2}} \Gamma(1+\frac{N}{2}), \\ &\int_0^1 e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} \frac{2}{N} k^{\frac{2}{N}} dk = \left(\frac{L^2}{\beta C_N}\right)^{1+\frac{N}{2}} \left(\Gamma(1+\frac{N}{2}) - \Gamma(1+\frac{N}{2}, \frac{\beta C_N}{L^2})\right) \text{ and} \\ &\beta \frac{C_N}{L^2} \int_1^{\infty} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} \frac{2}{N} k^{\frac{2}{N}-1} dk = e^{-\beta \frac{C_N}{L^2}}. \end{aligned} \tag{3.16}$$

où Γ est la fonction Gamma de Euler et $\Gamma(.,.)$ est la fonction Gamma incomplète, voir [chap.6,AS]. On a donc

$$\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} \leq \left(\frac{L^2}{\beta C_N}\right)^{\frac{N}{2}} \Gamma(1+\frac{N}{2})(1+\frac{L^2}{\beta C_N}) + \frac{e^{-\beta \frac{C_N}{L^2}}}{2} \xrightarrow{\beta \to \infty} 0.$$

Pour l'autre terme, on peut noter que

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}\right)^2 e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} = \frac{1}{C_N^2} \frac{d^2}{d\beta^2} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}}.$$

On reprend donc les résultats de (3.16) en dérivant par rapport à β. d'après [AS, 6.5.25] on a que la dérivée par rapport à la seconde variable de la fonction Gamma incomplète donne :

$$\partial_2 \Gamma(1+\frac{N}{2}, \frac{\beta C_N}{L^2}) = -\left(\frac{\beta C_N}{L^2}\right)^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{\beta C_N}{L^2}}.$$

En utilisant la formule [AS, 6.5.32] on peut majorer la fonction Gamma incomplète et obtenir pour β assez grand, avec $c_1, c_2, c_3 > 0$,

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2} e^{-\beta C_N \frac{k^{\frac{2}{N}}}{L^2}} \leq (\frac{c_1}{\beta} + c_2) e^{-\frac{\beta C_N}{L^2}} + \frac{c_3}{\beta^{\frac{N}{2}+2}}$$

D'un autre coté, $a(t) = \mathrm{Re}\left(\frac{e^{i\omega t + \eta t}}{i\omega + \eta}\right)$ est intégrable sur $(-\infty, 0]$ et donne

$$\int_{-\infty}^0 |a(t)| dt = \int_{-\infty}^0 \frac{\eta |\cos(\omega t)| + \omega |\sin(\omega t)|}{\eta^2 + \omega^2} e^{\eta t} dt \leq \frac{\eta + \omega}{\eta^2 + \omega^2} \frac{1}{\eta}.$$

De plus on peut écrire

$$Z_1 = 1 + \sum_{k\geq 1} e^{-\beta(\lambda_k - \lambda_0)} \geq 1.$$

Finalement, pour β grand,

$$|\mathcal{R}| \leq const \cdot \frac{1}{\eta}\left((\frac{c_1}{\beta} + c_2)e^{-\frac{\beta C_N}{L^2}} + \frac{c_3}{\beta^{\frac{N}{2}+2}} \right) \xrightarrow{\beta\to\infty} 0.$$

□

3.3 Formule finale

La formule pour le spectre d'absorption a été réduite sous la forme (3.3), puis sous la forme (3.15) à basse température. On va maintenant nommer T_0 le terme significatif de (3.15) à basse température :

$$T_0 := \frac{i}{Z_1}\int_{-\infty}^{0} \left(e^{-i\lambda_0 u} < P\psi_0, e^{iH_0 u}P\psi_0 > - e^{i\lambda_0 u} < P\psi_0, e^{-iH_0 u}P\psi_0 > \right) a(u)du.$$

et on va donner une expression de celui-ci en fonction des états propres de H_0. On écrit

$$e^{-iH_0 u} = \sum_{k\geq 0} e^{-i\lambda_k u}|\psi_k >< \psi_k|$$

que l'on va insérer dans T_0. On obtient

$$\begin{aligned} T_0 &= \frac{i}{Z_1}\int_{-\infty}^{0}\sum_{k\geq 0}\Big\{ e^{-i\lambda_0 u} < P\psi_0, e^{i\lambda_k u}\psi_k >< \psi_k, P\psi_0 > \\ &\quad - e^{i\lambda_0 u} < P\psi_0, e^{-i\lambda_k u}\psi_k >< \psi_k, P\psi_0 > \Big\} a(u)du \\ &= \frac{i}{Z_1}\sum_{k\geq 0} | < \psi_k, P\psi_0 > |^2 \int_{-\infty}^{0} (e^{i(\lambda_k-\lambda_0)u} - e^{-i(\lambda_k-\lambda_0)u})a(u)du. \end{aligned}$$

En remplacant la fonction a par son expression et en prenant la partie réelle :

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}(T_0) &= \frac{1}{Z_1}\sum_{k\geq 0} | < \psi_k, P\psi_0 > |^2 \mathrm{Re}\int_{-\infty}^{0} (e^{i(\lambda_k-\lambda_0)u} - e^{-i(\lambda_k-\lambda_0)u}) i\frac{e^{i\tilde{\omega}u}}{i\tilde{\omega}}du \\ &= \frac{1}{Z_1}\sum_{k\geq 0} | < \psi_k, P\psi_0 > |^2 \mathrm{Re}\left(\frac{1}{i\tilde{\omega}}(\frac{1}{(\lambda_k-\lambda_0)+\tilde{\omega}} - \frac{1}{(\lambda_k-\lambda_0)-\tilde{\omega}}) \right) \\ &= \frac{1}{Z_1}\sum_{k\geq 0} \mathrm{Re}\frac{2i}{(\lambda_k-\lambda_0)^2-\tilde{\omega}^2} | < \psi_k, P\psi_0 > |^2 \end{aligned}$$

On a

$$\begin{aligned} \frac{2}{\lambda^2-\tilde{\omega}^2} &= \frac{2}{(\lambda-\tilde{\omega})(\lambda+\tilde{\omega})} \\ &= \frac{2(\lambda-\omega-i\eta)(\omega+\lambda+i\eta)}{[(\lambda-\omega)^2+\eta^2][(\lambda+\omega)^2+\eta^2]} \\ &= 2\frac{(\lambda-\omega)(\lambda+\omega)+\eta^2-i2\eta\omega}{[(\lambda-\omega)^2+\eta^2][(\omega+\lambda)^2+\eta^2]}. \end{aligned}$$

Ce qui donne pour le spectre d'absorption la formule suivante :

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{Z_1}\sum_{k\geq 0}\frac{4\eta\omega}{[(\lambda_k-\lambda_0-\omega)^2+\eta^2][(\lambda_k-\lambda_0+\omega)^2+\eta^2]} | < \psi_k, P\psi_0 > |^2 + o_\beta(1) \qquad (3.17)$$

Chapitre 4

Hamiltonien avec interaction entre électrons

Dans les chapitres pécédents, on a établi une relation liant le coefficient d'absorption optique au spectre de l'Hamiltonien avec intéractions entre électrons. Dans ce chapitre, on étudie le spectre de cet opérateur. On suit l'idée de Wannier [Wa] qui consiste à supposer l'intéraction entre électrons faible et à approximer les états propres du systèmes par les états de Bloch. A l'aide de la théorie de perturbation, on obtient, comme Wannier, que malgré que l'interaction soit faible, elle entraîne un effet non négligeable qui est l'apparition dans le spectre de l'opérateur perturbé de valeurs propres appelées valeurs propres de l'exciton. Cette étude permet en plus d'obtenir un Hamiltonien caractérisant l'exciton avec un potentiel explicite, et l'étude pourra être poursuivie, jusqu'à l'obtention des états propres au chapitre suivant.

On part ici du modèle à N électrons sur le cercle avec potentiel périodique définit dans la section 1.2 du chapitre 1. Dans cet espace fermé où évoluent N fermions, il est approprié d'utiliser l'espace de Fock et son formalisme. C'est un outil bien défini et communément utilisé par les mathématiciens et les physiciens, voir les livres de [BR2, chap. 5.2] pour une définition du point de vue mathématique et [Ma, chap. 1.2] pour le point de vue physique. Dans un premier temps on introduit rapidement ce formalisme et on construit la base canonique composée de combinaisons linéaires d'états propres du problème à une particule, anti-symétrisées. On exprime ensuite l'Hamiltonien de notre système dans ce formalisme à la section 4.1.3. Dans la section 4.2, on réduit notre problème à un sous-espace de l'espace de Fock appelé ici "sous-espace de l'exciton" choisi en fonction de certaines considérations physiques. On fait ensuite une étude perturbative de l'opérateur réduit à ce sous-espace pour un couplage faible et pour un grand (mais pas infini) nombre de particules. A l'issue de cela, on obtient ce que l'on appelle l'Hamiltonien de l'exciton. Enfin, en conclusion, on explique comment l'étude de cet exciton permet de donner une idée du spectre de notre système de départ, et on pointe les limitations de cette méthode.

4.1 Introduction

4.1.1 Une particule dans un potentiel périodique

Pour introduire l'espace de Fock il est utile de rappeler certaines propriétés de l'Hamiltonien à N électrons sans interactions entre eux, dans un potentiel périodique, et en particulier les états propres de ce système. On exprimera ensuite H_0, l'Hamiltonien avec interactions, sous forme matricielle, dans la base des états du système sans interaction anti-symétrisées.

Le problème d'une particle sans spin dans un potentiel périodique sur la ligne infinie est traitée rigoureusement et en détails dans [RS4, XIII], on pourra aussi se reporter à [AM, chap. 8] pour une analyse faite par des physiciens. Ces études établissent l'existence d'une suite de

fonctions $\{\varepsilon_b\}_{b=1}^{\infty}$ avec chaque fonction $k \mapsto \varepsilon_b(k)$ définie et continue sur $[-\pi, \pi)$. Pour le problème sur le cercle de longueur L avec périodicité de période 1, le spectre de l'Hamiltonien est discret et chaque valeur propre est une valeur particulière de $\varepsilon_b(k)$ avec le nombre $b \in \mathbb{N}$ appelé numéro de bande et le nombre k

$$k = \frac{2\pi n}{L}, \quad n \in \mathbb{Z} \cap [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}),$$

qui est appelé le *moment cristallin* ou simplement le *vecteur d'onde*. On notera les énergies du système indifféremment :

$$\varepsilon_b(k) \quad \text{ou} \quad \varepsilon(b, k). \tag{4.1}$$

Les vecteurs propres associés forment l'ensemble des fonctions $\left\{e_{b,k} \in L^2(\mathcal{S}_L)\right\}_{b,k}$ tel que

$$e_{b,k}(x) = \frac{u_{b,k}(x)}{\sqrt{L}} e^{ikx} \tag{4.2}$$

avec $u_{b,k}$ une fonction périodique de période 1 non connue explicitement en général, et qui dépend du potentiel périodique. Par exemple, dans le cas où le potentiel périodique est une fonction constante, on a simplement $u_{b,k} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. On notera aussi pour alléger l'écriture

$$e_j := e_{b_j,k_j}, \qquad j \in \mathbb{N}. \tag{4.3}$$

On veut maintenant analyser le problème à $N > 1$ electrons. Pour des particules sans interaction respectant la statistique de Fermi-Dirac, ce qui est le cas des électrons, un vecteur propre du problème à N particules sera simplement le produit anti-symétrisé de N vecteurs propres du problème à une particule. L'ensemble des vecteurs propres antisymétrisés à $N \geq 0$ particules forment la base canonique de l'espace de Fock antisymétrisé.

4.1.2 L'espace de Fock

L'espace de Fock est un espace de Hilbert particulier utilisé pour décrire les états quantiques des systèmes avec un grand nombre, variable, de particules. On va introduire ici les outils de bases nécessaires à notre étude et pour plus d'information sur ce formalisme, on pourra se reporter au livre de Bratelli-Robinson [BR2].

On rappelle que l'espace de Hilbert à N particules $\mathcal{H}^N$, défini en introduction, est le produit tensoriel de N espaces à une particule $\mathcal{H}$. On prend la convention $\mathcal{H}^0 := \mathbb{C}$. On définit l'espace de Fock $\mathcal{F}$:

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N \geq 0} \mathcal{H}^N.$$

Comme on traite un problème avec des fermions, on va travailler dans le sous-espace de l'espace de Fock antisymétrique $\mathcal{F}_a$, engendré par les vecteurs antisymétriques par rapport à n'importe quelle interversion entre deux coordonnées. Soit $\mathcal{P}_n$ le groupe de permutation sur un ensemble $\mathcal{M}^n$ composé de n élements de $\mathbb{N}$. Soit $\{e_j\}_{j \in \mathcal{M}^n}$ des vecteurs de $\mathcal{H}$ et l'opérateur borné σ associé à l'élément $\sigma \in \mathcal{P}_n$ et agissant dans $\mathcal{H}^{\otimes n}$:

$$\sigma(e_{j_1} \otimes e_{j_2} \otimes \cdots \otimes e_{j_n}) = e_{j_{\sigma(1)}} \otimes e_{j_{\sigma(2)}} \otimes \cdots \otimes e_{j_{\sigma(n)}}.$$

Soit la projection orthogonale $A_n = (1/n!) \sum_{\sigma \in \mathcal{P}_n} s(\sigma)\sigma$ où $s(\sigma)$ est la signature de la permutation, on introduit l'espace à N fermions :

$$\mathcal{H}_a^N := A_N \mathcal{H}^N$$

et l'espace de Fock antisymétrique est :

$$\mathcal{F}_a = \bigoplus_{N \geq 0} \mathcal{H}_a^N.$$

On peut exprimer un état antisymétrisé $|\psi_{e_{j_1}e_{j_2}\cdots e_{j_N}}>\in \mathcal{H}_a^N$ décrivant N fermions libres, dans les états $j_1, j_2, \cdots, j_N$, sur le cercle $\mathcal{S}_L$ en présence d'un potentiel périodique par :

$$|\psi_{j_1j_2\cdots j_N}>=\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathcal{P}_N} s(\sigma)e_{j_{\sigma(1)}}\otimes e_{j_{\sigma(2)}}\otimes ...\otimes e_{j_{\sigma(N)}} \tag{4.4}$$

où les $\{e_{j_k}\}$ sont les fonctions propres, définies en (4.3), associées à l'Hamiltonien à une particule sur $\mathcal{S}_L$. Le vecteur $|\psi_{j_1j_2\cdots j_N}>$ depend de plusieurs paramètres, et parmi eux les bandes et les vecteurs d'ondes des différentes fonctions propres e_{j_k} le composant.

On introduit maintenant deux opérateurs d'une grande importance, agissant sur l'espace de Fock antisymétrisé . Pour chaque $e_k \in \mathcal{H}$ on définit l'opérateur d'annihilation $a(e_k)$ dans $\mathcal{F}_a$ par :

$$\begin{aligned} a(e_k) : \mathcal{H}_a^N &\to \mathcal{H}_a^{N-1} \\ a(e_k)|\psi_{j_1j_2\cdots j_N}> &= \frac{1}{(N-1)!}\sum_{\sigma\in\mathcal{P}_N} s(\sigma)\left(e_k, e_{j_{\sigma(1)}}\right) e_{j_{\sigma(2)}}\otimes ...\otimes e_{j_{\sigma(N)}}. \end{aligned}$$

Alors on a

$$a(e_k)|\psi_{j_1j_2\cdots j_N}>=\begin{cases} 0 & \text{si } \forall l\in[1,2,\cdots,N],\ j_l\neq k, \\ (-1)^{l-1}|\psi_{j_1j_2\cdots\hat{k}\cdots j_N}> & \text{si } k=j_l, \end{cases}$$

où $\hat{k}$ dénote le fait que le $k$ième état doit être omis.

Le second opérateur est appelé opérateur de création, il est noté a^* et est défini pour un vecteur $e_{j_{N+1}} \in \mathcal{H}$ quelconque par :

$$\begin{aligned} a(e_{j_{N+1}}) : \mathcal{H}_a^N &\to \mathcal{H}_a^{N+1} \\ a^*(e_{j_{N+1}})|\psi_{j_1j_2\cdots j_N}> &= \frac{1}{(N+1)!}\sum_{\sigma\in\mathcal{P}_{N+1}} s(\sigma)e_{j_{\sigma(N+1)}}\otimes e_{j_{\sigma(1)}}\otimes e_{j_{\sigma(2)}}\otimes\cdots\otimes e_{j_{\sigma(N)}} \end{aligned}$$

ce qui donne :

$$a^*(e_{j_{N+1}})|\psi_{j_1j_2\cdots j_N}>=\begin{cases} 0 & \text{si } \exists l\in[1,2,\cdots,N],\ j_l=k, \\ |\psi_{j_{N+1}j_1j_2\cdots j_N}> & \text{sinon} \end{cases}$$

On remarque que

$$|\psi_{j_{N+1}j_1j_2\cdots j_N}>=(-1)^{l-1}|\psi_{j_1j_2\cdots j_{l-1}j_{N+1}\cdots j_N}>.$$

On a les propriétés d'anticommutation suivantes :

$$\{a(e_s), a(e_p)\}=0, \qquad \{a^*(e_s), a^*(e_p)\}=0, \qquad \{a^*(e_s), a(e_p)\}=\delta_{e_se_p}.$$

On va désigner par h, l'Hamiltonien agissant dans $\mathcal{H}$ et décrivant un électron vivant sur le cercle de longueur L avec potentiel périodique, dont on vient de voir les propriétés à la section 4.1.1. Soit maintenant h_N, l'Hamiltonien agissant dans l'espace antisymétrisé $A_N\mathcal{H}^N$ à N particules, et défini pour $\phi_{k_j} \in \mathcal{H}$ par $h_0 = 0$ et :

$$h_NA_N(\phi_{k_1}\otimes\phi_{k_2}\otimes\cdots\otimes\phi_{k_N}) = A_N(\sum_{j=1}^N \phi_{k_1}\otimes\phi_{k_2}\otimes\cdots\otimes h\phi_{k_j}\otimes\cdots\otimes\phi_{k_N}).$$

On obtient ce qui est appelé la seconde quantification de h notée $d\Gamma(h)$ ou $\hat{H}$, agissant dans $\mathcal{F}_a$, en écrivant :

$$\hat{H} = d\Gamma(h) = \overline{\bigoplus_{N\geq 0} h_N}$$

Dans la base de vecteurs introduite en (4.4), qui sont les vecteurs propres de $\hat{H}$, cet opérateur est diagonal et peut être écrit en termes d'opérateurs de création et d'annihilation comme suit :

$$\hat{H} = \sum_{b,k} \varepsilon_b(k) a^*(e_{b,k}) a(e_{b,k}) =: \sum_{b,k} \varepsilon_b(k) a^*_{b,k} a_{b,k} \qquad \text{sur } \mathcal{F}_a. \tag{4.5}$$

4.1.3 Interaction entre électrons

On va maintenant écrire l'expression de l'Hamiltonien de notre système : le modèle à N électrons sur le cercle interagissants entre eux, dans le formalisme de la seconde quantification. On le désigne par H_I. On doit d'abord remarquer que l'opérateur échangeant n'importe quel couple de particules commute avec H_0 et ensuite que l'espace antisymétrisé à N particules $\mathcal{H}_a^N$ est un sous espace de $\mathcal{H}^N$. Les propriétés de H_0 établies précédemment, auto-adjonction, spectre discret, dans le grand espace $\mathcal{H}^N$ sont par conséquent vraies pour la restriction de H_I au sous-espace $\mathcal{H}_a^N$. En désignant le potentiel second quantifié par $\hat{V}$ et on a :

$$H_I = d\Gamma(H_0) =: \hat{H} + \lambda \hat{V} \qquad \text{sur } \mathcal{F}_a. \tag{4.6}$$

Comme on l'a vu juste avant, pour la partie cinétique avec le potentiel atomique on utilise la relation (4.5) qui nous donne $\hat{H}$. On doit maintenant exprimer la seconde quantification du potentiel d'interaction entre électrons. On montre dans l'annexe A.2.2, en utilisant le théorème de Fubini, que

$$\begin{aligned} v_L(x) &= \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} \left(\frac{1}{L} \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2m\pi x}{L}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2m\pi x'}{L}} V_c^r(x', y) dx' + \right. \\ &\left. + \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V_c^r(x', y) dx' \right) dy \\ &= \frac{1}{L} \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2m\pi x}{L}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2m\pi x'}{L}} v_{\text{eff}}^r(x') dx' + \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} v_{\text{eff}}^r(x') dx', \end{aligned} \tag{4.7}$$

On a aussi

$$v_L(x) = \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{i\frac{2m\pi x}{L}} \widehat{v_L}(m), \tag{4.8}$$

où

$$\widehat{v_L}(m) := \frac{(1-\delta(m))}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2m\pi x'}{L}} v_{\text{eff}}^r(x') dx' + \frac{\delta(m)}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} v_{\text{eff}}^r(x') dx'. \tag{4.9}$$

Dans la base engendrée par les vecteurs propres de $\hat{H}$, on peut écrire la seconde quantification du potentiel d'interaction, d'après [LL3, chap. 9], comme :

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{p,q,t,s} < e_p \otimes e_q, v_L \; e_s \otimes e_t >_{\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}} a^*(e_p) a^*(e_q) a(e_t) a(e_s) \\ &=: \frac{1}{2} \sum_{p,q,t,s} v_{pqst} \; a^*(e_p) a^*(e_q) a(e_t) a(e_s) \end{aligned}$$

Pour le terme de potentiel $v_{pqst} :=< e_p \otimes e_q, v_L \; e_s \otimes e_t >$, on a

$$\begin{aligned} v_{pqst} &= \sqrt{2\pi} \frac{1}{L^3} \times \\ &\times \int_{\mathcal{S}_L^2} \overline{u_p}(x) e^{-ik_p x} \overline{u_q}(x') e^{-ik_q x'} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{i\frac{2m\pi}{L}(x-x')} \widehat{v_L}(m) u_s(x) e^{ik_s x} u_t(x') e^{ik_t x'} dx dx'. \end{aligned}$$

On rappelle que les fonctions u_p dépendent de x, du vecteur d'onde k_p et de la bande b_p. On utilise la propriété de périodicité de la fonction u_j et on l'écrit comme une série de Fourier :

$$u_j(x) = \sum_{m_1\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi m_1}{L}x}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} u_j(y)e^{-i\frac{2\pi m_1}{L}y}dy =: \sum_{m_1\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi m_1}{L}x}\hat{u}_j(m_1) \tag{4.10}$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} v_{pqst} &= \frac{\sqrt{2\pi}}{L^3}\sum_{\substack{m,m_1\\ m_2,m_3,m_4}} \overline{\hat{u}_p(m_1)\hat{u}_q(m_2)}\hat{u}_s(m_3)\hat{u}_t(m_4)\widehat{v_L}(m)\times \\ &\quad\times\int_{\mathcal{S}_L^2} e^{i\frac{2\pi}{L}(m_1-m_3+m-L\frac{k_p-k_s}{2\pi})x}e^{i\frac{2\pi}{L}(m_2-m_4-m-L\frac{k_q-k_t}{2\pi})x'}dxdx' \\ &= \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{m,m_1\in\mathbb{Z}\\ m_2,m_3,m_4}} \overline{\hat{u}_p(m_1)\hat{u}_q(m_2)}\hat{u}_s(m_3)\hat{u}_t(m_4)\widehat{v_L}(m)\times \\ &\quad\times\delta(m_1-m_3+m-L\frac{k_p-k_s}{2\pi})\delta(m_2-m_4-m-L\frac{k_q-k_t}{2\pi}). \end{aligned} \tag{4.11}$$

Ici δ est le symbole de Kronecker apparu du fait que pour $n\in\mathbb{N}$ et $n\neq 0$,

$$\int_\Lambda e^{i\frac{2\pi}{L}nx}dx = \frac{L\sin n\pi}{\pi n} = 0 \tag{4.12}$$

et l'on rappelle que $k_j = j\frac{2\pi}{L}$, $j\in\mathbb{Z}\cap[-L/2,L/2)$, $(m_1-m_3+m-L\frac{k_p-k_s}{2\pi})\in\mathbb{Z}$ et $(m_2-m_4+m-L\frac{k_q-k_t}{2\pi})\in\mathbb{Z}$.

4.2 Réduction à un sous-espace

On va introduire ici une série d'hypothèses afin de simplifier le problème. On ne justifiera ces suppositions que par des arguments physiques que l'on pourra retrouver dans [Ma, chap. 8] par exemple.

4.2.1 Quelques suppositions physiques

Il est important de noter d'abord qu'il y a conservation du nombre de fermions dans le système. On va donc travailler dans le sous-espace de l'espace de Fock à N particules. Il faut garder à l'esprit que dans le problème que l'on traite N est très grand. On va maintenant faire les hypothèses suivantes :

I) *Hypothèse sur le schéma de bande.* On suppose que le système sans interaction entre électrons ne possède que deux bandes dans son spectre : une bande appelée *bande de conduction* et une autre appelée *bande de valence*. La bande de valence (resp. conduction) possède un maximum (resp. minimum) pour $k=0$. La différence en énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence est strictement positive. Les énergies ont un comportement quadratique par rapport au moment cristallin k autour de $k=0$. Plus précisément, les fonctions de bande $\tilde{\varepsilon}_v$ et $\tilde{\varepsilon}_c$ associées aux bandes de valence et conduction respectivent se comportent au voisinage de zéro comme :

$$\tilde{\varepsilon}_v(k) = \tilde{\varepsilon}_v(0) + \frac{k^2}{2}\tilde{\varepsilon}_v''(0) + \mathcal{O}(k^3), \qquad \tilde{\varepsilon}_c(k) = \tilde{\varepsilon}_c(0) + \frac{k^2}{2}\tilde{\varepsilon}_c''(0) + \mathcal{O}(k^3),$$

avec $\tilde{\varepsilon}_c(0) > \tilde{\varepsilon}_v(0) > 0$, $\tilde{\varepsilon}_v''(0) < 0$ et $\tilde{\varepsilon}_c''(0) > 0$. Enfin, on suppose que l'interaction entre électrons est assez faible pour ne pas détruire ce schéma de bande quand on l'ajoute à

l'Hamiltonien. Cette supposition est communément admise par les physiciens, voir [Ma, chap. 8.2], et elle sera précisée en termes mathématiques par la relation (4.36).
Etant donné que l'on étudie des matériaux semiconducteurs, l'état fondamental du système sans interaction est l'état pour lequel tous les électrons ont des énergies uniquement dans la bande de valence et tous les niveaux de celle-ci sont occupés, la bande de conduction étant vide. Le périmètre L du cercle est un nombre entier de fois la périodicité du réseau et on choisit de prendre une période 1 pour le réseau (afin d'alléger l'écriture), on a donc $L \in \mathbb{N}$ niveaux d'énergie dans la bande de valence et comme on travaille avec des semiconducteurs ce choix implique que l'on a $N = L$ électrons dans notre système. Lors de leurs expérimentations sur la réponse optique de semiconducteurs, les physiciens travaillent à basse température et sont intéressés par les énergies présentes dans le gap entre bande de valence et bande de conduction, on peut donc se restreindre à l'étude de cette zone du spectre entre les deux principales bandes.
Ces hypothèses sont valables pour une certaine catégorie de nanotubes(voir [SDD]) et on s'intéressera donc à ceux-là. Par exemple, pour certain nanotubes, il peut arriver qu'il y ait une dégénérescence de bande près du gap, c'est à dire plusieurs bandes se chevauchant, et dans ces cas là, il est nécessaire de considérer plus de deux bandes. Les résultats de cette étude porteront donc uniquement sur les nanotubes n'ayant pas de dégénérescence de bande en bordure du gap. On peut noter que le schéma de bande dépend de la chiralité du nanotube comme indiqué dans la remarque faite à la fin du chapitre 1.

II) On se place, dans le cas où le potentiel atomique est faible. Cela permet de supposer que les fonctions $u_{b,k}$, se trouvant dans l'expression des vecteurs d'onde d'une particule (voir définition en (4.2)), sont indépendantes du vecteur d'onde k : $u_{b,k} = u_b$. Cette supposition n'est pas rigoureusement justifiée mais est utilisée par les physiciens (se référer à [Ma] ou encore à [AM, chap. 8]).

III) On suppose que si un électron avec un moment k_v est manquant dans la bande de valence (on employera aussi le terme de "trou" avec moment k_v), alors il existe un électron avec moment $k_c = k_v$ dans la bande de conduction. Ceci est caractéristique des modèles physiques sans prise en compte des phonons et qui supposent que le moment des photons est négligeable devant celui des électrons, voir par exemple [Ma, 8.2].

IV) *Hypothèse excitonique.* On note l'état de plus basse énergie de notre Hamiltonien sans interaction, c'est-à-dire avec tous les électrons dans la bande de valence, par ψ_0 ou également $|0>$. On définit l'ensemble des états excités $\{\psi_{k_v k_c}\}$ avec tous les électrons sauf un (trou) dans la bande de valence avec moment cristallin k_v, et un électron dans la bande de conduction avec moment k_c :

$$\psi_{k_v k_c} = a^*_{c,k_c} a_{v,k_v} |0>,$$

avec, comme on vient de le voir, $k_v = k_c$. On introduit le sous-espace engendré par ces vecteurs orthonormaux :

$$\mathcal{E} := \text{span}\left\{ |0>, \left\{ a^*_{c,k_c} a_{v,k_v} |0> \right\}_{\substack{k_c,k_v \\ k_c=k_v}} \right\} \subset \mathcal{H}_a^N. \tag{4.13}$$

On note que l'espace de Hilbert $\mathcal{E}$ est de dimension $(N+1)$ puisque $k_c = k_v$ ne peut prendre que N valeurs différentes (et il n'y a que deux bandes : c et v). On introduit le projecteur orthogonal $P_{\mathcal{E}}$ qui projette les éléments de $\mathcal{H}_a^N$ dans le sous-espace $\mathcal{E}$ et on définit la partie de l'Hamiltonien réduit à $\mathcal{E}$:

$$H_1 := P_{\mathcal{E}} H_I P_{\mathcal{E}}$$

Il est important de noter que H_1 ne possède pas forcément le spectre de basse énergie de H_I, mais contient ce que l'on va appeler la "contribution de l'exciton". On suppose que

l'étude de H_1 suffit pour obtenir les informations importantes, aux yeux des physiciens, sur le bas du spectre de H_0. On tente de jutifier cette supposition dans la section suivante.

4.2.2 Sous-espace de l'exciton

Pour les physiciens, l'utilisation de la base des vecteurs propres de l'opérateur sans interaction entre électrons leur permet d'affirmer heuristiquement, comme l'explique Mahan [Ma, chap. 8], l'existence de l'exciton. En effet, ceux-ci supposent que l'absence d'un électron dans la bande de valence est un trou que l'on peut voir comme une quasi-particule chargée positivement (en utilisant l'approximation de la masse effective) et, du fait de l'interaction Coulombienne présente, l'électron de la bande de conduction va interagir avec ce trou pour former des états liés. Ces états liés, d'énergies inférieures à l'énergie du système trou+électron libres dans la bande de valence et de conduction respectivement, apparaitront dans le gap entre bande de valence et de conduction. Ces justifications semblent concorder avec le fait que l'on observe, expérimentalement, via le spectre optique, des niveaux d'énergie dans le gap pour certain nanotubes. C'est la motivation pour les physiciens de la réduction du problème au sous-espace de l'espace de Fock antisymétrique $\mathcal{E}$.

Les éléments de matrice obtenus par la réduction de l'Hamiltonien perturbé à l'espace engendré par les vecteurs propres du problème non perturbé décrivant un électron dans la bande de conduction et un trou dans la bande de valence, contiendront la première correction sur l'energie, due au potentiel électron-électron, et linéaire en λ. Cette correction est la "contribution de l'exciton" au spectre de l'opérateur étudié. Mais on doit bien remarquer que l'étude de H_1 ne donnera des informations que sur une partie du spectre de H_I et que ce n'est pas forcément le spectre de plus basse énergie. Wannier [Wa] et Mahan procèdent à cette réduction [Ma, 8.2.B] et justifient ce choix en affirmant que ceci est valable physiquement parce que l'on a une faible densité d'électrons dans la bande de conduction et de trous dans la bande de valence (car on est a basse température[1]) et donc on peut négliger les intéractions entre excitons. Mais cela ne veut pas dire que les états propres du système avec interaction sont bien approximés par des combinaisons d'états de basse énergie du système avec électrons découplés. Il manque ici une justification rigoureuse dans le choix de ce sous-espace. Il a été décidé dans la présente étude de procéder de la même manière que les physiciens afin de vérifier que l'on obtient bien les résultats attendus, ensuite, en dehors du cadre de cette étude, on pourra tenter de confirmer ou infirmer la validité de cette réduction. Il ne faudra pas oublier dans l'interprétation des résultats ce fait important et notamment l'omission de la contribution due aux biexcitons et autres systèmes composés d'électrons et de trous. On reviendra sur ceci dans la conclusion.

On étudie maintenant H_1 et on va calculer ses éléments de matrice. On va ensuite étudier chaque élément successivement.

Puisque $\mathcal{E}$ est un espace de Hilbert séparable de dimension $N+1$, il est isomorphe à $\ell^2(N+1)$. On introduit la transformation unitaire U entre $\mathcal{E}$ et $\ell^2(N+1)$ qui à un vecteur de $\mathcal{E}$ associe ses coefficients dans la base engendrant $\mathcal{E}$. L'Hamiltonian H_1 devient dans l'espace $\ell^2(N+1)$ la matrice M :

$$M := UH_1U^* = \begin{pmatrix} < 0|H_I|0 > & < 0|H_I a^*_{c,k} a_{v,k}|0 > \\ < 0|a^*_{v,k'} a_{c,k'} H_I|0 > & < 0|a^*_{v,k'} a_{c,k'} H_I a^*_{c,k} a_{v,k}|0 > \end{pmatrix} \tag{4.14}$$

On va maintenant calculer explicitement les termes de cette matrice. On rappelle que l'on a 2 bandes pour le système sans interactions et pour $k \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$ on choisit de désigner par $\varepsilon_v(k)$ les niveaux d'énergie de la bande de valence et par $\varepsilon_c(k)$ les niveaux dans la bande de

[1] En effet ceci est vrai pour un système où les électrons n'intéragissent pas entre eux, on peut le voir immédiatement puisque l'on a la distribution de Fermi-Dirac.

conduction. On introduit *val* et *cond* les ensembles

$$val := (b = v, \left\{k | k \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right\}), \qquad cond := (b = c, \left\{k | k \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}\right\})$$

et on adopte la notation k_v et k_c pour préciser que ce sont des élements appartenant a *val* et *cond* respectivement avec moment k. Puisque l'on suppose que les fonctions u ne dépendent pas du moment cristallin, et en utilisant les symboles ci-dessus, on réécrit la relation (4.11) comme suit :

$$\begin{aligned} v_{p_a q_b s_c t_d} =& \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{m, m_1 \in \mathbb{Z} \\ m_2, m_3, m_4 \in \mathbb{Z}}} \overline{\hat{u}_a(m_1)\hat{u}_b(m_2)}\hat{u}_c(m_3)\hat{u}_d(m_4)\widehat{v_L}(m) \times \\ & \times \delta(m_1 - m_3 + m - L\frac{p-s}{2\pi})\delta(m_2 - m_4 - m - L\frac{q-t}{2\pi}). \end{aligned} \tag{4.15}$$

On utilisera la convention suivante dans cette section : les indices indiquant un vecteur d'onde k et une bande b seront noté k_b où seulement k si l'information sur la bande peut être déduite par un autre moyen.

On introduit les notations :

$$\begin{aligned} E_0 &= \sum_{k=-\pi}^{\pi} \varepsilon_v(k), & E_G &:= E_0 + \frac{\lambda}{2} \sum_{ij \in val} (v_{ijij} - v_{ijji}), \\ E_v(k) &:= \varepsilon_v(k) + \lambda \sum_{i \in val} (v_{k_v i k_v i} - v_{k_v i i k_v}), & E_c(k) &:= \varepsilon_c(k) + \lambda \sum_{i \in val} (v_{k_c i k_c i} - v_{k_c i i k_c}), \end{aligned} \tag{4.16}$$

ainsi que

$$H_{\text{ex}} := \delta_{kk'}(E_c(k) - E_v(k)) + \lambda v_{k_v k'_c k_c k'_v} - \lambda v_{k'_c k_v k_c k'_v}, \tag{4.17}$$

et

$$\begin{aligned} q^*(k) &:= \sum_{i \in val} (v_{k_v i k_c i} - v_{i k_v k_c i}) = q(k), \\ \theta &:= \left(q(-\pi), q(-\pi + \frac{2\pi}{L}), \cdots, q(\pi - \frac{2\pi}{L})\right). \end{aligned} \tag{4.18}$$

Un premier résultat est le suivant :

Lemme 4.2.1. *La matrice M agissant sur $\ell^2(N+1)$ peut s'écrire :*

$$M = \begin{pmatrix} E_G & \lambda\theta \\ \lambda\theta^* & \delta_{kk'}E_G + H_{\text{ex}} \end{pmatrix}.$$

Démonstration. On va successivement calculer tous les termes de la matrice M. Pour ce faire, on va introduire le formalisme électron-trou. On définit les opérateurs création et annihilation de trous :

$$b_k^* := a_{v,k} \quad \text{et} \quad b_k := a_{v,k}^*$$

agissant uniquement dans la bande de valence v. Dans ce formalisme, qui est obtenu par une transformation de Bogolyubov, il est convenu que les opérateurs associés aux trous b_k^*, b_k, agissent dans la bande de valence et les opérateurs associés aux électrons $a_k^* := a_{c,k}^*$, $a_k := a_{c,k}$, dans la bande de conduction. Ces opérateurs anticommutent :

$$\left\{a_k^\sharp, b_{k'}^\natural\right\} = a_k^\sharp b_{k'}^\natural + b_{k'}^\natural a_k^\sharp = 0, \qquad \forall k, k' \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z},$$

avec $\sharp, \natural \in \{*, \emptyset\}$, de plus on a les relations

$$\{a_k^*, a_{k'}\} = \delta_{k_c,k'_c}, \qquad \{b_k^*, b_{k'}\} = \delta_{k_v,k'_v}.$$

Enfin, on rappelle que l'action d'annihiler un électron (resp. trou) dans la bande de conduction (resp. valence) appliqué à l'état fondamental donne zéro :

$$a_k|0>=0, \qquad b_k|0>=0, \quad \forall k \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z} \cap [-\pi, \pi). \tag{4.19}$$

L'expression (4.14) devient :

$$M \;=\; \begin{pmatrix} <0|H_I|0> & <0|H_I a_k^* b_k^*|0> \\ <0|b_{k'} a_{k'} H_I|0> & <0|b_{k'} a_{k'} H_I a_k^* b_k^*|0> \end{pmatrix}. \tag{4.20}$$

Le terme $<0|\hat{H} + \lambda\hat{V}|0>$:
Pour le terme $<0|\hat{H}|0>$,

$$\begin{aligned} <0|\hat{H}|0> &= <0|\sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) b_j b_j^*|0> + <0|\sum_{j\in cond} \varepsilon_c(j) a_j^* a_j|0> = \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) <0|0> + 0 \\ &= \sum_{j\in val} \varepsilon(j) = E_0 \end{aligned}$$

et pour la partie potentielle,

$$<0|\hat{V}|0> = \frac{1}{2} \sum_{ijkl\in val} <0|v_{ijlk} b_i b_j b_k^* b_l^*|0> + \text{reste},$$

où le reste désigne tous les autres termes possibles. Ces termes contiennent tous au moins un a ou a^*. De ce fait, ils sont tous nuls. En effet, d'après la définition de $\hat{V}$ l'arrangement est tel que les créateurs d'electrons dans la bande de conduction sont toujours à gauche des annihilateurs, et, appliqué au fondamental cette conbinaison donne toujours zéro. La seule partie qui est non nulle est la suivante :

$$\begin{aligned} \sum_{ijkl\in val} <0|v_{ijlk} b_i b_j b_k^* b_l^*|0> &= \sum_{ijkl\in val} v_{ijlk}(<0|\delta_{jk} b_i b_l^*|0> - <0|b_i b_k^* b_j b_l^*|0>) \\ &= \sum_{ijkl\in val} v_{ijlk}(\delta_{jk}\delta_{il} - \delta_{ik}\delta_{jl}) \\ &= \sum_{ij\in val} (v_{ijij} - v_{ijji}). \end{aligned}$$

On obtient donc le résultat pour le premier terme de la diagonale de M :

$$<0|H_I|0> = E_0 + \frac{\lambda}{2} \sum_{ij\in val} (v_{ijij} - v_{ijji}). \tag{4.21}$$

Le terme $<0|b_r a_r H_I a_s^* b_s^*|0>$:
On calcule maintenant le terme $<0|b_r a_r H_I a_s^* b_s^*|0>$. D'abord le terme cinétique,

$$\begin{aligned} <0|b_r a_r \hat{H} a_s^* b_s^*|0> &= <0|b_r a_r \left(\sum_{i\in cond} \varepsilon_c(i) a_i^* a_i + \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) b_j b_j^* \right) a_s^* b_s^*|0> \\ &= \sum_{i\in cond} \varepsilon_c(i) <0|b_r a_r a_i^* a_i a_s^* b_s^*|0> + \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) <0|b_r a_r b_j b_j^* a_s^* b_s^*|0> \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
&\sum_{i\in cond} \varepsilon_c(i) < 0|b_r a_r a_i^* a_i a_s^* b_s^*|0 >= \\
&= \sum_{i\in cond} \varepsilon_c(i) < 0|b_r a_r a_i^* \delta_{is_c} b_s^*|0 > - \sum_{i\in cond} \varepsilon_c(i) < 0|b_r a_r a_i^* a_s^* a_i b_s^*|0 > \\
&= \varepsilon_c(s) < 0|b_r a_r a_s^* b_s^*|0 > + \sum_{i\in cond} \varepsilon_c(i) < 0|b_r a_r a_i^* a_s^* b_s^* a_i|0 > \\
&= \varepsilon_c(s) < 0|b_r \delta_{r_c s_c} b_s^*|0 > - \sum_{i\in cond} \varepsilon_c(i) < 0|b_r a_s^* a_r b_s^*|0 > +0 \\
&= \varepsilon_c(s)\delta_{r_c s_c}\delta_{r_v s_v},
\end{aligned}$$

deuxièmement

$$\begin{aligned}
&\sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) < 0|b_r a_r b_j b_j^* a_s^* b_s^*|0 >= \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) < 0|b_r b_j a_r a_s^* b_j^* b_s^*|0 > \\
&= \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) < 0|b_r b_j \delta_{r_c s_c} b_j^* b_s^*|0 > - \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) < 0|b_r b_j a_s^* a_r b_j^* b_s^*|0 > \\
&= \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j)\delta_{r_c s_c} < 0|b_r b_j b_j^* b_s^*|0 > - \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) < 0|b_r b_j a_s^* b_j^* b_s^* a_r|0 > \\
&= \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j)\delta_{r_c s_c} < 0|b_r b_s^*|0 > - \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j)\delta_{r_c s_c} < 0|b_r b_j^* b_j b_s^*|0 > \\
&= \delta_{r_c s_c}\delta_{r_v s_v} \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) - \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j)\delta_{r_c s_c}\delta_{j s_v}\delta_{j r_v} \\
&= \delta_{r_c s_c}\delta_{r_v s_v} \left(\sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) - \varepsilon_v(s) \right).
\end{aligned}$$

Donc

$$< 0|b_r a_r \hat{H} a_s^* b_s^*|0 > \quad = \quad \delta_{r_c s_c}\delta_{r_v s_v} \left(\varepsilon_c(s) - \varepsilon_v(s) + E_0\right).$$

Pour le terme de potentiel,

$$\begin{aligned}
2 < 0|b_r a_r \hat{V} a_s^* b_s^*|0 >= &\sum_{ijkl\in cond} < 0|b_r a_r v_{ijlk} a_i^* a_j^* a_k a_l a_s^* b_s^*|0 > + \\
&+ \sum_{ijkl\in val} < 0|b_r a_r v_{ijlk} b_i b_j b_k^* b_l^* a_s^* b_s^*|0 > + \text{reste}
\end{aligned}$$

Premièrement,

$$\begin{aligned}
\sum_{ijkl\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r a_i^* a_j^* a_k a_l a_s^* b_s^*|0 > \quad &= \quad \sum_{ijkl\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r a_i^* a_j^* a_k \delta_{ls_c} b_s^*|0 > \\
&\quad - \sum_{ijkl\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r a_i^* a_j^* a_k a_s^* a_l b_s^*|0 > \\
&= \quad - \sum_{(ijkl)\in cond} v_{ijlk}\delta_{ls_c} < 0|b_r a_r a_i^* a_j^* b_s^* a_k|0 > -0 \\
&= \quad 0
\end{aligned}$$

En échangeant a (resp. a^*) et en l'amenant vers la droite (resp. gauche), ou en faisant la même chose avec b et b^*, on peut montrer que

$$\sum_{(ijk)\in val, l\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r b_i b_j b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 >= 0$$

et plusieurs autres termes de reste sont nuls pour la même raison, excepté les termes contenant les combinaisons :

$$< 0|b_r a_r b_i b_j b_k^* b_l^* a_s^* b_s^*|0 >,\ < 0|b_r a_r b_i a_j^* b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 >,\ < 0|b_r a_r a_i^* b_j a_k b_l^* a_s^* b_s^*|0 >,$$
$$< 0|b_r a_r a_i^* b_j b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 >,\ < 0|b_r a_r b_i a_j^* a_k b_l^* a_s^* b_s^*|0 > .$$

Pour le terme $\sum_{ijkl\in val} v_{ijlk} < 0|b_r a_r b_i b_j b_k^* b_l^* a_s^* b_s^*|0 >$,

$$\begin{aligned}
&< 0|b_r a_r b_i b_j b_k^* b_l^* a_s^* b_s^*|0 >= \\
&= < 0|b_r b_i b_j b_k^* b_l^* a_r a_s^* b_s^*|0 > \\
&= < 0|b_r b_i b_j b_k^* b_l^* \delta_{r_c s_c} b_s^*|0 > \\
&=\delta_{r_c s_c} [< 0|b_r b_i \delta_{jk} b_l^* b_s^*|0 > - < 0|b_r b_i b_k^* b_j b_l^* b_s^*|0 >] \\
&=\delta_{r_c s_c} [\delta_{jk}(< 0|b_r \delta_{il} b_s^*|0 > - < 0|b_r b_l^* b_i b_s^*|0 >) - (< 0|b_r \delta_{ik} b_j b_l^* b_s^*|0 > \\
&\quad - < 0|b_r b_k^* b_i b_j b_l^* b_s^*|0 >)] \\
&=\delta_{r_c s_c} [\delta_{jk}(\delta_{il}\delta_{r_v s_v} - < 0|b_r b_l^* \delta_{is_v}|0 >) - (\delta_{ik}(< 0|b_r \delta_{jl} b_s^*|0 > \\
&\quad - < 0|b_r b_l^* b_j b_s^*|0 >) - < 0|\delta_{r_v k} b_i b_j b_l^* b_s^*|0 >)] \\
&=\delta_{r_c s_c} [\delta_{jk}(\delta_{il}\delta_{r_v s_v} - \delta_{is_v}\delta_{r_v l}) - (\delta_{ik}(\delta_{jl}\delta_{r_v s_v} - < 0|b_r b_l^* \delta_{js_v}|0 >) \\
&\quad - \delta_{r_v k}(< 0|b_i \delta_{jl} b_s^*|0 > - < 0|b_i b_l^* b_j b_s^*|0 >))] \\
&=\delta_{r_c s_c} [\delta_{jk}(\delta_{il}\delta_{r_v s_v} - \delta_{is_v}\delta_{r_v l}) - (\delta_{ik}(\delta_{jl}\delta_{r_v s_v} - \delta_{r_v l}\delta_{js_v}) - \delta_{r_v k}(\delta_{jl}\delta_{is_v} - \\
&\quad - \delta_{il}\delta_{js_v}))]
\end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned}
< 0|b_r a_r b_i b_j b_k^* b_l^* a_s^* b_s^*|0 >=&\delta_{r_c s_c}\delta_{jk}\delta_{il}\delta_{r_v s_v} - \delta_{r_c s_c}\delta_{jk}\delta_{is_v}\delta_{r_v l} - \delta_{r_c s_c}\delta_{ik}\delta_{jl}\delta_{r_v s_v} \\
&+ \delta_{r_c s_c}\delta_{ik}\delta_{r_v l}\delta_{js_v} + \delta_{r_c s_c}\delta_{r_v k}\delta_{jl}\delta_{is_v} - \delta_{r_c s_c}\delta_{r_v k}\delta_{il}\delta_{js_v}.
\end{aligned}$$

On obtient donc le terme de potentiel suivant :

$$\begin{aligned}
&\sum_{ijkl\in val} v_{ijlk} < 0|b_r a_r b_i b_j b_k^* b_l^* a_s^* b_s^*|0 >= \delta_{r_c s_c}\left(\delta_{r_v s_v}\sum_{ij\in val} v_{ijij} - \sum_{j\in val} v_{s_v j r_v j} - \right. \\
&\left. - \delta_{r_v s_v}\sum_{ij\in val} v_{ijji} + \sum_{i\in val} v_{is_v r_v i} + \sum_{j\in val} v_{s_v j j r_v} - \sum_{i\in val} v_{is_v i r_v}\right) \\
&= \delta_{r_c s_c}\left(\delta_{r_v s_v}(\sum_{ij\in val}(v_{ijij} - v_{ijji})) + 2\sum_{i\in val}(v_{is_v r_v i} - v_{s_v i r_v i})\right)
\end{aligned}$$

On rappelle que la symétrie du potentiel implique $v_{ijkl} = v_{jilk}$. En effet, soit $v(x, y)$ un potentiel entre deux particules de coordonnées x et y, tel que $v(x, y) = v(y, x)$, ceci entraîne

$$\begin{aligned}
v_{ijkl} &= < e_i \otimes e_j|v|e_l \otimes e_k >= \int_{\mathcal{S}_L^2} \overline{e_i(x)e_j(y)} v(x, y) e_l(x) e_k(y) dxdy \\
&= \int_{\mathcal{S}_L^2} \overline{e_i(x)e_j(y)} v(y, x) e_l(x) e_k(y) dxdy =< e_j \otimes e_i|v|e_k \otimes e_l > \\
&= v_{jilk}.
\end{aligned}$$

Pour le reste des termes qui ne sont pas égaux à zéro :

$$\begin{aligned}
&\sum_{ik\in val, jl\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r b_i a_j^* b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 >= \\
&= \sum_{ik\in val, jl\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r b_i a_j^* b_k^* \delta_{ls_c} b_s^*|0 > -0 \\
&= - \sum_{ik\in val, jl\in cond} v_{ijlk}\delta_{ls_c} < 0|b_r b_i \delta_{jr_c} b_k^* b_s^*|0 > -0 \\
&= - \sum_{ik\in val, jl\in cond} v_{ijlk}\delta_{ls_c}\delta_{jr_c} < 0|\delta_{ik} b_r b_s^*|0 > + \\
&+ \sum_{ik\in val, jl\in cond} v_{ijlk}\delta_{ls_c}\delta_{jr_c} < 0|b_r b_k^* b_i b_s^*|0 > \\
&= - \sum_{ik\in val, jl\in cond} v_{ijlk}\delta_{ls_c}\delta_{jr_c}\delta_{ik}\delta_{r_v s_v} + \sum_{ik\in val, jl\in cond} v_{ijlk}\delta_{ls_c}\delta_{jr_c}\delta_{is_v}\delta_{r_v k} \\
&= - \sum_{i\in val} v_{ir_c s_c i}\delta_{r_v s_v} + v_{s_v r_c s_c r_v}
\end{aligned}$$

et par le même raisonement :

$$\begin{aligned}
\sum_{jl\in val, ik\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r a_i^* b_j a_k b_l^* a_s^* b_s^*|0 > &= - \sum_{i\in val} v_{r_c i i s_c}\delta_{r_v s_v} + v_{r_c s_v r_v s_c} \\
\sum_{il\in cond, jk\in val} v_{ijlk} < 0|b_r a_r a_i^* b_j b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 > &= \sum_{i\in val} v_{r_c i s_c i}\delta_{r_v s_v} - v_{r_c s_v s_c r_v} \\
\sum_{il\in val, jk\in cond} v_{ijlk} < 0|b_r a_r b_i a_j^* a_k b_l^* a_s^* b_s^*|0 > &= \sum_{i\in val} v_{ir_c i s_c}\delta_{r_v s_v} - v_{s_v r_c r_v s_c}.
\end{aligned}$$

Alors,

$$\begin{aligned}
2 < 0|b_r a_r \hat{V} a_s^* b_{r_c}^*|0 > &= 2\delta_{r_v s_v}\left(\sum_{i\in val} v_{r_c i s_c i} - \sum_{i\in val} v_{ir_c s_c i} + \frac{\delta_{r_c s_c}}{2}\sum_{ij\in val}(v_{ijij} - v_{ijji})\right) \\
&+ 2\delta_{r_c s_c}\sum_{i\in val}(v_{is_v r_v i} - v_{s_v i r_v i}) + 2v_{s_v r_c s_c r_v} - 2v_{r_c s_v s_c r_v}.
\end{aligned}$$

Finalement, pour la partie de la matrice contenant les termes $< 0|b_r a_r H a_s^* b_s^*|0 >$ on a

$$\begin{aligned}
< 0|b_r a_r H a_s^* b_s^*|0 >=&\delta_{r_v s_v}\left(\delta_{r_c s_c}\left(\varepsilon_c(s) - \varepsilon_v(s) + \frac{\lambda}{2}\sum_{ij\in val}(v_{ijij} - v_{ijji}) + E_0\right)\right. \\
&\left. +\lambda\sum_{i\in val}(v_{r_c i s_c i} - v_{r_c i i s_c})\right) \\
&+ \lambda\delta_{r_c s_c}\sum_{i\in val}(v_{is_v r_v i} - v_{s_v i r_v i}) + \lambda v_{s_v r_c s_c r_v} - \lambda v_{r_c s_v s_c r_v} \\
=&\delta_{r_v s_v}\delta_{r_c s_c}\left(\varepsilon_c(s) - \varepsilon_v(s) + E_0 + \frac{\lambda}{2}\sum_{ij\in val}(v_{ijij} - v_{ijji})\right) \\
&+ \lambda\delta_{r_v s_v}\sum_{i\in val}(v_{r_c i s_c i} - v_{r_c i i s_c}) - \lambda\delta_{r_c s_c}\sum_{i\in val}(v_{s_v i r_v i} - v_{s_v i i r_v}) \\
&+ \lambda v_{s_v r_c s_c r_v} - \lambda v_{r_c s_v s_c r_v}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Les termes hors-diagonaux :
Pour le terme $< 0|Ha_r^* b_{r_v}^*|0 >=< 0|\hat{H}a_r^* b_{r_v}^*|0 > +\lambda < 0|\hat{V}a_r^* b_{r_v}^*|0 >$,

$$\begin{aligned} < 0|\hat{H}a_r^* b_{r_v}^*|0 > &= < 0|\sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) b_j b_j^* a_r^* b_{r_v}^*|0 > + < 0|\sum_{j\in cond} \varepsilon_c(j) a_j^* a_j a_r^* b_{r_v}^*|0 > \\ &= \sum_{j\in val} \varepsilon_v(j) < 0|a_r^* b_j b_j^* b_{r_v}^*|0 > + \sum_{j\in cond} \varepsilon_c(j) < 0|a_j^* a_j a_r^* b_{r_v}^*|0 > \\ &= 0 \end{aligned}$$

et pour le potentiel,

$$\begin{aligned} 2 < 0|\hat{V}a_r^* b_{r_v}^*|0 > &= \sum_{ijkl\in cond} < 0|v_{ijlk} a_i^* a_j^* a_k a_l a_s^* b_s^*|0 > + \\ &\quad + \sum_{ijkl\in val} < 0|v_{ijlk} b_i b_j b_k^* b_l^* a_s^* b_s^*|0 > + \text{reste} \end{aligned}$$

Plusieurs termes sont nuls. On ne montre que le calcul pour les termes non nuls :

$$\sum_{ijk\in val, l\in cond} < 0|v_{ijlk} b_i b_j b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 > \text{ and } \sum_{ijl\in val, k\in cond} < 0|v_{ijlk} b_i b_j a_k b_l^* a_s^* b_s^*|0 > .$$

En détails :

$$\begin{aligned} < 0|b_i b_j b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 > &= < 0|b_i b_j b_k^* \delta_{ls_c} b_s^*|0 > -0 = \delta_{ls_c} < 0|b_i b_j b_k^* b_s^*|0 > \\ &= \delta_{ls_c} < 0|b_i \delta_{jk} b_s^*|0 > -\delta_{ls_c} < 0|b_i b_k^* b_j b_s^*|0 > \\ &= \delta_{ls_c}\delta_{jk}\delta_{is_v} - \delta_{ls_c}\delta_{ik}\delta_{js_v}. \end{aligned}$$

Pour l'autre terme on a juste à echanger l et k et mettre un signe moins. Alors,

$$\sum_{ijk\in val, l\in cond} < 0|v_{ijlk} b_i b_j b_k^* a_l a_s^* b_s^*|0 >= \sum_{i\in val} v_{s_v i s_c i} - \sum_{i\in val} v_{i s_v s_c i}$$

et

$$\sum_{ijk\in val, l\in cond} < 0|v_{ijlk} b_i b_j a_l b_k^* a_s^* b_s^*|0 >= -\sum_{i\in val} v_{s_v i i s_c} + \sum_{i\in val} v_{i s_v i s_c}$$

Ainsi, on peut écrire :

$$< 0|Ha_s^* b_s^*|0 >= \lambda \left(\sum_{i\in val} v_{s_v i s_c i} - \sum_{i\in val} v_{i s_v s_c i} \right). \tag{4.23}$$

On déduit le second terme hors-diagonal,

$$< 0|b_{s_v} a_s H|0 >= \overline{< 0|Ha_s^* b_s^*|0 >} = \lambda \left(\sum_{i\in val} v_{s_v i s_c i} - \sum_{i\in val} v_{i s_v s_c i} \right). \tag{4.24}$$

□

On continue maintenant le calcul en remplaçant les coefficient du potentiel par leur formule (4.15) rappelée ici :

$$\begin{aligned} v_{p_a q_b s_c t_d} =& \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{m, m_1 \in \mathbb{Z} \\ m_2, m_3, m_4}} \overline{\hat{u}_a(m_1)\hat{u}_b(m_2)} \hat{u}_c(m_3)\hat{u}_d(m_4)\widehat{v_L}(m) \times \\ & \times \delta(m_1 - m_3 + m - L\frac{p-s}{2\pi})\delta(m_2 - m_4 - m - L\frac{q-t}{2\pi}). \end{aligned} \tag{4.25}$$

et si l'on introduit

$$n_1 := m - L\frac{p-s}{2\pi} \in \mathbb{Z}, \quad n_2 := m + L\frac{q-t}{2\pi} \in \mathbb{Z}, \tag{4.26}$$

on peut écrire

$$v_{p_a q_b s_c t_d} = \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{n_1,n_2\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2\in\mathbb{Z}}} \overline{\hat{u}_a(m_1)\hat{u}_b(m_2)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\hat{u}_d(m_2-n_2)\widehat{v_L}(\frac{L(p-s)}{2\pi}+n_1). \tag{4.27}$$

On introduit les notations :

$$\begin{aligned}
S_v(n_1) &:= \sum_{m_1,m_2\in\mathbb{Z}} \overline{\hat{u}_v(m_1)}\hat{u}_v(m_1+n_1)\overline{\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_v(m_2-n_1) = \widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_v|^2}(n_1)\\
S_c(n_1) &:= \sum_{m_1,m_2\in\mathbb{Z}} \overline{\hat{u}_v(m_1)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\overline{\hat{u}_c(m_2)}\hat{u}_v(m_2-n_1) = \widehat{\overline{u_v}u_c}(n_1)\widehat{\overline{u_c}u_v}(n_1)\\
S_o(n_1) &:= \sum_{m_1,m_2\in\mathbb{Z}} \overline{\hat{u}_v(m_1)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\overline{\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_v(m_2-n_1) = \widehat{\overline{u_v}u_c}(n_1)\widehat{|u_v|^2}(n_1).
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Remarque 4.2.2. Les normes ℓ^1 et ℓ^2 de ces fonctions de n_1 sont bornées, on peut le voir en utilisant l'égalité de Parseval, sachant que u_v et u_c sont intégrables sur $[-\pi,\pi)$. De plus, Ces fonctions sont bornées uniformément en N car on peut écrire d'après (4.10)

$$\hat{u}_j(m_1) = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} u_j(y)e^{-i\frac{2\pi m_1}{L}y}dy \tag{4.29}$$

et comme u_j est borné uniformément en L, $\hat{u}_j$ l'est aussi, et par le même argument $\widehat{|u_v|^2}$ et $\widehat{\overline{u_v}u_c}$ aussi.

On introduit aussi la notation suivante pour $k \in [-\pi,\pi)\cap\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$ et $n_1 \in \mathbb{Z}$:

$$v_I(k,n_1) := \frac{2\pi}{L}\sum_{\substack{k'=-\pi\\ k'\neq k}}^{\pi} \widehat{v_L}(\frac{L(k'-k)}{2\pi}+n_1). \tag{4.30}$$

On rappelle que

$$M = \begin{pmatrix} E_G & \lambda\theta \\ \lambda\theta^* & \delta_{kk'}\left(E_G + E_c(k) - E_v(k)\right) + \lambda v_{k'_v k_c k'_c k_v} - \lambda v_{k_c k'_v k'_c k_v} \end{pmatrix}.$$

et

$$\theta := \left(q(-\pi), q(-\pi+\frac{2\pi}{L}), \cdots, q(\pi-\frac{2\pi}{L})\right)$$

où tous ces termes sont définis en (4.16), (4.17) et (4.18).

Lemme 4.2.3. *Pour $L>0$ fixé, et quelque soit $k,k' \in [-\pi,\pi)\cap\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$, les termes de la matrice M sont bornés et peuvent s'écrire de la manière suivante*

i) pour la diagonale de la matrice :

$$E_G = E_0 - \frac{\lambda}{2}\frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{r,s=-\pi\\ r\neq s}}^{\pi}\sum_{n_1\in\mathbb{Z}} S_v(n_1)\widehat{v_L}(\frac{L(r-s)}{2\pi}+n_1),$$

ii) pour la diagonale de la partie inférieure droite de M :

$$E_v(k) = \varepsilon_v(k) - \frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} S_v(n_1) v_I(k, n_1),$$

$$E_c(k) =$$

$$\varepsilon_c(k) - \lambda \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} S_c(n_1) v_I(k, n_1) \right.$$

$$\left. - \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} \sum_{m_1, m_2 \in \mathbb{Z}} \overline{\hat{u}_v(m_1)} \hat{u}_c(m_1 + n_1) \overline{\hat{u}_c(m_2)} \hat{u}_v(m_2 - n_1) \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \widehat{v_L}(m_1 - m_2 + n_1) \right),$$

iii) pour la partie hors-diagonale :

$$q(k') = \sum_{i \in val} (v_{k'_v i k'_c i} - v_{i k'_v k'_c i}) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} S_o(n_1) v_I(k', n_1),$$

iv) et pour le reste des termes de la partie inférieure droite de M, avec des termes diagonaux et hors-diagonaux :

$$v_{k'_v k_c k'_c k_v} - v_{k_c k'_v k'_c k_v} =$$

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{L} \left(\sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} S_c(n_1) \widehat{v_L}(n_1) - \right.$$

$$\left. \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} \sum_{m_1, m_2 \in \mathbb{Z}} \overline{\hat{u}_v(m_1)} \hat{u}_c(m_1 + n_1) \overline{\hat{u}_c(m_2)} \hat{u}_v(m_2 - n_1) \widehat{v_L} \left(\frac{L(k - k')}{2\pi} + (m_1 - m_2 + n_1) \right) \right),$$

ou encore :

$$v_{k'_v k_c k'_c k_v} - v_{k_c k'_v k'_c k_v} =$$

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{L} \left(\sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} S_c(n_1) \widehat{v_L}(n_1) - \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} \widehat{|u_v|^2}(n_1) \widehat{|u_c|^2}(n_1) \widehat{v_L} \left(\frac{L(k - k')}{2\pi} + n_1 \right) \right). \tag{4.31}$$

Démonstration. On calcule d'abord les termes sur la diagonale, c'est à dire les termes pour lesquels $k_v = k'_v$, ce qui implique aussi $k_c = k'_c$. Pour v_{ijji}, on écrira k_i au lieu de i pour éviter les confusions, ($k_i = p = t$, $k_j = q = s$) avec des indices associés aux états de la bande de valence, on a $n_1 = n_2$ d'après (4.26) et d'après (4.27) :

$$v_{ijji} = \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{n_1 \in \mathbb{Z} \\ m_1, m_2}} \overline{\hat{u}_v(m_1) \hat{u}_v(m_2)} \hat{u}_v(m_1 + n_1) \hat{u}_v(m_2 - n_1) \widehat{v_L}(\frac{L(k_i - k_j)}{2\pi} + n_1)$$

et pour v_{ijij}, $n_1 = n_2 = m \in \mathbb{Z}$

$$v_{ijij} = \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{n_1 \in \mathbb{Z} \\ m_1, m_2}} \overline{\hat{u}_v(m_1) \hat{u}_v(m_2)} \hat{u}_v(m_1 + n_1) \hat{u}_v(m_2 - n_1) \widehat{v_L}(n_1)$$

Alors on obtient

$$\sum_{i,j\in val}(v_{ijij}-v_{ijji}) =$$
$$= -\frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{k_i,k_j=-\pi\\ k_i\neq k_j}}^{\pi}\sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2}}\overline{\hat{u}_v(m_1)}\hat{u}_v(m_1+n_1)\overline{\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_v(m_2-n_1)\widehat{v_L}(\frac{L(k_i-k_j)}{2\pi}+n_1).$$

Pour $v_{r_v i r_c i}$ avec $i\in v$, on sait que $r_v=r_c$ donc ici $p=t$, $q=s=i$ et

$$v_{r_v i r_c i} = \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2}}\overline{\hat{u}_v(m_1)\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\hat{u}_v(m_2-n_1)\widehat{v_L}(n_1).$$

On a aussi

$$v_{i r_v r_c i} = \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2}}\overline{\hat{u}_v(m_1)\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\hat{u}_v(m_2-n_1)\widehat{v_L}(\frac{L(k_i-r)}{2\pi}+n_1).$$

On obtient :

$$\sum_{i\in val}(v_{r_v i r_c i}-v_{i r_v r_c i}) =$$
$$= -\frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{k_i=-\pi\\ k_i\neq k_r}}^{\pi}\sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}^*\\ m_1,m_2\in\mathbb{Z}}}\overline{\hat{u}_v(m_1)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\overline{\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_v(m_2-n_1)\widehat{v_L}(\frac{L(k_i-r)}{2\pi}+n_1).$$

L'orthogonalité de $\hat{u}_v$ et $\hat{u}_c$ implique que cette somme est nulle quand $n_1=0$.

Pour le terme $\sum_{i\in val}(v_{r_c i s_c i}-v_{i r_c s_c i})$, le symbole $\delta_{r_v s_v}$ signifiant que $r_v=s_v$ ce qui implique aussi $r_c=s_c$,

$$v_{i r_c s_c i} =$$
$$= \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2\in\mathbb{Z}}}\overline{\hat{u}_v(m_1)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\overline{\hat{u}_c(m_2)}\hat{u}_v(m_2-n_1)\widehat{v_L}(\frac{L(k_i-r)}{2\pi}+n_1).$$

et

$$\begin{aligned}
v_{r_c i s_c i} &= \\
&= \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2\in\mathbb{Z}}}\overline{\hat{u}_c(m_1)\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\hat{u}_v(m_2-n_1)\widehat{v_L}(n_1)\\
&= \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{n_1\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2\in\mathbb{Z}}}\overline{\hat{u}_c(m_1)\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_c(m_2+m_1+n_1-m_2)\hat{u}_v(m_1+m_2-n_1-m_1)\widehat{v_L}(n_1)\\
&= \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{p\in\mathbb{Z}\\ m_1,m_2\in\mathbb{Z}}}\overline{\hat{u}_c(m_1)}\hat{u}_v(m_1-p)\overline{\hat{u}_v(m_2)}\hat{u}_c(m_2+p)\widehat{v_L}(m_2-m_1+p) \qquad (4.32)
\end{aligned}$$

où $p = m_1 + n_1 - m_2$. Alors,

$$\begin{aligned}
&\delta_{r_v s_v} \sum_{i \in val} (v_{r_c i s_c i} - v_{i r_c s_c i}) = \\
&= \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{k_i=-\pi}^{\pi} \sum_{\substack{n_1 \in \mathbb{Z}^* \\ m_1, m_2 \in \mathbb{Z}}} \overline{\hat{u}_v(m_1)} \hat{u}_c(m_1 + n_1) \overline{\hat{u}_c(m_2)} \hat{u}_v(m_2 - n_1) \\
&\cdot \left(\widehat{v_L}(m_1 - m_2 + n_1) - \widehat{v_L}(\frac{L(k_i - r)}{2\pi} + n_1) \right),
\end{aligned}$$

avec $n_1 \neq 0$ puisque $\hat{u}_v$ et $\hat{u}_v$ sont orthogonaux. On peut déduire le terme :

$$\begin{aligned}
&\delta_{r_c s_c} \sum_{i \in val} (v_{s_v i r_v i} - v_{i s_v r_v i}) = \\
&= -\frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{k_i=-\pi \\ k_i \neq k_{r_c}}}^{\pi} \sum_{\substack{n_1 \in \mathbb{Z} \\ m_1, m_2 \in \mathbb{Z}}} \overline{\hat{u}_v(m_1)} \hat{u}_v(m_1 + n_1) \overline{\hat{u}_v(m_2)} \hat{u}_v(m_2 - n_1) \widehat{v_L}(\frac{L(k_i - r)}{2\pi} + n_1).
\end{aligned}$$

Pour le potentiel,

$$\begin{aligned}
&v_{r_c s_v s_c r_v} = \\
&= \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{n_1 \in \mathbb{Z} \\ m_1, m_2 \in \mathbb{Z}}} \overline{\hat{u}_c(m_2) \hat{u}_v(m_1)} \hat{u}_c(m_2 + n_1) \hat{u}_v(m_1 - n_1) \widehat{v_L}(\frac{L(r - s)}{2\pi} + n_1) \\
&= \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{p \in \mathbb{Z} \\ m_1, m_2 \in \mathbb{Z}}} \overline{\hat{u}_v(m_1) \hat{u}_c(m_2)} \hat{u}_c(m_1 + p) \hat{u}_v(m_2 - p) \widehat{v_L}(\frac{L(r - s)}{2\pi} + p + m_1 - m_2)
\end{aligned}$$

avec $p = n_1 + m_2 - m_1$. On peut aussi écrire :

$$\sum_{m_1 \in \mathbb{Z}} \overline{\hat{u}_v(m_1)} \hat{u}_v(m_1 - n) = \widehat{|u_v|^2}(-n),$$

ce qui va donner la deuxième formule du lemme. Enfin, pour le dernier terme,

$$\begin{aligned}
&v_{s_v r_c s_c r_v} = \\
&= \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \sum_{\substack{n_1 \in \mathbb{Z} \\ m_1, m_2 \in \mathbb{Z}}} \overline{\hat{u}_v(m_1)} \hat{u}_c(m_1 + n_1) \overline{\hat{u}_c(m_2)} \hat{u}_v(m_2 - n_1) \widehat{v_L}(n_1).
\end{aligned}$$

On va montrer maintenant que toutes ces quantités sont bornées. On peut d'abord noter que le point où $\widehat{v_L}$ est singulière est exclu de toutes ces expressions, on peut donc majorer $|\widehat{v_L}|$ par le suprémum, pour tout L fixé. On peut ensuite utiliser la remarque 4.2.2 pour conclure. On va faire tendre N vers l'infini dans une prochaine section et on verra qu'il faut être prudent avec la singularité à l'origine. □

4.3 Théorie de perturbation

Dans cette section, on utilise la théorie de perturbation afin d'estimer le spectre de la matrice M.

D'abord on étudie l'influence du paramètre λ qui représente l'intensité du couplage entre les électrons et qui est choisit comme faible. On va voir dans la première partie que les termes hors diagonaux $\lambda\theta$ et $\lambda\theta^*$ de M, définis en (4.18), peuvent être traités similairement à une perturbation de rang 1 de la matrice M où ces deux termes sont pris égaux à zéro. Le spectre de la matrice M est asymptotique, lorsque λ tend vers zéro, au spectre de la matrice diagonale obtenue à partir de M en remplaçant θ et θ^* par zéro. En effet, la partie diagonale de M depend aussi de λ. Pour arriver à cette conclusion, on a besoin d'informations sur le spectre de la matrice non perturbée (voir l'hypothèse 4.3.1), que l'on admettra ici et qui seront établies plus tard dans l'étude.

On fait ensuite varier le paramètre nombre de particules, N, que l'on va rendre grand mais pas infini. On va voir que plus N sera grand plus le spectre de M sera proche du spectre d'un certain modèle "continu" où les vecteurs propres seront des fonctions de $L^2(-\pi,\pi)$. Les spectres seront encore une fois asymptotiques, les valeurs propres des deux modèles tendant vers l'infini quand N tend vers l'infini, notamment dû à la divergence de E_G avec N.

Les résultats de cette partie ouvriront la voie à l'étude de la partie inférieure droite de M, qui, on le verra au chapitre 5, se ramènera à l'étude de l'exciton sur la ligne infinie.

On va décomposer la matrice M en trois parties :

$$M =: \begin{pmatrix} E_G & 0 \\ 0 & \delta_{kk'}E_G \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & H_{\text{ex}} \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ \theta^* & 0 \end{pmatrix} =: M_G + M_{\text{ex}} + \lambda Q \tag{4.33}$$

où on rappelle que les différents élements sont définis en (4.18), (4.17) et (4.18). Chacun des opérateurs définis ici dépend implicitement de N et λ.

4.3.1 Interaction faible

Afin d'étudier l'influence du paramètre λ sur le spectre de M, on rappelle les relations définies en (4.18) et (4.28) :

$$q(k) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} S_o(n_1) v_I(k, n_1),$$

$$\theta = (q(-\pi), q(-\pi + \frac{2\pi}{L}), \cdots, q(\pi - \frac{2\pi}{L})).$$

On introduit les projecteurs orthogonaux P_1 et P_2 :

$$P_1 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \qquad P_2 = 1 - P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix}, \tag{4.34}$$

alors

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \theta^* & 0 \end{pmatrix} = P_2 Q P_1, \qquad \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = P_1 Q P_2.$$

On introduit l'opérateur pour $k \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$

$$\mathcal{D}_d(k) := E_c(k) - E_v(k), \tag{4.35}$$

avec E_c et E_v données au lemmme 4.2.3, ainsi que l'opérateur

$$\begin{aligned} H^0_{\text{ex}} :=& H_{\text{ex}} - \delta_{kk'}\mathcal{D}_d(0) \\ =& \delta_{kk'}(\mathcal{D}_d(k) - \mathcal{D}_d(0)) - \lambda(v_{k_v k'_c k_c k'_v} - v_{k'_c k_v k_c k'_v}). \end{aligned}$$

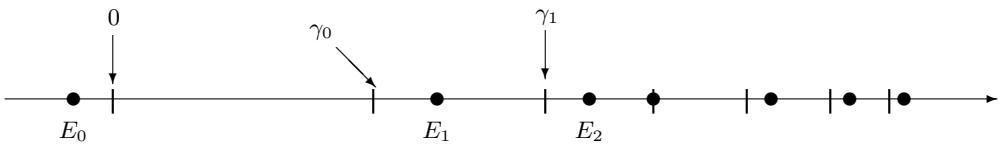

FIG. 4.1 – Spectre des matrices M_p ($\{E_n\}_n$) et M_{ex} ($\{0, \{\gamma_n\}_n\}$). Les E_n et γ_n dépendent de λ.

et la nouvelle notation pour la partie inférieure droite de la matrice donnée au lemme 4.2.3 :

$$M_{\text{ex}} =: \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \delta_{kk'}\mathcal{D}_d(0) + H^0_{\text{ex}} \end{pmatrix},$$

où $\mathcal{D}_d(0)$ est le "gap" entre la bande de valence et la bande de conduction. La dernière phrase de l'hypothèse I) de la section 4.2.1 pose comme hypothèse que $\mathcal{D}_d(0) > 0$ et

$$E_c(k) - E_v(k) - \mathcal{D}_d(0) \geq 0, \qquad \forall k \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}. \tag{4.36}$$

On définit la matrice M_p comme étant la perturbation de la matrice diagonale par bloc M_{ex} :

$$M_p := \lambda Q + M_{\text{ex}}.$$

on a donc

$$M = M_G + M_p.$$

On a besoin dans cette section de deux hypothèses sur le spectre de H^0_{ex} qui sont les suivantes :

Hypothèse 4.3.1. *pour λ assez petit :*
a) L'infimum du spectre H^0_{ex} tend vers zéro quand λ tend vers zéro.
b) Les valeurs propres de H^0_{ex} sont simples.

On démontrera au chapitre 5 que ces suppositions sont effectivement vraies. On déduit de ces hypothèses que $\sigma(H^0_{\text{ex}}) = \{\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_{N-1}\}$, où $\alpha_0 < \alpha_1 < \cdots < \alpha_{N-1}$. On désignera dans cette section par ψ_n le vecteur propre et Π_n le projecteur propre de H_{ex} associés à la valeur propre

$$\gamma_n := \mathcal{D}_d(0) + \alpha_n,$$

c'est à dire :

$$H_{\text{ex}} = \bigoplus_{n=0}^{N-1} \gamma_n \Pi_n.$$

Remarque 4.3.2. Comme $\mathcal{D}_d(0) > 0$, on a pour λ assez petit : $\gamma_0 > 0$.

On introduit la notation pour $z \in \rho(H_{\text{ex}})$:

$$R_{\text{ex}}(z) := (\mathcal{D}_d(0) + H^0_{\text{ex}} - z)^{-1},$$

et on rappelle que R_{ex} agit dans $\text{Ran}(P_2)$. On va donner des informations sur le spectre de M_p, illustré par la figure 4.3.1, dans le théorème suivant :

Théorème 4.3.3. *Pour $\lambda > 0$ assez petit, les valeurs propres $\{E_n\}_{n=0}^N$ de M_p sont simples. En outre, on a :*
i) E_0 se trouve dans l'intervalle $[-\frac{\lambda^2\|\theta\|^2}{\gamma_0}, 0)$,

ii) pour $1 \leq n \leq N$

a) si $\langle \psi_{n-1}, \theta^* \rangle \neq 0$ *alors*

$$E_n \in (\gamma_{n-1}, \gamma_n), \qquad E_n = -\lambda^2 \theta R_{\text{ex}}(E_n)\theta^*,$$

b) si $\langle \psi_{n-1}, \theta^* \rangle = 0$, *alors*

$$E_n = \gamma_{n-1},$$

iii) E_N *se trouve dans l'intervalle* $[\gamma_{N-1}, \gamma_{N-1} + \frac{\lambda^2 \|\theta\|^2}{\gamma_{N-1}}]$.

On montre d'abord le lemme suivant :

Lemme 4.3.4. *Pour tout* $\lambda > 0$ *et pour tout* $z \in \mathbb{C}$ *tel que* $z \in \rho(H_{\text{ex}})$ *et* $(z + \lambda^2 \theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*) \neq 0$, $(M_p - z)$ *est inversible et la résolvante associée à la matrice* M_p *peut s'écrire*

$$(M_p - z)^{-1} = \frac{1}{z + \lambda^2 \theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*} \begin{pmatrix} -1 & \lambda \theta R_{\text{ex}}(z) \\ \lambda R_{\text{ex}}(z)\theta^* & R_{\text{ex}}(z) - \lambda^2 R_{\text{ex}}(z)\theta^* \theta R_{\text{ex}}(z) \end{pmatrix}. \tag{4.37}$$

Démonstration. Pour inverser M_p nous allons utiliser la décomposition de Feshbach. On écrit

$$\begin{aligned} P_1 M_p P_1 &= 0 \\ P_1 M_p P_2 &= \lambda P_1 \theta P_2 = (P_2 M_p P_1)^* \\ P_2 M_p P_2 &= \mathcal{D}_d(0) P_2 + H^0_{\text{ex}}. \end{aligned}$$

et l'on peut mettre M_p sous la forme :

$$M_p = \begin{pmatrix} P_1 M_p P_1 & P_1 M_p P_2 \\ P_2 M_p P_1 & P_2 M_p P_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \lambda P_1 \theta P_2 \\ \lambda P_2 \theta^* P_1 & \mathcal{D}_d(0) + H^0_{\text{ex}} \end{pmatrix}.$$

Soit $z \in \mathbb{C} \backslash \mathbb{R}$ la formule de Feshbach donne :

$$(M_p - z)^{-1} = \begin{pmatrix} R(z) + R(z) P_1 M_p P_2 S(z) P_2 M_p P_1 R(z) & -R(z) P_1 M_p P_2 S(z) \\ -S(z) P_2 M_p P_1 R(z) & S(z) \end{pmatrix} \tag{4.38}$$

avec

$$R(z) := P_1 (P_1 M_p P_1 - z)^{-1} P_1, \qquad S(z) := P_2 (P_2 M_p P_2 + W(z) - z)^{-1} P_2 \tag{4.39}$$

et

$$W(z) := -P_2 M_p P_1 R(z) P_1 M_p P_2.$$

On va montrer que ces quantités existent pour certains $z \in \mathbb{R}$. On définit

$$d_{\text{ex}}(z) := d(z, \sigma(\mathcal{D}_d(0) + H^0_{\text{ex}})). \tag{4.40}$$

Dans notre cas

$$R(z) = -\frac{1}{z} P_1$$

qui est défini pour tout $z \in \mathbb{C}^*$. On a, pour z dans ce domaine,

$$\begin{aligned} P_2 M_p P_2 + W(z) =& \mathcal{D}_d(0) P_2 + H^0_{\text{ex}} - \lambda P_2 \theta^* (-\frac{1}{z}) P_1 \lambda \theta P_2 \\ =& \mathcal{D}_d(0) P_2 + H^0_{\text{ex}} + \frac{\lambda^2}{z} P_2 \theta^* \theta P_2. \end{aligned} \tag{4.41}$$

On remarque que $\theta^*\theta$ est un opérateur de rang un : $\theta^*\theta = \langle\theta,\cdot\rangle\theta$. On fixe N et on choisit $z \in \mathbb{R}$ tel que $z \neq 0$ et $d_{\text{ex}}(z) > 0$, et si on a la condition $z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \neq 0$, on obtient, en utilisant la formule de Krein[2]

$$S(z) = R_{\text{ex}}(z) - \lambda^2 \left\{z + \lambda^2\langle\theta, R_{\text{ex}}(z)\theta\rangle\right\}^{-1} R_{\text{ex}}(z)\theta^*\theta R_{\text{ex}}(z). \tag{4.42}$$

On calcule maintenant les termes de la matrice M_p en utilisant l'expression de $S(z)$ donnée ci-dessus :

$$\begin{aligned} P_1\theta P_2 S(z) P_2\theta^* P_1 &= \theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \left(1 - \frac{\lambda^2}{z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*}\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*\right) \\ &= \theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \frac{z}{z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} R(z) + \lambda^2 R(z) P_1\theta P_2 S(z) P_2\theta^* P_1 R(z) &= -\frac{1}{z} + \frac{\lambda^2}{z}\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \frac{1}{z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*} \\ &= -\frac{1}{z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*} \end{aligned}$$

On a aussi

$$R(z)P_1\lambda\theta P_2 S(z) = -\frac{\lambda\theta R_{\text{ex}}(z)}{z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*}.$$

On obtient donc pour $z \neq 0$, $z \in \rho(H_{\text{ex}})$ et $z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \neq 0$, l'expression suivante pour la résolvante de M_p :

$$(M_p - z)^{-1} = \frac{1}{z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*} \begin{pmatrix} -1 & \lambda\theta R_{\text{ex}}(z) \\ \lambda R_{\text{ex}}(z)\theta^* & R_{\text{ex}}(z) - \lambda^2 R_{\text{ex}}(z)\theta^*\theta R_{\text{ex}}(z) \end{pmatrix}.$$

On peut remarquer que comme $0 \notin \sigma(H_{\text{ex}})$, l'expression ci-dessus, si $\lambda > 0$, existe en $z = 0$ et comme R_{ex} est analytique dans un voisinage de zéro, on peut donc la prolonger en ce point. □

On va maintenant étudier pour quelles valeurs de z, $(M_p - z)^{-1}$ est singulière, et on commence par établir les propriétés suivantes :

Lemme 4.3.5. *Soit $\{\psi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ les vecteurs propres associés aux valeurs propres $\{\gamma_n\}$ de H_{ex}. Pour tout $\lambda > 0$ assez petit et $z \in \rho(H_{\text{ex}})$, il existe une solution unique pour l'équation*

$$z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* = 0 \tag{4.43}$$

i) entre chaque intervalle (γ_n, γ_{n+s}) avec $s \in \mathbb{N}^*$, si $(\psi_n, \theta) \neq 0$, $(\psi_{n+s}, \theta) \neq 0$ et $(\psi_p, \theta) = 0$ pour $n < p < n + s$.

ii) dans l'intervalle $[\gamma_n, +\infty)$ si $(\psi_n, \theta) \neq 0$, et $(\psi_p, \theta) = 0$ pour tout $n < p \leq N$.

iii) dans l'intervalle $[-\frac{\lambda^2\|\theta\|^2}{\gamma_0}, 0)$.

iv) dans l'intervalle $(\gamma_{N-1}, \gamma_{N-1} + \frac{\lambda^2\|\theta\|^2}{\gamma_{N-1}}]$ si $(\psi_{N-1}, \theta) \neq 0$.

Démonstration. D'après l'hypothèse 4.3.1 *b*) du début de la section, pour λ assez petit, les valeurs propres de H_{ex} sont simples. Pour $z \in \rho(H_{\text{ex}}) > 0$ soit la fonction

$$f(z) := z + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^*.$$

[2] voir annexe B.7.

On a

$$f'(z) = 1 + \lambda^2 \theta R_{\text{ex}}^2(z)\theta^* \geq 1$$

et donc la fonction f est strictement croissante. Soit $n \in [0, N-2]$ et $s \in [1, N]$, tel que $(\psi_n, \theta) \neq 0$, $(\psi_{n+s}, \theta) \neq 0$ et $(\psi_p, \theta) = 0$ pour tout p compris entre $n < p < n+s$. Sous ces hypothèses, pour $z \in (\gamma_n, \gamma_{n+s})$, f est continue et d'après le théorème spectral,

$$\begin{aligned}\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* = &\sum_{0 \leq p < n} \theta \Pi_p \frac{1}{\gamma_p - z} \Pi_p \theta^* + \theta \Pi_n \frac{1}{\gamma_n - z} \Pi_n \theta^* + \theta \Pi_{n+s} \frac{1}{\gamma_{n+s} - z} \Pi_{n+s} \theta^* + \\ &+ \sum_{n+s < p \leq N-1} \theta \Pi_p \frac{1}{\gamma_p - z} \Pi_p \theta^*.\end{aligned}$$

On a $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \xrightarrow{z \to \gamma_n} -\infty$ et $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \xrightarrow{z \to \gamma_{n+s}} +\infty$. Alors il n'y a qu'une seule solution de $f(z) = 0$ pour $z \in (\gamma_n, \gamma_{n+s})$.

Pour *ii*), par un raisonement analogue, pour $z > \gamma_n$ on a $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \xrightarrow{z \to \gamma_n} -\infty$ et, de l'autre coté, $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \xrightarrow{z \to \infty} 0$ et donc $f(z) \xrightarrow{z \to \gamma_n} -\infty$ et $f(z) \xrightarrow{z \to \infty} +\infty$. Il existe donc une solution unique pour l'équation $f(z) = 0$ dans l'intervalle $(\gamma_n, +\infty)$ avec $z > 0$.

Pour *iii*), Avec l'hypothèse 4.3.1 *a*), pour λ assez petit on a $\gamma_0 > 0$. Soit $0 \leq z < \gamma_0$, on a que $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \xrightarrow{z \to -\infty} 0$ ce qui montre que $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* > 0$ et donc $f(z) > 0$ et il n'y a pas de solution pour $0 \leq z \leq \gamma_0$. Mais comme f est continue sur $(-\infty, \gamma_0)$ et $f(z) \xrightarrow{z \to -\infty} -\infty$, ainsi que $f(z) > 0$ pour $z \leq 0$ alors il existe un zéro de f sur l'intervalle $(-\infty, 0)$. Soit z_0 ce point, comme on a $z_0 = -\lambda^2 \theta R_{\text{ex}}(z_0)\theta^*$,

$$\frac{|z_0|}{\lambda^2} = |\theta R_{\text{ex}}(z_0)\theta^*| \leq \|\theta\|^2 \cdot \|R_{\text{ex}}(z_0)\| \leq \frac{\|\theta\|^2}{\gamma_0}. \tag{4.44}$$

Pour *iv*), soit $z > \gamma_{N-1}$ avec $(\psi_{N-1}, \theta) \neq 0$. Avec le même raisonement que pour la preuve de *i*), on a $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \xrightarrow{z \to \gamma_{N-1}} -\infty$ et $\theta R_{\text{ex}}(z)\theta^* \xrightarrow{z \to \infty} 0$ et donc $f(z) \xrightarrow{z \to \gamma_n} -\infty$ et $f(z) \xrightarrow{z \to \infty} +\infty$. il existe une solution unique pour $f(z) = 0$ sur cet intervalle, soit z_1 cette solution, on a

$$|z_1| = \lambda^2 |\theta R_{\text{ex}}(z_1)\theta^*| \leq \lambda^2 \|\theta\|^2 \frac{1}{|\gamma_{N-1} - z_1|}$$

et si l'on introduit ξ tel que $z_1 =: \gamma_{N-1}/2 + \xi$ alors

$$\begin{aligned}&|\frac{\gamma_{N-1}}{2} - \xi|(\xi + \frac{\gamma_{N-1}}{2}) \leq \lambda^2 \|\theta\|^2 \\ &|\xi^2 - (\frac{\gamma_{N-1}}{2})^2| \leq \lambda^2 \|\theta\|^2 \\ &(\frac{\gamma_{N-1}}{2})^2 - \lambda^2 \|\theta\|^2 \leq \xi^2 \leq (\frac{\gamma_{N-1}}{2})^2 + \lambda^2 \|\theta\|^2.\end{aligned}$$

Comme $z_1 > \gamma_{N-1}$ on a pour λ assez petit

$$\begin{aligned}\frac{\gamma_{N-1}}{2} < \xi &\leq \frac{\gamma_{N-1}}{2} \sqrt{1 + \frac{2\lambda^2 \|\theta\|^2}{\gamma_{N-1}^2}} \\ &\leq \frac{\gamma_{N-1}}{2} + \frac{\lambda^2 \|\theta\|^2}{\gamma_{N-1}}.\end{aligned}$$

□

Preuve du théorème 4.3.3. Soit E_n une singularité de la résolvante de M_p, alors nécessairement, d'après le lemme 4.3.4, $E_n+\lambda^2\theta R_{\text{ex}}(E_n)\theta^* = 0$ ou $E_n = \gamma_n$, puisque sinon, $R_{\text{ex}}(E_n)$ serait borné, et $(E_n + \lambda^2\theta R_{\text{ex}}(E_n)\theta^*)^{-1}$ serait fini et cela supposerait que $(M_p - E_n)^{-1}$ soit borné.

Pour la réciproque, on note d'abord que M_p est de taille $N+1\times N+1$ et possède donc $N+1$ valeurs propres éventuellement répétées. D'après le lemme 4.3.5 et la relation (4.37), une valeur propre de M_p, notée E_0, se trouve dans l'intervalle $[-\lambda^2\|\theta\|^2/\gamma_0, 0)$, et elle est unique pour λ assez petit car d'après l'hypothèse 4.3.1 *a*), $\gamma_0 > 0$ pour λ assez petit et donc $R_{\text{ex}}(z)$ est borné pour z dans cet intervalle.

Soit $n \in [0, N-1]$. On a d'une part que si $(\psi_n, \theta^*) \neq 0$ alors, d'après le lemme 4.3.5, il existe une solution unique de (4.43) que l'on peut associer à l'indice n et que l'on note E_{n+1}. De plus, $E_{n+1} > \gamma_n$ et $E_{n+1} \neq \gamma_p$ pour $p \in [n+1, N-1]$. C'est une valeur propre de M_p d'après le lemme 4.3.4.

D'autre part, si $(\psi_n, \theta^*) = 0$, on introduit $\widetilde{\psi}_n := 0 \oplus \psi_n$ dans la décomposition $\mathcal{E} = \text{ran}P_1 \oplus \text{ran}P_2$ alors

$$M_p\widetilde{\psi}_n = \begin{pmatrix} 0 & \lambda\theta \\ \lambda\theta^* & H_{\text{ex}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \gamma_n\psi_n \end{pmatrix}. \tag{4.45}$$

qui montre que γ_n est valeur propre de M_p avec vecteur propre associé $\widetilde{\psi}_n$.

Ainsi, pour chaque $n \in [0, N]$ on peut associer une valeur propre distincte E_n et comme la dimension de M_p est $N+1$, il n'y en a pas d autre. On en déduit aussi qu'elles sont simples.

□

4.3.2 Grand nombre de particules

On va utiliser la théorie de perturbation pour obtenir une estimation des différentes parties de (4.33) quand N devient grand. On va voir que les sommes discrètes présentes dans les coefficient de M peuvent être approximées par des intégrales. On va d'abord introduire quelques outils pour cette étude, puis on traitera chaque terme de la matrice M successivement.

Soit les sous-espaces

$$\mathcal{E}_0 := \text{span}\{|0>\} \qquad \mathcal{E}_N := \text{span}\{\{a_k^* b_k^* |0>\}_k\}, \quad k \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{N}\mathbb{Z}$$

ces deux objets sont des sous-espaces de $\mathcal{E}$ défini en (4.13). Le vecteur d'onde k peut prendre N valeurs différentes et $\mathcal{E}_N$ est donc de dimension N. On a

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \oplus \mathcal{E}_N.$$

Les espaces $\mathcal{E}_0$ et $\mathcal{E}_N$ sont les images des projecteurs orthogonaux P_1 et P_2 définis dans la section précédente[3] respectivement. On introduit :

$$\mathcal{H}^d := \ell^2(N),$$

l'espace des suites de carré sommable de N nombres complexes. Puisque $\mathcal{E}_N$ est de dimension N, cet espace est isomorphe à $\mathcal{H}^d$. On définit

$$k_j = j\frac{2\pi}{N}, \qquad j \in \left\{-\frac{N}{2}, ..., 0, ..., \frac{N}{2} - 1\right\},$$

$N \geq 2$ étant un nombre pair. On va écrire les fonctions $\psi \in \mathcal{H}^d$ comme suit :

$$\psi = \Big(\psi(k_{-\frac{N}{2}}), ..., \psi(k_j), ..., \psi(k_{\frac{N}{2}-1})\Big) = (\psi_{-\frac{N}{2}}, ..., \psi_j, ..., \psi_{\frac{N}{2}-1}).$$

[3] Voir formule (4.34).

On va appeler dans ce qui suit $\mathcal{H}^d$ "l'espace discret" par opposition à

$$\mathcal{H}^c := L^2(-\pi, \pi),$$

qui sera appelé "l'espace continu". On définit

$$\chi_j(k) = \begin{cases} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} & \text{si } k_j \leq k < k_{j+1} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.$$

On introduit l'opérateur J qui plonge $\mathcal{H}^d$ dans $\mathcal{H}^c$

$$J : \mathcal{H}^d \to \mathcal{H}^c$$

$$J : \psi = (\psi_{-\frac{N}{2}}, ..., \psi_j, ..., \psi_{\frac{N}{2}-1}) \mapsto (J\psi)(k) = \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_j \chi_j(k). \tag{4.46}$$

Pour $\psi \in \mathcal{H}^d$,

$$\begin{aligned}(J\psi, J\psi)_{\mathcal{H}} &= \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_j \chi_j(k) \overline{\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_l \chi_l(k)} dk = \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_j \overline{\psi_l} \int_{-\pi}^{\pi} \chi_j(k)\chi_l(k) dk \\ &= \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_j \overline{\psi_l} \delta_{jl} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \frac{N}{2\pi} dk = \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} |\psi_j|^2 = (\psi, \psi)_{\mathcal{H}^d}.\end{aligned}$$

L'opérateur J est unitaire de $\mathcal{H}^d$ dans $\mathrm{Ran}(J) \subset \mathcal{H}^c$ et isometrique de $\mathcal{H}^d$ dans $\mathcal{H}^c$. $\mathrm{Ran}(J)$ est l'ensemble des fonctions continues par morceaux sur les intervalles introduits pour définir les $\{\chi_j\}_j$. On a pour $\psi \in \mathcal{H}^d$, $\phi \in \mathcal{H}^c$

$$\begin{aligned}\langle J\psi, \phi\rangle_{\mathcal{H}^c} &= \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_j(k) \psi_j \overline{\phi(k)} dk \\ &= \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_j \int_{-\pi}^{\pi} \chi_j(k) \overline{\phi(k)} dk = \langle \psi, J^*\phi\rangle_{\mathcal{H}^d},\end{aligned}$$

avec

$$(J^*\phi)(j) = \int_{-\pi}^{\pi} \chi_j(k)\phi(k) dk = (\phi, \chi_j) \tag{4.47}$$

et combiné avec (4.46)

$$JJ^* = \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} (\cdot, \chi_j)\chi_j.$$

On déduit que l'opérateur JJ^* est le projecteur orthogonal de $\mathcal{H}^c$ sur $\mathrm{Ran}(J)$, et pour $\psi \in \mathcal{H}^d$,

$$(J^*J\psi)(j) = (\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_l \chi_l, \chi_j) = \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \psi_l (\chi_l, \chi_j) = \psi_j, \qquad J^*J = 1_{\mathcal{H}^d}.$$

On va introduire maintenant l'opérateur "non perturbé" agissant dans l'espace continu. On va d'abord remarquer que :

Remarque 4.3.6. Toutes les quantités que l'on va estimer, qui sont données au lemme 4.2.3, sont exprimées en fonction de $\widehat{v_L}(k)$ où $k \neq 0$. Et d'après (4.9) puisque $k \neq 0$ on a

$$\widehat{v_L}(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{N}mx'} v^r_{\text{eff}}(x')dx' = \hat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{N}m). \tag{4.48}$$

On va donc travailler maintenant directement avec $\hat{v}^r_{\text{eff}}$.

On rappelle E_G est défini en (4.16),

$$E_G = \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j) + \frac{1}{2}\frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} S_v(n_1) \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \frac{2\pi}{N}\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1), \tag{4.49}$$

E_G s'exprime en fonction des $\{\varepsilon_b\}_b$ définies en 4.1 qui sont des fonctions du vecteur d'onde, décrivant le spectre associé au problème d'une particule sur le cercle avec potentiel périodique. On introduit les fonctions continues $\{\widetilde{\varepsilon}_b\}_b$, définis sur $[-\pi, \pi]$ qui sont les fonctions décrivant le spectre associé au problème d'une particule sur la ligne avec potentiel périodique.

Remarque 4.3.7. Puisque il n'y a que deux bandes et qu'elles sont séparées par une lacune non nulle (d'après l'hypothèse I) de la section 4.2.1), $\widetilde{\varepsilon}_v$ et $\widetilde{\varepsilon}_c$ sont analytiques sur $[-\pi, \pi]$ (voir par exemple [RS4, Th. XIII.89]).

Et on a en tout point $k_j = \frac{2\pi}{N}j$ et tout $N > 0$ fixé,

$$\widetilde{\varepsilon}_v(k_j) = \varepsilon_v(k_j).$$

Soit

$$\widetilde{E}_G := \int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k)dk + \frac{1}{2}\frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} S_v(n_1) \int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k'' + \frac{2\pi}{N}n_1)dk''dk'. \tag{4.50}$$

Ces quantités sont bien définies, on a vu au lemme 4.2.3 que les sommes sur n_1 sont bornées, on peut prendre le supremum sur n_1 du terme de potentiel (qui est fini d'après les propriétés de v^r_{eff} données en annexe A.1), et voir que $S_v \in \ell^1$ pour s'en persuader.

On rappelle le terme de potentiel donné au lemme 4.2.3 et en utilisant la remarque 4.3.6 il s'écrit :

$$v_{k'_v k_c k'_c k_v} - v_{k_c k'_v k'_c k_v} = \\ \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\left(\sum_{n_1\in\mathbb{Z}^*} S_c(n_1)\hat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{N}n_1) - \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} \widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k - k' + \frac{2\pi}{N}n_1\right)\right).$$

L'expression ci-dessus donnée au lemme 4.2.3 est établie pour des valeurs discrètes de k mais Comme l'on sait que $\hat{v}^r_{\text{eff}}$ est une fonction continue pour tout $k \in \mathbb{R}^*$, la fonction précédente peut être étendue et vue comme une fonction continue sur $\mathbb{R}^*$. On introduit maintenant la fonction continue sur $\mathbb{R}^*$:

$$\hat{w}(k - k') := \frac{L}{2\pi}(v_{k'_v k_c k'_c k_v} - v_{k_c k'_v k'_c k_v}). \tag{4.51}$$

On peut écrire l'Hamiltonien agissant sur $\mathcal{H}^d$:

$$H_{\text{ex}} = \mathcal{D}_d(k_l) + \lambda\hat{w}_{d*} \tag{4.52}$$

où le potentiel est un opérateur de convolution défini par :

$$(\hat{w}_{d*}\psi)(k_l) := \frac{2\pi}{N} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{w}(k_l - k_j)\psi(k_j). \tag{4.53}$$

On va introduire maintenant un Hamiltonien agissant dans $L^2(-\pi,\pi)$ et qui, on va le voir, sera le modèle non perturbé pour H_{ex} dans la limite N grand. On définit les fonctions continues :

$$\widetilde{E_v}(k) := \tilde{\varepsilon}_v(k) - \lambda \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} S_v(n_1) \int_{-\pi}^{\pi} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N} n_1) dk'$$
$$\widetilde{E_c}(k) := \tilde{\varepsilon}_c(k) - \lambda \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1\in\mathbb{Z}^*} S_c(n_1) \int_{-\pi}^{\pi} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N} n_1) dk'$$

où $\tilde{\varepsilon}_v(k)$, $\tilde{\varepsilon}_c(k)$ sont ici les fonctions réelles analytiques obtenues en faisant tendre N vers l'infini, dans le problème à une particule sur le cercle de longueur N avec potentiel périodique, (voir remarque 4.3.7). Soit la fonction

$$\mathcal{D}(k) := \widetilde{E}_c(k) - \widetilde{E}_v(k). \tag{4.54}$$

On définit l'Hamiltonien "continu" agissant sur $\mathcal{H}^c = L^2((-\pi,\pi))$:

$$H_{\text{exc}} := \mathcal{D}(k) + \lambda \hat{w}_*, \tag{4.55}$$

où $\hat{w}_*$ est l'opérateur de convolution défini sur $L^2((-\pi,\pi))$ par

$$(\hat{w}_*\psi)(k) := \int_{-\pi}^{\pi} \hat{w}(k - k')\psi(k')dk'. \tag{4.56}$$

L'opérateur H_{exc} est borné auto-adjoint car on a va voir que $\mathcal{D}$ est symétrique borné et on sait que $\hat{w}_*$ est un opérateur à noyau avec fonction réelle $\hat{w} \in L^2(-\pi,\pi)$. On introduit les matrices suivantes :

$$M_d := \begin{pmatrix} \frac{2\pi}{N} E_G & 0 \\ 0 & \frac{2\pi}{N}\delta_{kk'} E_G + H_{\text{ex}} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \widetilde{M} := \begin{pmatrix} \widetilde{E}_G & 0 \\ 0 & \delta_{kk'}\widetilde{E}_G + H_{\text{exc}} \end{pmatrix},$$

Le résultat principal de cette section est le suivant :

Théorème 4.3.8. *Soit $\lambda > 0$ et z tel que $z \neq \widetilde{E}_G$, $d(z, \sigma(\delta_{kk'}\widetilde{E}_G)) > 0$ et $d(z, \sigma(H_{\text{exc}})) > 0$. Il existe $N_0 > 0$ et deux constantes $C_G > 0$ et C tels que pour $N > N_0$, alors*

$$z \in \rho(M_d), \quad z \in \rho(\widetilde{M}),$$

et

$$\|J(M_d - z)^{-1} - (\widetilde{M} - z)^{-1}J\| \leq \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\frac{C_G}{d(z, \sigma(\delta_{kk'}\widetilde{E}_G))^2} + \frac{C}{d(z, \sigma(H_{\text{exc}}))^2} \right).$$

Démonstration. On utilise directement les propositions 4.3.10 et 4.3.14. □

Dans le reste de cette section on va établir les propositions 4.3.10 et 4.3.14. On établit d'abord un lemme préliminaire et important car il va être utilisé dans plusieurs des estimations qui suivent.

Lemme 4.3.9. *Il existe $N_0 > 0$ et quatre constantes $C_1 > 0$, $C_2 > 0$, $C_3 > 0$, $C_4 > 0$ telles que pour tout $N > N_0$, $0 < \alpha < 1$ et $k \neq k' \in [-\pi, \pi)$, $k_j \neq k_l \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{N}\mathbb{Z}$ on ait les propriétés suivantes :*

i) Si $|k' - k| \leq \frac{2\pi}{N}$:

$$\begin{aligned}&\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k)\right)\right| \leq \\ &\leq C_1(|\ln(\frac{2\pi}{N})| + |\ln|k' - k||)\left(\chi_j(k')\chi_j(k) + \chi_j(k')\chi_{j+1}(k) + \chi_j(k')\chi_{j-1}(k)\right).\end{aligned}$$

ii) Si $\frac{2\pi}{N} < |k' - k| \leq \frac{2\pi}{N^\alpha}$:

$$\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k)\right)\right| \leq C_2\chi_j(k')\chi_l(k).$$

iii) Si $\frac{2\pi}{N^\alpha} < |k' - k + \frac{2\pi}{N}n_1| \leq 2\pi$ avec $|n_1| \leq N$,

$$\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right)\right| \leq C_3\frac{1}{N^{1-\alpha}}\chi_j(k')\chi_l(k).$$

iv) Si $|n_1| > N$, pour tout $k, k' \in [-\pi, \pi)$:

$$\begin{aligned}&\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right)\right| \leq \\ &\leq \frac{4\pi}{N}\chi_j(k')\chi_l(k)C_4.\end{aligned}$$

Démonstration. Pour i), si $|k_j - k_l| > \frac{2\pi}{N}$ l'inégalité est trivialement vérifiée sinon l ne peut prendre que les valeurs $j, j+1, j-1$. D'après les propriétés de $\hat{v}^r_{\text{eff}}$ données en annexe A.1, pour $0 < |x| < 1/2$ il existe une constante C_1 telle que $|\hat{v}^r_{\text{eff}}(x)| \leq C_1|\ln|x||$. Alors il existe un $N_0 > 0$ tel que pour $N > N_0$,

$$\begin{aligned}&\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k)\right)\right| \leq \\ &\leq C_1(|\ln(k_j - k_l)| + |\ln|k' - k||)\left(\chi_j(k')\chi_j(k) + \chi_j(k')\chi_{j+1}(k) + \chi_j(k')\chi_{j-1}(k)\right) \\ &\leq C_1(|\ln(\frac{2\pi}{N})| + |\ln|k' - k||)\left(\chi_j(k')\chi_j(k) + \chi_j(k')\chi_{j+1}(k) + \chi_j(k')\chi_{j-1}(k)\right).\end{aligned}$$

Pour ii), on utilise la propriété de l'annexe A.1 qui donne que pour x assez petit, il existe une constante $C_2 > 0$ telle que $\hat{v}^r_{\text{eff}}(x) = \frac{C_2}{2}\ln|x| + \mathcal{O}(1)$, alors

$$\begin{aligned}&\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k)\right)\right| \leq \\ &\leq \chi_j(k')\chi_l(k)\left(\frac{C_2}{2}\left|\ln|k_j - k_l| - \ln|k' - k|\right| + \mathcal{O}(1)\right) \qquad \text{(pour } N \text{ assez grand)} \\ &= \chi_j(k')\chi_l(k)\left(\frac{C_2}{2}\left|\ln|\frac{k_j - k_l}{k' - k}|\right| + \mathcal{O}(1)\right)\end{aligned}$$

On remarque que l'hypothèse $2\pi/N < |k' - k|$ entraîne $j \neq l$. Pour $k' \in [k_j, k_{j+1})$ et $k \in [k_l, k_{l+1})$, soit $n := j - l$, pour $n \neq 1$

$$\begin{aligned}&|\frac{k_j - k_l}{k' - k}| = |\frac{n\frac{2\pi}{N}}{k' - k_j + n\frac{2\pi}{N} + k_l - k}| \\ &\frac{|n|}{|n| + 1} < |\frac{k_j - k_l}{k' - k}| < \frac{|n|}{|n| - 1}\end{aligned}$$

et pour le cas $n = 1$, ceci implique que $2\pi/N < |k - k'| \leq 2 \times 2\pi/N$ et donc

$$\frac{1}{2} \leq |\frac{k_j - k_l}{k' - k}| < 1.$$

Ainsi,

$$\left|\ln |\frac{k_j - k_l}{k' - k}|\right| \leq \ln 2.$$

On obtient donc

$$\begin{aligned}\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k)\right)\right| &\leq \chi_j(k')\chi_l(k)(\frac{C_2}{2}\ln 2 + \mathcal{O}(1)) \\ &\leq C_2\chi_j(k')\chi_l(k).\end{aligned}$$

Pour *iii*), on utilise que $\hat{v}^r_{\text{eff}} \in C^1$ en dehors des singularités. On sait que $|k' - k| \in [-2\pi, 2\pi)$ et de même pour $|k_j - k_l|$, donc dans le cas $|n_1| \leq N$ on a toujours une singularité pour le potentiel. On utilise le théorème des accroissements finis pour $k' \in [k_j, k_{j+1})$ et $k \in [k_l, k_{l+1})$:

$$\hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N}n_1) = \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) + \left((k' - k) - (k_j - k_l)\right)(\hat{v}^r_{\text{eff}})'(\tilde{k}' - \tilde{k} + \frac{2\pi}{N}n_1)$$

où $\tilde{k}' \in (k_j, k_{j+1})$, $\tilde{k} \in (k_l, k_{l+1})$. Finalement on utilise que pour $0 < |x| < 4\pi$, on peut trouver $C_3 > 0$ tel que $|(\hat{v}^r_{\text{eff}})'(x)| \leq \frac{C_3}{4}\frac{1}{|x|}$ (voir annexe A.1). On obtient la majoration suivante :

$$\begin{aligned}&\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right)\right| \leq \\ &\leq 2\frac{2\pi}{N}\chi_j(k')\chi_l(k)\sup_{\tilde{k}',\tilde{k}}|(\hat{v}^r_{\text{eff}})'(\tilde{k}' - \tilde{k} + \frac{2\pi}{N}n_1)| \\ &\leq 2\frac{2\pi}{N}\chi_j(k')\chi_l(k)\sup_{|x|\in(\frac{2\pi}{N^\alpha} - \frac{2\pi}{N}, 2\pi)}|(\hat{v}^r_{\text{eff}})'(x)| \\ &\leq \frac{2\pi}{N}\chi_j(k')\chi_l(k)\frac{N^{1+\alpha}}{N - N^\alpha}\frac{1}{2\pi}\frac{C_3}{2} \leq \chi_j(k')\chi_l(k)\frac{1}{N^{1-\alpha}}\frac{1}{2\pi}C_3,\end{aligned}$$

pour N assez grand.

Pour $|n_1| > N$ la fonction $(\hat{v}^r_{\text{eff}})'$ est borné par une constante $C_4 > 0$, ce qui donne *iv*). □

Le terme E_G et M_G

On estime dans cette sous-section la différence entre la résolvante associée à la matrice diagonale

$$M_G = \begin{pmatrix} E_G & 0 \\ 0 & \delta_{kk'}E_G \end{pmatrix},$$

agissant dans l'espace discret $\ell^2(N + 1)$ et la résolvante associé à un opérateur agissant dans l'espace continu $\mathbb{C} \oplus \mathbb{C}, L^2(-\pi, \pi))$ que l'on défini plus loin. On va voir que le terme E_G qui est présent dans la partie diagonale de M, grandit comme N quand N tend vers l'infini.

On rappelle que E_G est défini en 4.2.3. On définit les opérateurs de multiplication $v_{dg}(n_1)$, présent dans l'expression de E_G, appliqué sur une fonction $\psi \in \mathcal{H}^d$

$$(v_{dg}(n_1)\psi)(k_m) := \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\frac{2\pi}{N}\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{L}n_1)\psi(k_m)$$

et les opérateurs de multiplication $v_G(n_1)$ sur $L^2([-\pi,\pi))$,

$$(v_G(n_1)\psi)(k) := \int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k'-k''+\frac{2\pi}{L}n_1)dk''dk'\psi(k)$$

Les fonctions associées à ces opérateurs, aussi notées $v_{dg}(n_1)$ et $v_G(n_1)$ respectivement, sont constantes. On écrit d'après (4.49) et (4.50)

$$\begin{aligned} E_G &= \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j) + \frac{1}{2}\frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n_1\in\mathbb{Z}} S_v(n_1)v_{dg}(n_1), \\ \widetilde{E}_G &= \int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k)dk + \frac{1}{2}\frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n_1\in\mathbb{Z}} S_v(n_1)v_G(n_1). \end{aligned} \tag{4.57}$$

Soit les opérateurs agissant sur $\mathcal{H}^d$ et $\mathcal{H}^c$ respectivement :

$$M_{GN} := \delta_{kk'}E_G, \qquad \widetilde{M}_{GN} := \delta_{kk'}\widetilde{E}_G.$$

Dans le diagramme suivant on a la correspondance entre problème discret et continu :

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H}^d & \xrightarrow{M_{GN}} & \mathcal{H}^d \\ J\downarrow & & \downarrow J \\ \mathcal{H}^c & \xrightarrow{\widetilde{M}_{GN}} & \mathcal{H}^c \end{array}.$$

Enfin on rappelle la définition donnée en (4.33) et on définit $\widetilde{M}_G$

$$M_G = \begin{pmatrix} E_G & 0 \\ 0 & M_{GN} \end{pmatrix}, \qquad \widetilde{M}_G := \begin{pmatrix} \widetilde{E}_G & 0 \\ 0 & \widetilde{M}_{GN} \end{pmatrix}. \tag{4.58}$$

On va établir la proposition suivante :

Proposition 4.3.10. *Soit $\lambda > 0$ et $d(z,\sigma(\widetilde{M}_G)) > 0$, il existe $N_0 > 0$ et une constante $C_G > 0$ telle que pour $N > N_0$,*

$$z \in \rho(\frac{2\pi}{N}M_G)$$

et

$$\|J(\frac{2\pi}{N}M_G - z)^{-1} - (\widetilde{M}_G - z)^{-1}J\| \leq \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}\frac{C_G}{d(z,\sigma(\widetilde{M}_{GN}))^2}.$$

Remarque 4.3.11. Ce resultat entraîne la convergence en norme des résolvantes associées à $2\pi M_G/N$ et $\widetilde{M}_G$ car les lemmes 4.3.12 et 4.3.13 montrent que $2\pi E_G/N$ converge uniformément vers $\widetilde{E}_G$ quand N tend vers l'infini.

Démonstration. On définit sur $\mathcal{H}^c$

$$W := J\frac{2\pi}{N}M_{GN}J^* - \widetilde{M}_{GN}JJ^*$$

Pour $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$, on a

$$\begin{aligned} &(\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1}WJ(\frac{2\pi}{N}M_{GN} - z)^{-1} = \\ &= (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1}\left(J(\frac{2\pi}{N}M_{GN} - z) - (\widetilde{M}_{GN} - z)J\right)(\frac{2\pi}{N}M_{GN} - z)^{-1} \\ &= (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1}J - J(\frac{2\pi}{N}M_{GN} - z)^{-1}, \end{aligned}$$

ce qui entraine

$$(\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} J = \left((\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W + 1 \right) J (\frac{2\pi}{N} M_{GN} - z)^{-1} \tag{4.59}$$

et si

$$\|(\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W\| \leq \frac{1}{d(z, \widetilde{M}_{GN})} \|W\| < 1, \tag{4.60}$$

alors on peut écrire

$$(\frac{2\pi}{N} M_{GN} - z)^{-1} = J^* \left((\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W + 1 \right)^{-1} (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} J. \tag{4.61}$$

D'après les lemmes 4.3.12 et 4.3.13, il existe N_0 et une constante $C_{vg} > 0$ tels que pour $N > N_0$

$$\|W\| \leq \frac{2\pi}{N} \sup_{k \in [-\pi, \pi)} |\widetilde{\varepsilon}'_v(k)| + \frac{C_{vg}}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} |S_v(n_1)| \leq \frac{C_G}{\sqrt{N}}.$$

En effet, $\widetilde{\varepsilon}_v$ est analytique sur un domaine compact donc borné et est indépendant de N. La quantité S_v est borné uniformément en N et sommable par rapport à n_1 d'après la remarque 4.2.2 Ainsi pour $d(z, \widetilde{M}_{GN}) > 0$ il existe $N_1 \geq N_0$ tel que la condition (4.60) est vraie pour tout $N \geq N_1$. Alors la relation (4.61) est vraie, ce qui entraîne que $z \in \rho(\frac{2\pi}{N} M_{GN})$. En reprenant (4.59) on a :

$$\begin{aligned} &\left((\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W + 1 \right) (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} J - (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} J = \\ &= \left((\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W + 1 \right) J (\frac{2\pi}{N} M_{GN} - z)^{-1}, \end{aligned}$$

ce qui entraîne

$$\begin{aligned} &J (\frac{2\pi}{N} M_{GN} - z)^{-1} = \\ &= (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} J - \left((\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W + 1 \right)^{-1} (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} J. \end{aligned}$$

On choisit $N_2 \geq N_1$,tel que pour tout $N \geq N_2$,

$$2 \left(\frac{2\pi}{N} \sup_{k \in [-\pi, \pi)} |\widetilde{\varepsilon}'_v(k)| + \frac{C_{vg}}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} |S_v(n_1)| \right) \leq d(z, \widetilde{M}_{GN})$$

alors $\|(\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W\| \leq 1/2$ et on a

$$\begin{aligned} &\|J (\frac{2\pi}{N} M_{GN} - z)^{-1} - (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} J\| = \\ &= \| \left((\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W + 1 \right)^{-1} (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} W (\widetilde{M}_{GN} - z)^{-1} \| \\ &\leq 2 \frac{1}{d(z, \sigma(\widetilde{M}_{GN}))^2} \frac{C_G}{N^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

□

Lemme 4.3.12. *Pour tout $N \in \mathbb{N}^*$ on a l'estimation suivante*

$$\| \int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k) dk J J^* - J \frac{2\pi}{N} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j) J^* \| \leq \frac{2\pi}{N} \sup_{k \in [-\pi, \pi)} \left| \widetilde{\varepsilon}'_v(k) \right|.$$

Démonstration. Pour $\phi \in L^2([-\pi,\pi))$

$$\begin{aligned}
&(\int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k')dk' JJ^* - J\frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j)J^*)\phi(k) = \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k')dk' \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_j(k)(\phi,\chi_j) - \frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_j(k) \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j)(J^*\phi)(j) \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \phi(k') \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_j(k)\chi_j(k') \left(\int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k')dk' - \frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j) \right) dk'.
\end{aligned}$$

On peut voir cet opérateur comme un opérateur de noyau intégral

$$g(k,k') := \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_j(k)\chi_j(k') \left(\int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k')dk' - \frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j) \right)$$

qui est symétrique. La norme Schur-Holmgren donne :

$$\| \int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k)dkJJ^* - J\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j)J^* \|_{SH} = \sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \left| g(k,k') \right| dk'.$$

Premièrement, puisque $\widetilde{\varepsilon}_v$ est analytique donc continuement différentiable, on utilise le théorème des accroissements finis,

$$\begin{aligned}
\left| \int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{\varepsilon}_v(k')dk' - \frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \varepsilon_v(k_j) \right| &= \left| \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \left(\int_{k_j}^{k_{j+1}} \widetilde{\varepsilon}_v(k')dk' - \frac{2\pi}{N}\varepsilon_v(k_j) \right) \right| \\
&\leq \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \left| \frac{1}{2}\left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 \sup_{\tilde{k}\in[k_j,k_{j+1})} |\widetilde{\varepsilon}_v'(\tilde{k})| \right| \\
&\leq \frac{1}{2}\frac{(2\pi)^2}{N} \sup_{k\in[-\pi,\pi)} |\widetilde{\varepsilon}_v'(k)|.
\end{aligned}$$

Deuxièmement, on a

$$\begin{aligned}
\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \left| g(k,k') \right| dk' &\leq \frac{(2\pi)^2}{N} \sup_{k\in[-\pi,\pi)} |\widetilde{\varepsilon}_v'(k)| \sup_k \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_j(k) \int_{-\pi}^{\pi} \chi_j(k')dk' \\
&\leq \frac{(2\pi)^2}{N} \sup_{k\in[-\pi,\pi)} |\widetilde{\varepsilon}_v'(k)|,
\end{aligned}$$

d'où le résultat. □

Lemme 4.3.13. *Il existe N_0 et une constante C_{vg} tels que pour tout $N \geq N_0$ on a*

$$\sup_{n_1\in\mathbb{Z}} \| J\frac{2\pi}{N} v_{dg}(n_1)J^* - v_G(n_1)JJ^* \| \leq \frac{C_{vg}}{N^{\frac{1}{2}}}$$

Démonstration. On a pour $\psi \in \mathcal{H}^c$

$$\begin{aligned}(Jv_{dg}(n_1)J^*\psi)(k) &= \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_m(k) \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \frac{2\pi}{N} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) \int_{-\pi}^{\pi} \chi_m(k')\psi(k')dk' \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_m(k) \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \frac{2\pi}{N} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1)\chi_m(k')\psi(k')dk'\end{aligned}$$

et si l'on introduit

$$\begin{aligned}f(n_1) &:= \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \left(\left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \int_{k_j}^{k_{j+1}} \int_{k_l}^{k_{l+1}} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k'' + \frac{2\pi}{N}n_1)dk''dk' \right) \\ &= \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \int_{k_l}^{k_{l+1}} \left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k'' + \frac{2\pi}{N}n_1) \right) dk''dk'\end{aligned}$$

on obtient

$$(J\frac{2\pi}{N}v_{dg}(n_1)J^*\psi)(k) - (v_G(n_1)JJ^*\psi)(k) = \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_m(k)\chi_m(k')f(n_1)\psi(k')dk'$$

qui est un opérateur à noyau. On estime la norme Shur-Holmgren,

$$\begin{aligned}&\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_m(k)\chi_m(k')|f(n_1)|dk' = |f(n_1)| \\ &= \sup_{k'} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_m(k)\chi_m(k')|f(n_1)|dk.\end{aligned}$$

On écrit f sous la forme

$$f(n_1) = \frac{2\pi}{N} \sum_{j,l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \int_{k_l}^{k_{l+1}} \chi_j(k')\chi_l(k) \left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N}n_1) \right) dkdk',$$

et on procède de la manière suivante : pour $n_1 = 0$, on sépare en trois parties : $|k - k'| \leq \frac{2\pi}{N}$, $\frac{2\pi}{N} < |k - k'| \leq \frac{2\pi}{N^\alpha}$, $|k - k'| \geq \frac{2\pi}{N^\alpha}$. D'après $i)$ du lemme 4.3.9, pour $|k - k'| \leq \frac{2\pi}{N}$, il existe N_0 tel que pour $N > N_0$

$$\begin{aligned}|f(0)| &\leq \frac{2\pi}{N} \sum_{\substack{j=-\frac{N}{2} \\ l=\{j-1,j,j+1\}}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \int_{k_l}^{k_{l+1}} \chi_j(k')\chi_l(k) \left(|\ln \frac{2\pi}{N}| + |\ln(k' - k)| \right) dkdk' \\ &\leq \frac{2\pi}{N} N 3C_1 \frac{N}{2\pi} \left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 |\ln \frac{2\pi}{N}| + \frac{2\pi}{N} \sum_{\substack{j=-\frac{N}{2} \\ l=\{j-1,j,j+1\}}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \int_{k_l}^{k_{l+1}} \chi_j(k')\chi_l(k)|\ln(k' - k)|dkdk'.\end{aligned}$$

On a pour N assez petit $|k-k'| \leq \frac{2\pi}{N} \leq 1$ et

$$\begin{aligned}\int_{k_j}^{k_{j+1}} |\ln|k'-k||dk' &= -\int_{k_j}^{k_{j+1}} \ln|k'-k|dk' \\ &= -(k_{j+1}-k)\ln|k_{j+1}-k| + k_{j+1} + (k_j-k)\ln|k_j-k| - k_j \\ &\leq \frac{2\pi}{N} + \frac{2\pi}{N}|\ln|k_{j+1}-k|| + \frac{2\pi}{N}|\ln|k_j-k||\end{aligned}$$

et si l'on intègre par rapport à k on en déduit

$$\int_{k_l}^{k_{l+1}}\int_{k_j}^{k_{j+1}} |\ln|k'-k||dk'dk \leq \left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 + 2\left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 |\ln\frac{2\pi}{N}|$$

On obtient donc pour $|k-k'| \leq \frac{2\pi}{N}$

$$|f(0)| \leq 6\pi C_1\left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln\frac{2\pi}{N}|\right)$$

D'après *ii*) du lemme 4.3.9, pour $\frac{2\pi}{N} < |k-k'| \leq \frac{2\pi}{N^\alpha}$ et en utilisant qu'ici

$$\sum_{j,l=-N/2}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k') = \sum_{j=-N/2}^{\frac{N}{2}-1}\sum_{l=j-\frac{2N}{N^\alpha}}^{j+\frac{2N}{N^\alpha}} \chi_l(k)\chi_j(k'),$$

on obtient dans ce cas

$$\begin{aligned}|f(0)| &\leq \frac{2\pi}{N}\frac{N}{2\pi}\frac{4\pi}{N^\alpha}C_2 2\pi \\ &\leq 2C_2(2\pi)^2\frac{1}{N^\alpha}.\end{aligned}$$

De *iii*) du lemme 4.3.9, pour $|k-k'| \geq \frac{2\pi}{N^\alpha}$

$$\begin{aligned}|f(0)| &\leq \frac{2\pi}{N}N^2\frac{N}{2\pi}\left(\frac{2\pi}{N}\right)^2\frac{C_3}{N^{1-\alpha}} \\ &\leq (2\pi)^2\frac{C_3}{N^{1-\alpha}}.\end{aligned}$$

Et donc si l'on choisit $\alpha = 1/2$, pour $N > N_0$ et $k, k' \in (-\pi, \pi)$

$$|f(0)| \leq 6\pi C_1\left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln\frac{2\pi}{N}|\right) + (2C_2 + C_3)(2\pi)^2\frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}.$$

Pour les cas où $n_1 \neq 0$, on procède de la même manière, c'est-à-dire que l'on découpe l'intégrale en trois parties, la seule différence est que la singularité n'est pas en zéro mais en $2\pi n_1/N$. On obtient la même borne que pour $n_1 = 0$ pour l'estimation de la différence des potentiels. □

La partie "exciton"

On va maintenant étudier le terme H_{ex}. On rappelle l'Hamiltonien agissant dans $\mathcal{H}^d$

$$H_{\text{ex}} = \mathcal{D}_d(k_l) + \lambda\hat{w}_{d*} \tag{4.62}$$

où $\mathcal{D}_d$ est un opérateur de multiplication défini en (4.35) et le potentiel est un opérateur de convolution défini en (4.53). On rappelle l'Hamiltonien agissant dans $\mathcal{H}^c$

$$H_{\text{exc}} = \mathcal{D}(k) + \lambda \hat{w}_*, \tag{4.63}$$

où $\mathcal{D}$ est l'opérateur de multiplication défini en (4.54) et $\hat{w}_*$ est l'opérateur de convolution défini en (4.56). Le principal résultat de cette sous-section est le suivant :

Proposition 4.3.14. *Soit $z \in \rho(H_{\text{exc}})$, il existe $N_1(z) > 0$ et une constante $C > 0$ tels que pour tout $N > N_1(z)$,*

$$z \in \rho(H_{\text{ex}})$$

et

$$\|J(H_{\text{ex}} - z)^{-1} - (H_{\text{exc}} - z)^{-1} J\| \leq C \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{d(z, \sigma(H_{\text{exc}}))^2}.$$

On établit d'abord quelques propriétés de la fonction $\mathcal{D}$ qui seront utiles pas la suite :

Lemme 4.3.15. *On a les propriétés suivantes :*

i) La fonction $\mathcal{D}$ est continue sur $[-\pi, \pi]$, donc bornée.

ii) Pour N fixé et pour tout $n > 0$, la dérivée n-ième de $\mathcal{D}$ est continue sur $[-\pi/N, \pi/N]$.

iii) Pour N fixé, $\lambda_0 > 0$ assez petit et pour tout $\lambda < \lambda_0$, la fonction $\mathcal{D}$ est positive et possède un minimum en zéro. La fonction $(\mathcal{D} - \mathcal{D}(0))$ se comporte comme une fonction quadratique autour de zéro uniformement en λ, c'est-à-dire qu'il existe $0 < k_0 < 2\pi/N$ et deux constantes indépendantes de λ : $c_{d1}, c_{d2} > 0$ telles que l'on a pour $|k| \leq k_0$, $c_{d1} k^2 \leq \mathcal{D}(k) - \mathcal{D}(0) \leq c_{d2} k^2$.

Démonstration. $\mathcal{D}$ est composée de deux parties :

- Une partie qui est la différence $\tilde{\varepsilon}_c - \tilde{\varepsilon}_v$, indépendante de N et λ, et qui est analytique sur $[-\pi, \pi]$ d'après la remarque 4.3.7.
- Une partie potentielle contenant la somme

$$\mathcal{V}(k) := \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} (S_v(n_1) - S_c(n_1)) \widetilde{v}(k, n_1) \tag{4.64}$$

où S_v, S_c sont des fonctions sommables d'après la remarque 4.2.2.

Le première partie ne pose pas de problème, on va donc examiner la partie potentielle. On définit

$$\begin{aligned} \widetilde{v}(k, n_1) &= \int_{-\pi}^{\pi} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N} n_1) dk' \\ &= \int_{-\pi - k + \frac{2\pi}{N} n_1}^{\pi - k + \frac{2\pi}{N} n_1} \hat{v}^r_{\text{eff}}(x) dx, \end{aligned}$$

qui est bien définie car $\hat{v}^r_{\text{eff}}$ est intégrable localement sur $\mathbb{R}$. Pour la continuité, soit $p, q \in [-\pi, \pi)$,

$$\begin{aligned} \widetilde{v}(p, n_1) - \widetilde{v}(q, n_1) &= \int_{-\pi - p + \frac{2\pi}{N} n_1}^{-\pi - q + \frac{2\pi}{N} n_1} \hat{v}^r_{\text{eff}}(x) dx + \int_{\pi - q + \frac{2\pi}{N} n_1}^{\pi - p + \frac{2\pi}{N} n_1} \hat{v}^r_{\text{eff}}(x) dx \\ &= \int_0^{p-q} \hat{v}^r_{\text{eff}}(X - \pi - p + \frac{2\pi}{N} n_1) dX + \int_0^{q-p} \hat{v}^r_{\text{eff}}(X + \pi - q + \frac{2\pi}{N} n_1) dX, \end{aligned}$$

et en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned}|\int_0^{p-q} \hat{v}^r_{\text{eff}}(X-\pi-p+\frac{2\pi}{N}n_1)dX|^2 &\leq |p-q|\cdot\int_0^{p-q}|\hat{v}^r_{\text{eff}}(X-\pi-p+\frac{2\pi}{N}n_1)|^2dX\\ &\leq |p-q|\cdot\int_{\mathbb{R}}|\hat{v}^r_{\text{eff}}(X)|^2dX\end{aligned}$$

et comme $\hat{v}^r_{\text{eff}}$ est de carré sommable sur $\mathbb{R}$, voir annexe A.1, ceci tend vers zéro quand p tend vers q, uniformément en n_1. On rappelle que $\mathcal{D}$ contient l'expression (4.64) où $S_v(n_1), S_c(n_1)$ sont des fonctions sommables d'après la remarque 4.2.2. $\mathcal{D}$ est donc continue.

Pour *ii*), on va utiliser une autre expression pour $\mathcal{V}$:

$$\begin{aligned}\mathcal{V}(k) &= \sum_{n_1\in\mathbb{Z}}(S_v(n_1)-S_c(n_1))\widetilde{v}(k,n_1)\\ &= \sum_{n_1>0}(S_v(n_1)-S_c(n_1))\left(\widetilde{v}(k,n_1)+\widetilde{v}(k,-n_1)\right)+(S_v(0)-S_c(0))\widetilde{v}(k,0)\\ &= \sum_{\substack{n_1>0\\ n_1\neq N/2}}(S_v(n_1)-S_c(n_1))\left(\widetilde{v}(k,n_1)+\widetilde{v}(k,-n_1)\right)+(S_v(0)-S_c(0))\widetilde{v}(k,0)+\\ &\quad+(S_v(\frac{N}{2})-S_c(\frac{N}{2}))\int_{-2\pi-k}^{2\pi-k}\hat{v}^r_{\text{eff}}(x)dx,\end{aligned}$$

car S_v et S_c sont des fonctions paires et

$$\widetilde{v}(k,N/2)+\widetilde{v}(k,-N/2)=\int_{-k}^{2\pi-k}\hat{v}^r_{\text{eff}}(x)dx+\int_{-2\pi-k}^{-k}\hat{v}^r_{\text{eff}}(x)dx=\int_{-2\pi-k}^{2\pi-k}\hat{v}^r_{\text{eff}}(x)dx.$$

On va donner une expression pour la dérivée n-ième de $\mathcal{V}$, $n\geq 1$. Sachant que la fonction $\hat{v}^r_{\text{eff}}$ est C^∞ sur $\mathbb{R}^*$, voir annexe A.1, on peut écrire pour tout $n_1\in\mathbb{Z}$ et pour $k\neq -\pi+\frac{2\pi n_1}{N}$, $k\neq\pi+\frac{2\pi n_1}{N}$:

$$\widetilde{v}^{(n)}(k,n_1)=(-1)^n\left[(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(\pi-k+\frac{2\pi}{N}n_1)-(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(-\pi-k+\frac{2\pi}{N}n_1)\right],$$

et donc $\widetilde{v}^{(n)}(\cdot,n_1)$ est C^∞ pour $k\notin\left\{\frac{2\pi}{N}m\right\}_{m\in\mathbb{Z}}$. Ceci est vrai uniformement en $n_1\in\mathbb{Z}\setminus\{\pm N/2\}$, car pour tout $k\notin\left\{\frac{2\pi}{N}m\right\}_{m\in\mathbb{Z}}$ et $-\pi//N\leq h\leq\pi/N$ on a

$$\begin{aligned}&|(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(-\pi-k-h+\frac{2\pi}{N}n_1)-(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(-\pi-k+\frac{2\pi}{N}n_1)|\leq|\int_k^{k+h}|(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n)}(-\pi+\frac{2\pi}{N}n_1-u)|du|\\ &\leq h\cdot\sup_{|u|\leq\frac{\pi}{N}}|(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n)}(-\pi+\frac{2\pi}{N}n_1-u)|\\ &\leq h\cdot|(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n)}(\frac{\pi}{N})|,\end{aligned}\tag{4.65}$$

en effet, $|\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n)}|$ est croissante sur $\mathbb{R}^+$ et décroissante sur $\mathbb{R}^-$ (voir annexe A.1) et pour $n_1\neq N/2$ on a

$$|-\pi+\frac{2\pi}{N}n_1|\geq\frac{2\pi}{N},\text{ et donc }|-\pi+\frac{2\pi}{N}n_1-u|\geq\left||-\pi+\frac{2\pi}{N}n_1|-|u|\right|\geq\frac{\pi}{N}.$$

Comme S_v et S_c sont des fonctions sommables, on peut donc écrire pour $k \in [-\pi/N, \pi/N]$ et $k \neq 0$

$$\mathcal{V}^{(n)}(k) = \sum_{\substack{n_1>0 \\ n_1\neq N/2}} (S_v(n_1) - S_c(n_1)) \left(\widetilde{v}^{(n)}(k,n_1) + \widetilde{v}^{(n)}(k,-n_1)\right) + (S_v(0) - S_c(0))\widetilde{v}^{(n)}(k,0) +$$
$$+ (-1)^n (S_v(\frac{N}{2}) - S_c(\frac{N}{2})) \left((\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(2\pi - k) - (\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(2\pi + k)\right). \tag{4.66}$$

On va maintenant montrer que $\mathcal{V}^{(n)}$ est aussi continue au point $k = 0$. soit $k \in [-\pi/N, \pi/N]$ et $n_1 \neq N/2$ alors en utilisant les mêmes arguments que pour (4.65) on a

$$|(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(-\pi - k + \frac{2\pi}{N}n_1) - (\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n-1)}(-\pi + \frac{2\pi}{N}n_1)| \leq |\int_0^k |(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n)}(-\pi + \frac{2\pi}{N}n_1 - u)|du|$$
$$\leq |k| \cdot \sup_{|u|\leq \frac{\pi}{N}} |(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n)}(-\pi + \frac{2\pi}{N}n_1 - u)|$$
$$\leq |k| \cdot |(\hat{v}^r_{\text{eff}})^{(n)}(\frac{\pi}{N})|, \tag{4.67}$$

On en conclut que le pemier terme de (4.66) est continu sur $[-\pi/N, \pi/N]$. Les second et troisième termes sont aussi continus sur cet intervalle, $\mathcal{V}^{(n)}$ est donc continue, ce qui entraine la continuité de $\mathcal{D}^{(n)}$.

Pour *iii*), d'après l'hypothèse *I*) de la section 4.2.1, on a que $\tilde{\varepsilon_c}(k) - \tilde{\varepsilon_v}(k)$ est positive, possède un minimum en zéro et se comporte autour de zéro comme

$$\tilde{\varepsilon_c}(k) - \tilde{\varepsilon_v}(k) = \tilde{\varepsilon_c}(0) - \tilde{\varepsilon_v}(0) + \frac{k^2}{2}(\tilde{\varepsilon_c}''(0) - \tilde{\varepsilon_v}''(0)) + \mathcal{O}(k^3)$$

avec $(\tilde{\varepsilon_c}''(0) - \tilde{\varepsilon_v}''(0)) > 0$. D'après les propriétés de $\tilde{v}$ que l'on vient de voir, on peut écrire pour $|k| \leq \pi/N$ et pour tout $n_1 \neq \pm N/2$

$$\widetilde{v}(k,n_1) = \widetilde{v}(0,n_1) + k\widetilde{v}'(0,n_1) + \frac{k^2}{2}\tilde{v}''(0,n_1) + f(k,n_1)$$

où f est une fonction que l'on peut majorer par

$$|f(k,n_1)| \leq |k^3| \sup_{|p|<\frac{\pi}{N}} |\widetilde{v}'''(p,n_1)| \leq |k^3| C_N$$

avec $C_N > 0$, indépendant de n_1, d'après (4.67). Pour λ assez petit, comme on a

$$\sup_{n_1} |\widetilde{v}(0,n_1)| \leq \sup_{n_1} \int_{-\pi+n_1\frac{2\pi}{N}}^{\pi+n_1\frac{2\pi}{N}} |\hat{v}^r_{\text{eff}}(x)|dx = \int_{-\pi}^{\pi} |\hat{v}^r_{\text{eff}}(x)|dx,$$

alors

$$\frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}} |\sum_{n_1\in\mathbb{Z}} (S_v(n_1) - S_c(n_1))\widetilde{v}(0,n_1)| \leq \frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}} \sup_{n_1} |\widetilde{v}(0,n_1)| \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} |S_v(n_1) - S_c(n_1)| \leq \tilde{\varepsilon_c}(0) - \tilde{\varepsilon_v}(0)$$

et donc $\mathcal{D}(0) > 0$. Comme $\hat{v}^r_{\text{eff}}$ est paire, $\tilde{v}'(0,n_1) = 0$ quel que soit n_1 et $\mathcal{D}'(0) = 0$. Pour λ assez petit on a aussi

$$\frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}} |\sum_{\substack{n_1>0 \\ n_1\neq N/2}} (S_v(n_1) - S_c(n_1))\widetilde{v}''(0,n_1)| \leq \frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}} \sup_{\substack{n_1>0 \\ n_1\neq N/2}} |\widetilde{v}''(0,n_1)| \sum_{\substack{n_1>0 \\ n_1\neq N/2}} |S_v(n_1) - S_c(n_1)|$$
$$\leq \tilde{\varepsilon_c}''(0) - \tilde{\varepsilon_v}''(0)$$

alors $\mathcal{D}''(0) > 0$. Enfin, pour $k \in [-\pi/N, \pi/N]$

$$\mathcal{D}(k) - \mathcal{D}(0) = \mathcal{D}''(0)k^2 + g(k, \lambda)$$

avec

$$|g(k, \lambda)| \leq |k^3| \sup_{|k| \leq \frac{\pi}{N}} |\mathcal{D}'''(k)|$$

et

$$|\mathcal{D}'''(k)| \leq |\tilde{\varepsilon_c}'''(k) - \tilde{\varepsilon_v}'''(k)| + \lambda |\mathcal{V}'''(k)|.$$

La fonction g est donc bornée uniformément en λ pris dans un compact quelconque d'après ce que l'on a vu en *ii*). Pour $\lambda < \lambda_0$ assez petit on peut écrire

$$\begin{aligned} \left| \frac{\mathcal{D}(k) - \mathcal{D}(0)}{k^2} - \mathcal{D}''(0) \right| &\leq \frac{|g(k, \lambda)|}{k^2} \\ &\leq ck, \end{aligned}$$

avec $c > 0$ indépendant de λ. Il existe donc $k_0 > 0$ et $c_{d1}, c_{d2} > 0$ tels que pour tout $|k| \leq k_0$ on a

$$c_{d1} k^2 \leq \mathcal{D}(k) - \mathcal{D}(0) \leq c_{d2} k^2,$$

avec $c_{d1} \leq \mathcal{D}''(0) - ck_0$ et $c_{d2} \leq \mathcal{D}''(0) + ck_0$. □

Preuve de la proposition 4.3.14. On définit sur $\mathcal{H}^c$

$$W := J(H_{\text{ex}} - z)J^* - (H_{\text{exc}} - z)JJ^* = JH_{\text{ex}}J^* - H_{\text{exc}}JJ^*.$$

Pour tout $z \in \rho(H_{\text{exc}}) \cap \rho(H_{\text{ex}})$, on a sur $\mathcal{H}^d$

$$\begin{aligned} &(H_{\text{exc}} - z)^{-1}J - J(H_{\text{ex}} - z)^{-1} = (H_{\text{exc}} - z)^{-1}WJ(H_{\text{ex}} - z)^{-1} \\ &(H_{\text{exc}} - z)^{-1}J = \left((H_{\text{exc}} - z)^{-1}W + 1\right) J(H_{\text{ex}} - z)^{-1} \end{aligned} \tag{4.68}$$

et si

$$\|(H_{\text{exc}} - z)^{-1}W\| < 1, \tag{4.69}$$

alors on peut écrire

$$(H_{\text{ex}} - z)^{-1} = J^* \left((H_{\text{exc}} - z)^{-1}W + 1\right)^{-1} (H_{\text{exc}} - z)^{-1}J. \tag{4.70}$$

Les lemmes 4.3.17 et 4.3.18 montrent que la condition (4.69) est satisfaite pour $z \in \rho(H_{\text{exc}})$ et N assez grand car il existe $N_0(z) > 0$ et $C > 0$ tels que pour tout $N \geq N_0(z)$

$$\|(H_{\text{exc}} - z)^{-1}W\| \leq \|(H_{\text{exc}} - z)^{-1}\| \cdot \|W\| \leq \frac{1}{d(z, \sigma(H_{\text{exc}}))} \frac{C}{N^{\frac{1}{2}}}.$$

Alors pour tout $z \in \rho(H_{\text{exc}})$, si $N \geq N_0(z)$, la relation (4.70) est vraie et en reprenant 4.68

$$\begin{aligned} &\left((H_{\text{exc}} - z)^{-1}W + 1\right) (H_{\text{exc}} - z)^{-1}J - (H_{\text{exc}} - z)^{-1}W(H_{\text{exc}} - z)^{-1}J = \\ &= \left((H_{\text{exc}} - z)^{-1}W + 1\right) J(H_{\text{ex}} - z)^{-1}, \end{aligned}$$

ce qui entraîne

$$J(H_{\text{ex}} - z)^{-1} = (H_{\text{exc}} - z)^{-1}J - \left((H_{\text{exc}} - z)^{-1}W + 1\right)^{-1} (H_{\text{exc}} - z)^{-1}W(H_{\text{exc}} - z)^{-1}J.$$

Si on a

$$\frac{2C}{N^{\frac{1}{2}}} < d(z, \sigma(H_{\text{exc}}))$$

alors $\|(H_{\text{exc}} - z)^{-1}W\| \leq 1/2$, $z \in \rho(H_{\text{ex}})$ et on a sur $\mathcal{H}^c$

$$\begin{aligned}\|J(H_{\text{ex}} - z)^{-1} - (H_{\text{exc}} - z)^{-1}J\| =& \|\left((H_{\text{exc}} - z)^{-1}W + 1\right)^{-1}(H_{\text{exc}} - z)^{-1}W(H_{\text{exc}} - z)^{-1}\| \\ \leq& 2\frac{1}{d(z, \sigma(H_{\text{exc}}))^2}\frac{C}{N^{\frac{1}{2}}}.\end{aligned}$$

□

On montre d'abord :

Lemme 4.3.16. *Pour tout $n_1 \in \mathbb{Z}$ et $k \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{N}\mathbb{Z}$, soit*

$$v_I(k, n_1) := \frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{N}j - k + \frac{2\pi}{N}n_1).$$

Il existe $N_0 > 0$ et une constante $C > 0$ tels que pour tout $N > N_0$,

$$\sup_{n_1} \|Jv_I(\cdot, n_1)J^* - \widetilde{v}(\cdot, n_1)JJ^*\| \leq C\frac{1}{\sqrt{N}}.$$

Démonstration. Soit $\psi \in \mathcal{H}^c$,

$$\begin{aligned}(Jv_I(\cdot, n_1)J^*\psi)(k) =& \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1)\int_{-\pi}^{\pi}\chi_l(k')\psi(k')dk' \\ =& \int_{-\pi}^{\pi}\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_l(k')\frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1)\psi(k')dk'\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}(\widetilde{v}JJ^*\psi)(k) =& \int_{-\pi}^{\pi}\hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)dk''\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_l(k)\int_{-\pi}^{\pi}\chi_l(k')\psi(k')dk' \\ =& \int_{-\pi}^{\pi}\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_l(k)\chi_l(k')\int_{-\pi}^{\pi}\hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)dk''\psi(k')dk'\end{aligned}$$

donc $Jv_I(\cdot, n_1)J^* - \widetilde{v}JJ^*$ est un opérateur integral avec noyau integral $f(k, k')$:

$$\begin{aligned}f(k, k') =& \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_l(k)\chi_l(k')\left(\frac{2\pi}{N}\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \int_{-\pi}^{\pi}\hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)dk''\right) \\ =& \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_l(k)\chi_l(k')\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\int_{k_j}^{k_{j+1}}\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right)dk''\end{aligned}$$

On estime l'opérateur par la norme Schur-Holmgren :

$$\|Jv_I(\cdot,n_1)J^* - \widetilde{v}(\cdot,n_1)JJ^*\|_{SH}^2 = \sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \left|f(k,k')\right| dk' \cdot \sup_{k'} \int_{-\pi}^{\pi} \left|f(k,k')\right| dk.$$

avec

$$\begin{aligned}
&\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk' \leq \\
&\leq \sup_k \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k) \int_{-\pi}^{\pi} \chi_l(k')dk' \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right| dk'' \\
&= \sup_k \sqrt{\frac{2\pi}{N}} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k) \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right| dk'' \\
&= \sup_k \frac{2\pi}{N} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k) \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \chi_j(k'') \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right| dk''
\end{aligned} \tag{4.71}$$

et

$$\begin{aligned}
\sup_{k'} \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk \leq &\sup_{k'} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k') \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \int_{k_l}^{k_{l+1}} dk \int_{k_j}^{k_{j+1}} dk'' \chi_l(k)\chi_j(k'') \times \\
&\times \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right| \sqrt{\frac{2\pi}{N}}
\end{aligned} \tag{4.72}$$

Pour $n_1 = 0$, on coupe l'intégrale en trois parties : $|k'' - k| \leq \frac{2\pi}{N}$, $\frac{2\pi}{N} < |k'' - k| \leq \frac{2\pi}{N^\alpha}$ et $|k'' - k| \geq \frac{2\pi}{N^\alpha}$ où $0 < \alpha < 1$. Pour la première partie, d'après le lemme 4.3.9 :

$$\begin{aligned}
&\left|\chi_j(k'')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k'' - k)\right)\right| \leq \\
&\leq C_1(|\ln(\frac{2\pi}{N})| + |\ln|k'' - k||)\left(\chi_j(k'')\chi_j(k) + \chi_j(k'')\chi_{j+1}(k) + \chi_j(k'')\chi_{j-1}(k)\right)
\end{aligned}$$

et puisque $|k'' - k| \leq \frac{2\pi}{N}$,

$$\begin{aligned}
\sup_k \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k'') &= \sup_k \left(\chi_l(k)\chi_l(k'') + \chi_l(k)\chi_{l+1}(k'') + \chi_l(k)\chi_{l-1}(k'')\right) \\
&= 3\sqrt{\frac{N}{2\pi}}\sqrt{\frac{N}{2\pi}}.
\end{aligned}$$

D'autre part, on a pour N assez petit $|k - k''| \leq \frac{2\pi}{N} \leq 1$ et

$$\begin{aligned}
\int_{k_j}^{k_{j+1}} |\ln|k'' - k||dk'' &= -\int_{k_j}^{k_{j+1}} \ln|k'' - k|dk'' \\
&= -(k_{j+1} - k)\ln|k_{j+1} - k| + k_{j+1} + (k_j - k)\ln|k_j - k| - k_j \\
&\leq \frac{2\pi}{N} + \frac{2\pi}{N}|\ln|k_{j+1} - k|| + \frac{2\pi}{N}|\ln|k_j - k||
\end{aligned}$$

et si l'on intègre par rapport à k on en déduit

$$\int_{k_l}^{k_{l+1}} \int_{k_j}^{k_{j+1}} |\ln|k'-k||dk'dk \leq \left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 + 2\left(\frac{2\pi}{N}\right)^2 |\ln\frac{2\pi}{N}|$$

On obtient donc pour $|k''-k| \leq \frac{2\pi}{N}$

$$\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk' \leq 3C_1\left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln(\frac{2\pi}{N})|\right).$$

De la même manière

$$\begin{aligned}
&\sup_{k'} \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk = \\
&= \sup_{k'} \sum_{l,j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k')\chi_j(k'') \int_{k_l}^{k_{l+1}} dk \int_{k_j}^{k_{j+1}} \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k''-k+\frac{2\pi}{N}n_1)\right| dk'' \\
&\leq 3C_1\left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln(\frac{2\pi}{N})|\right).
\end{aligned}$$

Pour la partie où $\frac{2\pi}{N} < |k''-k| \leq \frac{2\pi}{N^\alpha}$ ceci implique pour $k \in [k_l, k_{l+1})$ et $k'' \in [k_j, k_{j+1})$:

$$|k_l - k_j| = |k_l - k + k - k'' + k'' - k_j| \leq \frac{4\pi}{N} + \frac{2\pi}{N^\alpha}$$

donc pour N assez grand, $|k_l - k_j| \leq \frac{4\pi}{N^\alpha}$ et alors $l - \frac{2N}{N^\alpha} \leq j \leq l + \frac{2N}{N^\alpha}$ et on peut remplacer dans (4.72)

$$\begin{aligned}
&\sup_{k'} \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk = \\
&\leq \sup_{k'} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k') \sum_{j=l-E(\frac{2N}{N^\alpha})}^{l+E(\frac{2N}{N^\alpha})} \int_{k_l}^{k_{l+1}} dk \int_{k_j}^{k_{j+1}} dk'' \chi_l(k)\chi_j(k'') \times \\
&\times \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k''-k+\frac{2\pi}{N}n_1)\right| \sqrt{\frac{2\pi}{N}}.
\end{aligned} \tag{4.73}$$

Il existe $N_0 > 0$ tel que pour $N > N_0$, d'après le lemme 4.3.9

$$\left|\chi_j(k'')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k''-k)\right)\right| \leq C_2\chi_j(k'')\chi_l(k)$$

et on peut écrire

$$\begin{aligned}
&\sup_{k'} \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk \leq \\
&\leq \sup_{k'} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k') \sum_{j=l-E(\frac{2N}{N^\alpha})}^{l+E(\frac{2N}{N^\alpha})} \int_{k_l}^{k_{l+1}} dk \int_{k_j}^{k_{j+1}} dk'' \chi_l(k)\chi_j(k'') C_2\sqrt{\frac{2\pi}{N}} \\
&\leq \sup_{k'} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k') \sum_{j=l-E(\frac{2N}{N^\alpha})}^{l+E(\frac{2N}{N^\alpha})} \frac{2\pi}{N} C_2\sqrt{\frac{2\pi}{N}} \leq \sup_{k'} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k')(\frac{4N}{N^\alpha}+1)\frac{2\pi}{N}C_2\sqrt{\frac{2\pi}{N}} \\
&\leq \sqrt{\frac{N}{2\pi}}(\frac{4N}{N^\alpha}+1)\frac{2\pi}{N}C_2\sqrt{\frac{2\pi}{N}} \leq (\frac{4}{N^\alpha} + \frac{1}{N})C_2
\end{aligned}$$

On a aussi en utilisant (4.71)

$$\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk' \leq \sup_k \frac{2\pi}{N} \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \sum_{j=l-E(\frac{2N}{N^\alpha})}^{l+E(\frac{2N}{N^\alpha})} \int_{k_j}^{k_{j+1}} \chi_l(k)\chi_j(k'')C_2 dk''$$
$$\leq (\frac{4}{N^\alpha} + \frac{1}{N})C_2.$$

Pour le cas $|k''-k| \geq \frac{2\pi}{N^\alpha}$, en utilisant *iii)* du lemme 4.3.9 qui donne la relation :

$$\left|\chi_j(k')\chi_l(k)\left(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k_j - k_l + \frac{2\pi}{N}n_1) - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k' - k + \frac{2\pi}{N}n_1)\right)\right| \leq C_3 \frac{1}{N^{1-\alpha}}\chi_j(k')\chi_l(k),$$

avec (4.71) et (4.73), on obtient

$$\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk' \leq \frac{1}{N^{1-\alpha}}2C_3, \qquad \sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |f(k,k')|dk' \leq \frac{1}{N^{1-\alpha}}2C_3.$$

On choisit $\alpha = \frac{1}{2}$, cela donne :

$$\|Jv_I(\cdot,0)J^* - \widetilde{v}(\cdot,0)JJ^*\| \leq 3C_1\left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln(\frac{2\pi}{N})|\right) + \frac{8\pi C_2}{N^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}}2C_3.$$

Pour le cas où $n_1 \neq 0$, on procède de la même manière, c'est-à-dire que l'on découpe l'intégrale en trois parties, la seule différence est que la singularité n'est pas en zéro mais en $2\pi n_1/N$. On obtient la même borne que pour $n_1 = 0$ pour l'estimation de la différence des potentiels. □

Lemme 4.3.17. *Pour λ fixé, il existe $N_0 > 0$ et $C_D > 0$ tels que pour tout $N \geq N_0$,*

$$\|\mathcal{D}(k)JJ^* - J\mathcal{D}_d(k_j)J^*\|_{\mathcal{H}^c} \leq \frac{C_D}{\sqrt{N}}.$$

Démonstration. On va d'abord décomposer en trois parties

$$\begin{aligned}\|\mathcal{D}(k)JJ^* - J\mathcal{D}_d(k_j)J^*\|_{\mathcal{H}^c} \leq &\|\left(\widetilde{\varepsilon}_c(k) - \widetilde{\varepsilon}_v(k)\right)JJ^* - J\left(\varepsilon_c(k_j) - \varepsilon_v(k_j)\right)J^*\| + \\ &+ \lambda \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} |S_v(n_1) + S_c(n_1)| \cdot \|Jv_I(\cdot,n_1)J^* - \widetilde{v}(\cdot,n_1)JJ^*\| \\ &+ \|Jf(N,\lambda)J^*\| \end{aligned} \tag{4.74}$$

où

$$f(N,\lambda) := -\lambda \sum_{n_1\in\mathbb{Z}^*} \sum_{m_1,m_2\in\mathbb{Z}} \overline{\hat{u}_v(m_1)}\hat{u}_c(m_1+n_1)\overline{\hat{u}_c(m_2)}\hat{u}_v(m_2-n_1)\frac{\sqrt{2\pi}}{N}\widehat{v_L}(m_1-m_2+n_1)$$

est un terme indépendant de k qui est majoré par :

$$|f(N,\lambda)| \leq C\lambda\frac{2\pi}{N}|\ln(\frac{2\pi}{N})|$$

avec $C > 0$, indépendant de N et λ. En effet, d'après la formule (4.9), en utilisant les prorpiétés de v^r_{eff} données à l'annexe A.1, on peut majorer $\widehat{v_L}$ par $|\ln(2\pi/N)|$ et en utilisant la remarque 4.2.2 on obtient la majoration sur f. Le dernier terme de (4.74) est donc majoré par l'estimation ci-dessus car $\|JJ^*\| \leq 1$.

Pour le premier terme de (4.74), si on note :

$$g(k) := \widetilde{\varepsilon}_c(k) - \widetilde{\varepsilon}_v(k), \qquad g_d(k_j) := \varepsilon_c(k_j) - \varepsilon_v(k_j),$$

on a pour $\phi \in \mathcal{H}^c$

$$\begin{aligned}(g(k)JJ^* - Jg_d(k_j)J^*)\phi(k) =& g(k)\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_j(k)(\phi,\chi_j) - \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_j(k)g_d(k_j)(J^*\phi)(j)\\ =& g(k)\sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_j(k)(\phi,\chi_j) - \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_j(k)g_d(k_j)(\phi,\chi_j)\\ =& \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_j(k)(\phi,\chi_j)\left(g(k)-g_d(k_j)\right),\end{aligned}$$

et comme $\widetilde{\varepsilon}_c$ et $\widetilde{\varepsilon}_v$ sont analytiques, g' est borné uniformément en N et en utilisant le théorème des accroissement finis :

$$\begin{aligned}\|\left(\widetilde{\varepsilon}_c(k) - \widetilde{\varepsilon}_v(k)\right)JJ^* - J\left(\varepsilon_c(k_j) - \varepsilon_v(k_j)\right)J^*\| &\leq \frac{2\pi}{N}\sup_{p\in[-\pi,\pi)}|\widetilde{\varepsilon}_c'(p) - \widetilde{\varepsilon}_v'(p)|\cdot\|JJ^*\|\\ &\leq \frac{2\pi}{N}\cdot const.\end{aligned}$$

Pour le deuxième terme de (4.74), on va utiliser le lemme précedent qui donne

$$\sup_{n_1}\|Jv_I(\cdot,n_1)J^* - \widetilde{v}(\cdot,n_1)JJ^*\| \leq C_1\frac{1}{\sqrt{N}},$$

où $C_1 > 0$ et comme $|S_v + S_c|$ est sommable, on obtient le résultat du lemme.

□

Lemme 4.3.18. *Il existe $N_0 > 0$ et $C_v > 0$ tels que pour tout $N \geq N_0$,*

$$\|\hat{w}_* - J\hat{w}_{d*}J^*\| \leq 2C_v\frac{2\pi}{N^{\frac{1}{2}}}.$$

Démonstration. Pour $\phi \in \mathcal{H}^d$

$$\begin{aligned}&(\hat{w}_* - J\hat{w}_{d*}J^*)\phi(k) =\\ &= \int_{-\pi}^{\pi}\hat{w}(k-k')\phi(k')dk' - \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_l(k)\sum_{\substack{j=-N/2\\ j\neq l}}^{\frac{N}{2}-1}\frac{2\pi}{N}\hat{w}(k_l-k_j)\int_{-\pi}^{\pi}\phi(k')\chi_j(k')dk'\\ &= \int_{-\pi}^{\pi}\hat{w}(k-k')\phi(k')dk' - \int_{-\pi}^{\pi}\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_l(k)\sum_{\substack{j=-N/2\\ j\neq l}}^{\frac{N}{2}-1}\frac{2\pi}{N}\hat{w}(k_l-k_j)\chi_j(k')\phi(k')dk'.\end{aligned}$$

Ceci est un opérateur intégral avec noyau symétrique :

$$f(k,k') := \hat{w}(k-k') - \frac{2\pi}{N}\sum_{\substack{l,j=-N/2\\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1}\chi_l(k)\chi_j(k')\hat{w}(k_l-k_j). \tag{4.75}$$

et puisque $\sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}}$,

$$\hat{w}(k-k') = \sum_{l=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k) \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_j(k') \frac{2\pi}{N} \hat{w}(k-k')$$

On peut écrire

$$f(k,k') = \frac{2\pi}{N} \sum_{\substack{l,j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k')(\hat{w}(k-k') - \hat{w}(k_l - k_j)).$$

On va estimer sa norme Schur-Holmgren :

$$\|\hat{w}_* - J\hat{w}_{d*}J^*\|_{SH} = \sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \left|f(k,k')\right| dk'. \tag{4.76}$$

La fonction $\hat{w}$ est une somme de termes contenant $\hat{v}^r_{\text{eff}}$ et on doit étudier

$$\begin{aligned}
&\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |\frac{2\pi}{N} \sum_{\substack{l,j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k') \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} \widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1) \\
&\times \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k-k'+\frac{2\pi}{N}n_1\right) - \hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k_l-k_j+\frac{2\pi}{N}n_1\right)\right| dk' \leq \\
&\leq \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} \widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)\times \\
&\times \sup_{n_1}\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \frac{2\pi}{N} \sum_{\substack{l,j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k') \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k-k'+\frac{2\pi}{N}n_1\right) - \hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k_l-k_j+\frac{2\pi}{N}n_1\right)\right| dk'.
\end{aligned}$$

Cette quantité est finie car la somme sur n_1 est finie, voir remarque 4.2.2 et comme on va le voir ci-dessous, l'intégrale sur k' et le supremum sur k et n_1 sont aussi finis. Pour montrer cela on va étudier

$$\begin{aligned}
&\sup_{n_1}\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |\frac{2\pi}{N} \sum_{\substack{l,j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k') \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k-k'+\frac{2\pi}{N}n_1\right) - \hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k_l-k_j+\frac{2\pi}{N}n_1\right)\right| dk' = \\
&= \sup_{n_1} \sup_{K\in[-\pi+\frac{2\pi n_1}{N},\pi+\frac{2\pi n_1}{N})} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{2\pi}{N} \sum_{l=-\frac{N}{2}+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{\substack{j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(K)\chi_j(k') \left|\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(K-k'\right) - \hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k_l-k_j\right)\right| dk'
\end{aligned}$$

On définit

$$g(k,k',n_1) := \frac{2\pi}{N} \sum_{l=-N/2+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{\substack{j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k')(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k-k') - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_l-k_j)).$$

Si $n_1 \leq N$, la fonction $g(\cdot,\cdot,n_1)$ possède une singularité logarithmique. Dans ce cas, on coupe le domaine en trois parties : $0 < |k-k'| \leq \frac{2\pi}{N}$, $\frac{2\pi}{N} < |k-k'| \leq \frac{2\pi}{N^\alpha}$ et $\frac{2\pi}{N^\alpha} < |k-k'|$ où $0 < \alpha < 1$

et on va utiliser le lemme 4.3.9. On note la fonction g restreinte aux domaines ci-dessus g_0, g_1, g_2 respectivement. On désigne l'opérateur associé par le même symbole. Pour la partie autour de zéro, $0 < |k-k'| \leq \frac{2\pi}{N}$, de $i)$ du lemme 4.3.9 il existe N_0 et C_1 tels que pour $N > N_0$ on a :

$$|g_0(k,k',n_1)| \leq \frac{2\pi}{N} C_1 \left(|\ln(\frac{2\pi}{N})| + |\ln|k-k'|| \right) \left(\chi_j(k)\chi_j(k') + \chi_{j+1}(k)\chi_j(k') + \chi_{j-1}(k)\chi_j(k') \right).$$

D'une part l'intégrale donne

$$\begin{aligned}
&\int_{-\pi}^{\pi} (|\ln(\frac{2\pi}{N})| + |\ln|k'-k||) \left(\chi_j(k')\chi_j(k) + \chi_j(k')\chi_{j+1}(k) + \chi_j(k')\chi_{j-1}(k) \right) dk' = \\
&= \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \left(\chi_j(k) + \chi_{j+1}(k) + \chi_{j-1}(k) \right) \int_{k_j}^{k_{j+1}} (|\ln(\frac{2\pi}{N})| + |\ln|k'-k||) dk'
\end{aligned}$$

On a pour N assez petit : $|k-k'| \leq \frac{2\pi}{N} \leq 1$ et

$$\begin{aligned}
\int_{k_j}^{k_{j+1}} |\ln|k'-k||dk' &= -\int_{k_j}^{k_{j+1}} \ln|k'-k|dk' \\
&= -(k_{j+1}-k)\ln|k_{j+1}-k| + k_{j+1} + (k_j-k)\ln|k_j-k| - k_j \\
&\leq \frac{2\pi}{N} + |(k_{j+1}-k)\ln|k_{j+1}-k|| + |(k_j-k)\ln|k_j-k||.
\end{aligned}$$

Et d'autre part pour le supremum, la fonction $|x\ln x|$ est croissante pour $x \in [0, 1/e]$ et pour N assez petit : $|k-k'| \leq 2\pi/N \leq 1/e$, alors on a l'estimation :

$$\sup_k \int_{k_j}^{k_{j+1}} |\ln|k'-k||dk' \leq \frac{2\pi}{N} + 2\frac{2\pi}{N}|\ln\frac{2\pi}{N}|.$$

On obtient donc

$$\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |g_0(k,k',n_1)|dk' \leq 3C_1 \left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln(\frac{2\pi}{N})| \right)$$

On obtient la première estimation :

$$\|g_0\|_{SH} \leq 3C_1 \left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln(\frac{2\pi}{N})| \right). \tag{4.77}$$

Pour la partie $\frac{2\pi}{N} < |k-k'| \leq \frac{2\pi}{N^\alpha}$, on a $\chi_j(k)\chi_j(k') = 0$ puisque c'est l'intervalle $[k_j, k_{j+1})$ et si k appartient à celui-ci, k' ne peut pas, donc $|k_l - k_j| \geq 2\pi/N$. Aussi on a

$$|k_l - k_j| = |k_l - k + k - k' + k_j - k'| \leq \frac{4\pi}{N} + \frac{2\pi}{N^\alpha}$$

Pour N assez grand, $|k_l - k_j| \leq \frac{4\pi}{N^\alpha}$ ce qui implique

$$\sum_{l=-N/2+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{j=-N/2}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k') = \sum_{l=-N/2+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{j=l-\frac{2N}{N^\alpha}}^{l+\frac{2N}{N^\alpha}} \chi_l(k)\chi_j(k'),$$

et

$$\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{l=-N/2+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{j=l-\frac{2N}{N^\alpha}}^{l+\frac{2N}{N^\alpha}} \chi_l(k)\chi_j(k')dk' = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \frac{4\pi}{N^\alpha} \sqrt{\frac{N}{2\pi}},$$

En utilisant $ii)$ du lemme 4.3.9, pour $N > N_0$

$$\begin{aligned}
&\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} \frac{2\pi}{N} | \sum_{l=-N/2+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{\substack{j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k')(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k-k') - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_l-k_j))|dk' \\
&\leq \frac{2\pi}{N} C_2 \frac{N}{2\pi} \frac{4\pi}{N^\alpha} \\
&\leq \frac{4\pi}{N^\alpha} C_2.
\end{aligned}$$

Ainsi

$$\|g_1\|_{SH} \leq \frac{4\pi}{N^\alpha} C_2.$$

Finalement, on arrive à la dernière partie où $|k-k'| \geq \frac{2\pi}{N^\alpha}$. Pour $N > N_0$, d'après $iii)$ du lemme 4.3.9

$$\begin{aligned}
&\sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |\frac{2\pi}{N} \sum_{l=-N/2+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{\substack{j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k')(\hat{v}^r_{\text{eff}}(k-k') - \hat{v}^r_{\text{eff}}(k_l-k_j))|dk' \leq \\
&\leq C_3 \frac{1}{N^{1-\alpha}} \sup_k \int_{-\pi}^{\pi} |\frac{2\pi}{N} \sum_{l=-N/2+n_1}^{\frac{N}{2}-1+n_1} \sum_{\substack{j=-N/2 \\ l\neq j}}^{\frac{N}{2}-1} \chi_l(k)\chi_j(k')|dk' \\
&\leq C_3 \frac{2\pi}{N^{1-\alpha}}
\end{aligned}$$

On peut donc conclure

$$\|g_2\|_{SH} \leq 2\pi C_3 \frac{N^\alpha}{N}.$$

Toutes ces estimations sont valables pour $n_1 \leq N$ mais aussi pour $n_1 > N$ où g_0 et éventuellement g_1 sont évaluées trivialement. On a donc une borne pour g indépendante de n_1 et finalement, pour $N > N_0$ il existe une constante $C > 0$ telle que,

$$\|\hat{w}_* - J\hat{w}_{d*}J^*\|_{SH} \leq C\left(3C_1\left(\frac{2\pi}{N} + 3\frac{2\pi}{N}|\ln(\frac{2\pi}{N})|\right) + \frac{4\pi}{N^\alpha}C_2 + C_3\frac{2\pi}{N^{1-\alpha}}\right)$$

On peut choisir $\alpha = 1/2$. □

4.4 Conclusion

On a, dans cette partie, essayé d'obtenir des informations sur le spectre de l'opérateur H_0, l'Hamiltonien à N électrons dans un potentiel périodique avec interaction faible entre électrons. On a supposé, comme les physiciens, que l'interaction entre électrons, qui est vue comme une petite perturbation, est suffisamment faible pour que l'on puisse décrire le système en utilisant une partie de la base propre du modèle non perturbé sans commettre une erreur trop importante. On a donc fait le choix de réduire l'espace des états aux seuls états de plus basse énergie du modèle *non perturbé*, ceux correspondants à un seul électron dans la bande de conduction et un trou dans la bande de valence. La réduction d'espace permet d'obtenir la contribution des excitons au spectre de H_0, c'est-à-dire la caractérisation de certaines valeurs propres particulières dans une région du spectre de H_0, qui ne sont pas présentes dans le cas du modèle non perturbé. Ce sont ces valeurs propres qui intéressent les physiciens. Après cette réduction l'étude du spectre de H_0 est réduite à l'étude du spectre de M définie en (4.14).

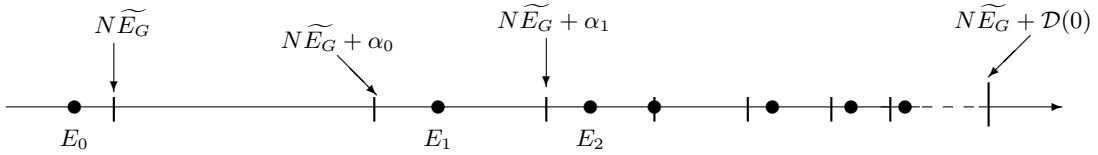

FIG. 4.2 – Relation entre les spectres de la matrice M et de l'opérateur H_{exc}. $\widetilde{E_G}$, $\mathcal{D}(0)$ et γ_n dépendent de λ.

On a ensuite appliqué la théorie de perturbation premièrement pour une interaction faible entre électrons et deuxièmement pour un grand nombre d'électrons. Soit $\{E_n(\lambda, N)\}_{n=0}^{N+1}$ les valeurs propres de la matrice M, et soit $\{\gamma_n(\lambda, N)\}_{n=0}^{N}$ les valeurs propres de H_{ex} défini en (4.33). On a obtenu, pour λ assez petit, au théorème 4.3.3, des informations importantes sur l'éloignement entre ces valeurs propres. On a vu que leurs spectres étaient entrelacés, et on peut écrire pour tout entier $n \in [1, N+1]$

$$\begin{aligned} E_0(\lambda, N) &= E_G - \mathcal{O}(\lambda^2), \\ E_n(\lambda, N) &= E_G + \gamma_{n-1}(\lambda, N) + \mathcal{O}(\lambda^2), \end{aligned}$$

avec E_G dépendant de λ dont on peut trouver une expression au lemme 4.2.3.

La deuxième partie donne une approximation de $M_G + M_{\text{ex}}$, défini en (4.33), pour un grand nombre de particules. Ceci est donné par le théorème 4.3.8 qui stipule que pour N grand, si on dénote par $\alpha_n(\lambda, N)$ les valeurs propres de H_{exc} défini en (4.55), on peut écrire

$$\begin{aligned} E_G &= N\widetilde{E_G} + \mathcal{O}(N^{1/2}) \\ \gamma_n(\lambda, N) &= \alpha_n(\lambda, N) + \mathcal{O}(N^{1/2}). \end{aligned}$$

avec $\widetilde{E_G}$ indépendant de N et comportant un terme principal indépendant de λ, pour λ petit. On peut conclure ce chapitre en donnant le principal résultat obtenu : pour λ suffisamment petit et N suffisamment grand,

$$\begin{aligned} E_0(\lambda, N) &= N\widetilde{E_G} - \mathcal{O}(\frac{\lambda^2}{\sqrt{N}}), \\ E_n(\lambda, N) &= N\widetilde{E_G} + \alpha_{n-1}(\lambda, N) + \mathcal{O}(\frac{\lambda^2}{\sqrt{N}}), \end{aligned}$$

ce spectre est illustré par la figure 4.2. On va étudier dans le prochain chapitre le spectre de H_{exc}.

La dernière remarque sera pour insister sur le fait que les spectres associés à M et $\widetilde{M_G} + H_{\text{exc}}$ sont asymptotiques, c'est à dire que le spectre de $\widetilde{M_G} + H_{\text{exc}}$ dépend encore de N et λ, et l'on ne peut pas faire la limite N tend vers l'infini.

Chapitre 5

Exciton et spectre d'absorption

Ce chapitre est la conclusion des chapitres 3 et 4. On y achève l'étude du spectre de l'Hamiltonien du nanotube avec interactions entre électrons, réduit au sous-espace de l'exciton. On a vu dans le chapitre précedent que l'on peut obtenir une estimation des états excités de M en étudiant H_{exc}, pour N grand et λ petit. On fixe N dans tout ce chapitre à une valeur assez grande. On considère ici H_{exc} et on montre que pour λ petit son spectre se rapproche de celui d'un modèle où deux particules interagissent entre elles sur la ligne avec un potentiel effectif que l'on va préciser, le centre de masse ayant été séparé. Son expression, pour l'instant formelle, est la suivante :

$$\lambda^2 \left(-\frac{C_0}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + C(r)\delta(x) - C_u(\frac{x}{\alpha})\frac{1}{\lambda}\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} V_c^r(\frac{x}{\lambda}, ry)dy \right) \tag{5.1}$$

avec $C_0, C(r)$ des constantes positives et C_u une fonction bornée périodique. Cet Hamiltonien que l'on va appeler *Hamiltonien de l'exciton* est défini rigoureusement dans la section 5.2. Les états propres de cet Hamiltonien seront étudié au chapitre 6 et cela permettra de montrer que le spectre de M possède la structure donné en figure 5.1.

Dans la dernière section, on reprend la formule du spectre d'absorption optique $\alpha(\omega)$, et l'on montre, sous les conditions établies a la section 4.2, qu'il dépend des états propres de l'Hamiltonien de l'exciton.

5.1 Modèle sur la ligne infinie

Dans la section précédente, au lemme 4.3.14, on a vu que l'on peut obtenir une estimation du spectre de M en étudiant le spectre de H_{exc} qui est un Hamiltonien unidimensionnel sur

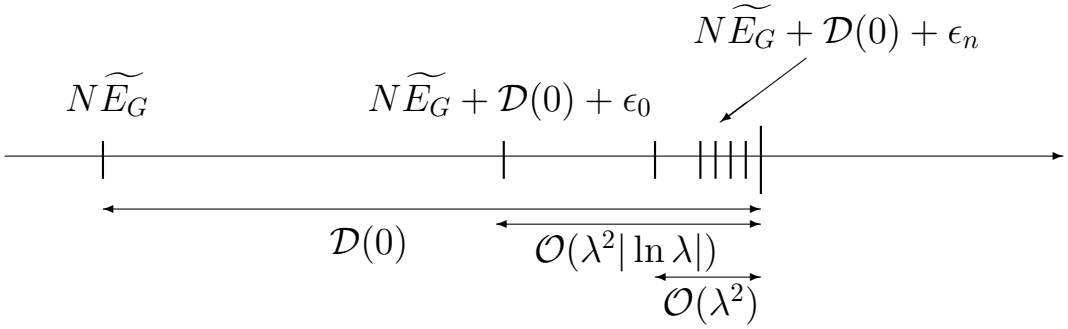

FIG. 5.1 – Spectre de la matrice M. E_G, $\mathcal{D}(0)$ et ϵ_n dépendent de λ.

$L^2([-\pi,\pi))$. On définit

$$H^0_{\text{exc}} := \mathcal{D}(k) - \mathcal{D}(0) + \lambda \hat{w}_* \tag{5.2}$$

où $\mathcal{D}(k)$ est l'opérateur de multiplication par une fonction au moins $C^3(-\pi,\pi)$, défini en (4.54) et dont certaines propriétés sont données au lemme 4.3.15, et $\hat{w}_*$ est l'opérateur de convolution défini pour $\psi \in L^2([-\pi,\pi))$ par :

$$(\hat{w}_*\psi)(k) = \int_{-\pi}^{\pi} \hat{w}(k-k')\psi(k')dk'$$

et où $\hat{w}$ est la fonction définie en (4.51). On rappelle que l'estimation du spectre de M par celui de H_{exc} est vrai si λ est assez petit, et dans tout le travail qui suit, cette hypothèse sera supposée vérifiée.

On va utiliser, encore une fois, la théorie de perturbation afin de montrer que H^0_{exc} peut être approximée par un modèle au spectre connu, quand λ est petit. Les informations sur la fonction $\mathcal{D}$ sont ici cruciales et on va voir que pour une interaction faible, seulement son comportement autour de l'origine sera important. Le modèle continu dépendra juste des ces données, reliées à la chiralité du nanotube comme remarqué en section 4.2.1. On introduit pour cela la transformation unitaire, $\alpha > 0$,

$$\begin{aligned} U : L^2([-\pi,\pi)) &\to L^2([-\frac{\pi}{\alpha},\frac{\pi}{\alpha})) \\ \psi &\mapsto (U_\alpha\psi)(k) = \sqrt{\alpha}\psi(\alpha k), \end{aligned}$$

alors on obtient :

$$\begin{aligned} (U_\alpha \hat{w}_* U_\alpha^{-1}\psi)(k) &= \sqrt{\alpha}\int_{-\pi}^{\pi} \hat{w}(\alpha k - k')\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\psi(\frac{k'}{\alpha})dk' \\ &= \alpha\int_{-\frac{\pi}{\alpha}}^{\frac{\pi}{\alpha}} \hat{w}(\alpha(k-k'))\psi(k')dk' = \alpha(\hat{w}_*(\alpha\cdot)\psi)(k). \end{aligned}$$

On définit sur $\mathcal{H}_\alpha := L^2([-\frac{\pi}{\alpha},\frac{\pi}{\alpha}))$

$$H_\alpha := \frac{1}{\alpha^2}(U_\alpha H^0_{\text{exc}} U_\alpha^{-1}) = \frac{\mathcal{D}(\alpha k)}{\alpha^2} + \frac{\lambda}{\alpha}\hat{w}_*(\alpha\cdot) \tag{5.3}$$

Cet opérateur reste borné puisque qu'il est unitairement équivalent à H^0_{exc}. On note que les valeurs propres E de H^0_{exc} et E_α de H_α sont reliées par la relation :

$$E = \alpha^2 E_\alpha. \tag{5.4}$$

On choisit maintenant :

$$\lambda = \alpha.$$

On introduit le modèle "non perturbé" sur la ligne, soit

$$L^2_1(\mathbb{R}) := \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}) | (k^2+1)^{\frac{1}{2}} f \in L^2(\mathbb{R}) \right\},$$

et pour $f, g \in L^2_1(\mathbb{R})$, on définit la forme quadratique suivante :

$$q_\infty(f,g) := \frac{\mathcal{D}''(0)}{2}\int_{\mathbb{R}} k^2 f(k)\overline{g(k)}dk + \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} \hat{v}_\infty(\alpha(k-k'))f(k')dk'\overline{g(k)}dk =: q_{00}(f,g) + q_v(f,g),$$

où

$$\hat{v}_\infty(k-k') := \hat{v}^0_\infty - \hat{v}^k_\infty(k-k')$$

avec

$$\hat{v}^0_\infty := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}^*} S_c(n_1)\hat{v}(n_1),$$

indépendant de k, k' et pour $k \neq k'$

$$\hat{v}^k_\infty(k-k') := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n_1 \in \mathbb{Z}} \widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k - k' + \frac{2\pi}{N}n_1\right).$$

L'espace $L^2_1(\mathbb{R})$ est dense dans $L^2(\mathbb{R})$, q_{00} est positive, symétrique et fermée. On désigne par $R_{00}(z)$ pour $z < 0$ la résolvante associée à q_{00}. La forme q_v est symétrique, et on peut voir que $\hat{v}^0_\infty$ est borné et v^k_∞ est Hilbert-Schmidt car $v^k_\infty \in L^2(\mathbb{R})$. De plus on a que q_v est q_{00}-compact car pour $f \in D(q_{00})$, la norme Hilbert-Schmidt donne[1] pour chaque α fixé, si l'on dénote par v^∞_* l'opérateur associé à q_v :

$$\begin{aligned}
\|R_{00}(-a^2)^{\frac{1}{2}}\hat{v}^\infty_*(\alpha\cdot)R_{00}(-a^2)^{-\frac{1}{2}}\|^2_{HS} =& \frac{|\hat{v}^0_\infty|\pi^2}{a^2} + \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{k^2+a^2}|\hat{v}_\infty(\alpha(k-k'))|^2 \frac{1}{k'^2+a^2}dkdk \\
=& \frac{|\hat{v}^0_\infty|\pi^2}{a^2} + \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{p^2+a^2}|\hat{v}_\infty(\alpha(q))|^2 \frac{1}{(p-q)^2+a^2}dpdq \\
=& \frac{|\hat{v}^0_\infty|\pi^2}{a^2} + \frac{2\pi}{a}\cdot\int_{\mathbb{R}} |\hat{v}_\infty(\alpha q)|^2 \frac{1}{q^2+4a^2}dq \\
\leq& \frac{|\hat{v}^0_\infty|\pi^2}{a^2} + \frac{2\pi}{a}\frac{1}{4a^2}\int_{\mathbb{R}} |\hat{v}_\infty(\alpha q)|^2 dq. \qquad (5.5)
\end{aligned}$$

Remarque 5.1.1. La quantité ci-dessus n'est pas uniformément bornée par rapport au paramètre α. On rappelle que $\hat{v}_\infty(\alpha) \overset{\alpha\to 0}{\sim} \log(\alpha)$, voir annexe A.1 et le comportement de $\hat{v}^1_{\text{eff}}(p)$ quand $p \to 0$.

On conclut en utilisant l'annexe B.6 et le premier théorème de représentation de Kato que q_∞ possède un opérateur auto-adjoint associé que l'on va dénoter par $H_\infty(\alpha)$:

$$H_\infty(\alpha) := \frac{k^2}{2}\mathcal{D}''(0) + \hat{v}^\infty_*(\alpha\cdot). \qquad (5.6)$$

De plus, pour le spectre essentiel on a $\sigma_{ess}(q_{00}) = \sigma_{ess}(q_{00} + q_v)$.

On définit deux projecteurs pour tout $\psi \in L^2(\mathbb{R})$:

$$\Pi_\alpha\psi = \begin{cases} \psi(k) & \text{si } |k| \leq \frac{\pi}{\alpha} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \qquad \text{et } \overline{\Pi}_\alpha = 1 - \Pi_\alpha.$$

de telle façon que

$$\Pi_\alpha L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}_\alpha, \qquad \overline{\Pi}_\alpha L^2(\mathbb{R}) = L^2((-\infty, -\frac{\pi}{\alpha}) \cup (\frac{\pi}{\alpha}, \infty)).$$

On choisit une extension de H_α à $L^2(\mathbb{R})$ notée $\widetilde{H}$ comme suit :

$$\widetilde{H} := \Pi_\alpha H_\alpha \Pi_\alpha \oplus \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2}\overline{\Pi}_\alpha. \qquad (5.7)$$

[1] on va calculer l'intégrale qui suit avec l'aide de la décomposition en fractions rationnelles suivante :

$$\frac{1}{p^2+a^2}\frac{1}{(p-q)^2+a^2} = \frac{1}{q^2+a^2}\left(\frac{1}{p^2+a^2} + \frac{1}{(p-q)^2+a^2} + \frac{1}{q}\frac{2p}{p^2+a^2} - \frac{1}{q}\frac{2(p-q)}{(p-q)^2+a^2}\right)$$

C'est un opérateur auto-adjoint car c'est la somme directe de deux opérateurs auto-adjoints, avec domaine

$$\mathcal{H}_\alpha \oplus L^2_1\left((-\infty, -\frac{\pi}{\alpha}) \cup (\frac{\pi}{\alpha}, \infty)\right).$$

On remarque les propriétés importantes à propos du spectre de H_α :

$$\sigma(\widetilde{H}) \cap]-\infty, \frac{\mathcal{D}''(0)}{2}\frac{\pi^2}{\alpha^2}[= \sigma(H_\alpha) \cap]-\infty, \frac{\mathcal{D}''(0)}{2}\frac{\pi^2}{\alpha^2}[$$

puisque $\sigma(\frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2}\overline{\Pi}_\alpha) \geq \frac{\mathcal{D}''(0)}{2}\frac{\pi^2}{\alpha^2}$ et les spectres sont de même nature dans cette région, en particulier les valeurs propres ont la même multiplicité. Etant donné que l'on n'est intéressé que par le bas du spectre de H_{exc} qui de plus, comme on va le voir, est négatif, il suffit donc d'étudier $\widetilde{H}$ pour avoir toutes les informations souhaitées. On introduit la notation

$$d_\infty(z) := d(z, \sigma(H_\infty(\alpha)),$$

la distance de z au spectre de H_∞. On veut montrer que le spectre négatif de $\widetilde{H}$ est "proche" de celui de $H_\infty(\alpha)$ et on va établir dans cette section le théorème suivant :

Théorème 5.1.2. *Soit $\varepsilon_0 > 0$ et $0 < \delta < 1/2$. Il existe $\alpha_0 = \alpha_0(\varepsilon_0, \delta) > 0$ et $C > 0$ tels que pour tout $0 < \alpha \leq \alpha_0$*

i) $(-\infty, -C(\ln\alpha)^2) \subset \rho(\widetilde{H})$,

ii) si $z \in [-C(\ln\alpha)^2), 0]$ et $d_\infty(z) > \varepsilon_0$, alors $z \in \rho(\widetilde{H})$ et de plus il existe quatre constantes indépendantes de z, $C_{5.28} > 0$, $C_{5.29} > 0$, $A_{5.30} > 0$ et $B_{5.30} > 0$ telles que

$$\|(\widetilde{H} - z)^{-1} - (H_\infty(\alpha) - z)^{-1}\| \leq$$
$$\frac{C_{5.28}\alpha^{\frac{1}{2}\delta}|\ln\alpha| + C_{5.29}\alpha^\delta|\ln\alpha|^2}{d_\infty(z)} + \frac{1}{(d_\infty(z))^2}(A_{5.30}\alpha^{2-4\delta} + B_{5.30}\alpha^\delta|\ln\alpha|^2) \xrightarrow{\alpha\to 0} 0.$$

Pour obtenir ce résultat on va commencer par découper $\widetilde{H}$ en deux parties, et on va utiliser la méthode de Feshbach pour montrer que l'étude d'une seule des parties est suffisante pour avoir une bonne estimation du spectre de l'opérateur.

D'après les hypothèses on doit prendre $0 < \delta < 1/2$, et on définit les projections orthogonales P_α et $\overline{P}_\alpha$ pour $\psi \in L^2(\mathbb{R})$:

$$P_\alpha\psi = \begin{cases} \psi(k) & \text{si } |k| \leq \frac{\pi}{\alpha^\delta} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \qquad \text{et } \overline{P}_\alpha\psi = \begin{cases} \psi(k) & \text{si } |k| > \frac{\pi}{\alpha^\delta} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \qquad P_\alpha + \overline{P}_\alpha = \text{Id}.$$

et on a donc :

$$P_\alpha\Pi_\alpha = P_\alpha, \qquad \overline{P}_\alpha\overline{\Pi}_\alpha = \overline{\Pi}_\alpha.$$

On écrit $\widetilde{H}$ comme une matrice d'opérateurs :

$$\widetilde{H} = \begin{pmatrix} P_\alpha\widetilde{H}P_\alpha & P_\alpha\widetilde{H}\overline{P}_\alpha \\ \overline{P}_\alpha\widetilde{H}P_\alpha & \overline{P}_\alpha\widetilde{H}\overline{P}_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_\alpha H_\alpha P_\alpha & P_\alpha\Pi_\alpha\hat{w}_*(\alpha\cdot)\Pi_\alpha\overline{P}_\alpha \\ \overline{P}_\alpha\Pi_\alpha\hat{w}_*(\alpha\cdot)\Pi_\alpha P_\alpha & \overline{P}_\alpha\widetilde{H}\overline{P}_\alpha \end{pmatrix}.$$

On introduit $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$ et en utilisant la formule de Feshbach :

$$(\widetilde{H} - z)^{-1} = \begin{pmatrix} S(z) & -S(z)P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z) \\ -R(z)\overline{P}_\alpha V P_\alpha S(z) & R(z) + R(z)\overline{P}_\alpha V P_\alpha S(z) P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z) \end{pmatrix} \tag{5.8}$$

avec

$$R(z) := \overline{P}_\alpha(\overline{P}_\alpha\widetilde{H}\overline{P}_\alpha - z)^{-1}\overline{P}_\alpha, \qquad S(z) := P_\alpha(P_\alpha\widetilde{H}P_\alpha + W(z) - z)^{-1}P_\alpha$$

et

$$W(z) := -P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z)\overline{P}_\alpha V P_\alpha, \qquad V := \Pi_\alpha\hat{w}_*(\alpha\cdot)\Pi_\alpha.$$

On va montrer que ces quantités existent pour certains $z \in \mathbb{R}_-$. On commence par montrer un lemme préliminaire.

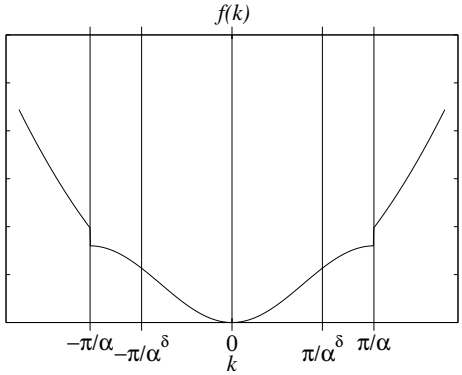

FIG. 5.2 – Forme générale de la fonction $f(k) := \frac{\mathcal{D}(\alpha k)}{\alpha^2}\Pi_\alpha + \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2}\overline{\Pi}_\alpha$ pour $\alpha > 0$ fixé.

Lemme 5.1.3. *Soit les constantes $c_m > 0$, $a < 0$, les paramètres $\alpha > 0$, $0 < \delta < 1$, et les fonctions*

$$\begin{aligned} f_1 : (-\frac{\pi}{\alpha}, \frac{\pi}{\alpha})^2 &\to \mathbb{R} \\ (p,q) &\mapsto \frac{1}{c_m p^2 + a^2}|\hat{w}(\alpha(p-q))|^2 \frac{1}{c_m q^2 + a^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_2 : \mathbb{R}^2 &\to \mathbb{R} \\ (p,q) &\mapsto \frac{1}{c_m p^2 + a^2}|\hat{v}_\infty(\alpha(p-q))|^2 \frac{1}{c_m q^2 + a^2}. \end{aligned}$$

Il existe $\alpha_0 > 0$ et $C_0, c_0, c_1 > 0$ tels que pour tout $\alpha < \alpha_0$ on a les estimations suivantes :

$$\begin{aligned} &\int_{|p|,|q|\in[\frac{\pi}{\alpha^\delta},\frac{\pi}{\alpha}]} f_1(p,q)dpdq \le C_0\alpha^{2\delta} + c_0^2\alpha^{2\delta}|3\ln(\alpha)|^2 8\frac{c_m}{a^2} + \frac{\pi}{a^4}c_1^2 4\alpha\left|9(\ln\alpha)^2 + 3\ln\alpha + 1\right|, \\ &\int_0^{\frac{\pi}{\alpha^\delta}}\int_{\frac{\pi}{\alpha^\delta}}^{\frac{\pi}{\alpha}} f_1(p,q)dpdq \le C_0\alpha^{\delta} + c_0^2\alpha^{\delta}|3\ln(\alpha)|^2 8\frac{c_m}{a^2}\pi + \frac{\pi}{a^4}c_1^2 4\alpha\left|9(\ln\alpha)^2 + 3\ln\alpha + 1\right|, \\ &\int_{\mathbb{R}^2} f_2(p,q)dpdq \le \frac{v_\infty^0\pi^2}{a^2} + \frac{2\pi}{4a^3}(c_0^2(\ln|\alpha|)^2 + c_1). \end{aligned}$$

Démonstration. On va estimer l'intégrale suivante :

$$\int_r^s\int_t^u \frac{1}{c_m p^2 + a^2}|\hat{w}(\alpha(p-q))|^2 \frac{1}{c_m q^2 + a^2}dpdq, \tag{5.9}$$

avec $r, s, t, u \in [\pi/\alpha, \pi/\alpha]$. Comme sur $(-\pi/\alpha, \pi/\alpha)$ on a que $\hat{w} = \hat{v}_\infty$, on va utiliser les fonctions précédemment définies : $\hat{v}_\infty^0$ et $\hat{v}_\infty^k$ pour calculer les deux premières estimations.

La fonction $\hat{w}$ est composée de deux parties, une partie constante, ne dépendant pas de k, k' et une partie dépendant de la différence $k - k'$.

La première partie peut être estimée par :

$$\begin{aligned} &\int_r^s\int_t^u \frac{1}{c_m p^2 + a^2}|\hat{v}_\infty^0|^2 \frac{1}{c_m q^2 + a^2}dpdq \\ &\le |\hat{v}_\infty^0|^2 4\frac{c_m}{a^2}\left|\arctan\frac{s\sqrt{c_m}}{a} - \arctan\frac{r\sqrt{c_m}}{a}\right|\left|\arctan\frac{u\sqrt{c_m}}{a} - \arctan\frac{t\sqrt{c_m}}{a}\right|. \end{aligned}$$

On rappelle les propriétés de la fonction arctan suivantes :

$$\tan(\arctan\frac{a}{\alpha}-\arctan\frac{a}{\alpha^\delta})=\frac{\frac{a}{\alpha}-\frac{a}{\alpha^\delta}}{1+\frac{a^2}{\alpha^{1+\delta}}}=\alpha^\delta(1-\alpha^{1-\delta})\frac{1}{a}(1+\mathcal{O}(\alpha^{1+\delta})),$$
$$\arctan x=x+\mathcal{O}(x^3),$$

ce qui donne

$$\left|\arctan\frac{s\sqrt{c_m}}{a}-\arctan\frac{r\sqrt{c_m}}{a}\right|\leq C_0\alpha^\delta.$$

où $C_0>0$.

Pour la partie dépendante de k : v_∞^k, on sait que cette fonction possède des singularités logarithmiques en $\{-\pi,0,\pi\}$. Pour α assez petit, on va couper l'intégrale en trois parties : une partie où, pour un $x>0$ fixé, on a $\alpha^x\leq|p-q|\leq\pi/\alpha-\alpha^x$, une partie où $|p-q|\leq\alpha^x$ et une partie où $\pi/\alpha-\alpha^x\leq|p-q|\leq\pi/\alpha$. Pour cela on définit les fonctions réelles, $p\in[-\pi/\alpha,\pi/\alpha]$

$$\chi_0:p\mapsto\begin{cases}1 & \text{si } p\leq\alpha^x\\ 0 & \text{sinon}\end{cases},\qquad \chi_m:p\mapsto\begin{cases}1 & \text{si } \alpha^x\leq p\leq\pi/\alpha-\alpha^x\\ 0 & \text{sinon}\end{cases},$$
$$\chi_\pi:p\mapsto\begin{cases}1 & \text{si } p\geq\pi/\alpha-\alpha^x\\ 0 & \text{sinon}\end{cases}.$$

Pour la première partie on peut trouver une constante $c_0>0$ telle que pour α assez petit $|\hat{v}_\infty^k(\alpha(p-q))|\leq c_0|\ln(\alpha^{x+1})|$ pour tout $\alpha^{x+1}\leq\alpha|p-q|\leq 2\pi-\alpha^{x+1}$ et

$$\begin{aligned}&\int_r^s\int_t^u\frac{1}{c_mp^2+a^2}|\hat{v}_\infty^k(\alpha(p-q))|^2\frac{1}{c_mq^2+a^2}\chi_m(|p-q|)dpdq\\ &\leq c_0^2|\ln(\alpha^{x+1})|^2\int_r^s\int_t^u\frac{1}{c_mp^2+a^2}\frac{1}{c_mq^2+a^2}dpdq\\ &\leq c_0^2|\ln(\alpha^{x+1})|^2 4\frac{c_m}{a^2}\left|\arctan\frac{s}{a}\sqrt{c_m}-\arctan\frac{r}{a}\sqrt{c_m}\right|\left|\arctan\frac{u}{a}\sqrt{c_m}-\arctan\frac{t}{a}\sqrt{c_m}\right|\end{aligned}$$

et d'après les propriétés de la fonction arctan rappelées un peu plus haut, on obtient pour $r=t=\pi/\alpha^\delta$, $s=u=\pi/\alpha$

$$\begin{aligned}&\int_{|p|,|q|\in[\frac{\pi}{\alpha^\delta},\frac{\pi}{\alpha}]}\frac{1}{c_mp^2+a^2}|\hat{v}_\infty^k(\alpha(p-q))|^2\frac{1}{c_mq^2+a^2}\chi_m(|p-q|)dpdq\\ &\leq c_0^2|\ln(\alpha^{x+1})|^2 4\frac{c_m}{a^2}\alpha^{2\delta}(1-\alpha^{1-\delta})^2(1+\mathcal{O}(\alpha^{1+\delta}))^2\xrightarrow{\alpha\to 0}0\end{aligned}$$

pour tout x.

Pour le cas $|p-q|\leq\alpha^x$, on écrit

$$\begin{aligned}&\int_r^s\int_t^u\frac{1}{c_mp^2+a^2}|\hat{v}_\infty^k(\alpha(p-q))|^2\frac{1}{c_mq^2+a^2}\chi_0(|p-q|)dpdq\\ &\leq\frac{1}{a^4}\int_r^s\int_{\mathbb{R}}|\hat{v}_\infty^k(\alpha(p-q))|^2\chi_0(|p-q|)dpdq\\ &\leq\frac{1}{a^4}(s-r)\int_{-\alpha^x}^{\alpha^x}|\hat{v}_\infty^k(\alpha k)|^2dk\qquad(p-q=k,q=k')\\ &\leq\frac{1}{a^4}(s-r)\int_{-\alpha^x}^{\alpha^x}c_1^2|\ln(\alpha|k|)|^2dk\\ &\leq\frac{1}{a^4}c_1^2(s-r)2\alpha^x\left|(\ln\alpha^{x+1})^2+\ln\alpha^{x+1}+1\right|.\end{aligned}$$

et si $r = t = \pi/\alpha^\delta$, $s = u = \pi/\alpha$, alors $(s-r) = (1-\alpha^{1-\delta})\pi/\alpha$. Enfin on peut estimer pareillement la dernière partie puisque l'on a une divergence logarithmique de $\hat{v}^k_\infty$ en $\pm\pi$ qui vient du terme $n_1 = \pm 1$ dans l'expression de $\hat{v}^k_\infty$. On a

$$\begin{aligned}
&\int_r^s \int_t^u \frac{1}{c_m p^2 + a^2} |\hat{v}^k_\infty(\alpha(p-q)+2\pi)|^2 \frac{1}{c_m q^2 + a^2} \chi_\pi(|p-q|) dp dq \\
&\leq \frac{1}{a^4}(s-r) \int_{\mathbb{R}} |\hat{v}^k_\infty(\alpha(p-q)+2\pi)|^2 \chi_\pi(|p-q|) dp dq \\
&\leq \frac{1}{a^4} c_1^2 (s-r) 2\alpha^x \left|(\ln \alpha^{x+1})^2 + \ln \alpha^{x+1} + 1\right|.
\end{aligned}$$

Si on choisit $x = 2$, on obtient la première estimation. La deuxième estimation est obtenue en prenant $r = \pi/\alpha^\delta$, $s = \pi/\alpha$. Pour la troisième intégrale, on procède différemment :

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{k^2 + a^2} |\hat{v}_\infty(\alpha(k-k'))|^2 \frac{1}{k'^2 + a^2} dk dk \\
=& \frac{v^0_\infty \pi^2}{a^2} + \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{p^2 + a^2} |\hat{v}^k_\infty(\alpha(q))|^2 \frac{1}{(p-q)^2 + a^2} dp dq \quad (p = k, q = k - k') \\
=& \frac{v^0_\infty \pi^2}{a^2} + \frac{2\pi}{a} \cdot \int_{\mathbb{R}} |\hat{v}_\infty(\alpha q)|^2 \frac{1}{q^2 + 4a^2} dq \\
\leq& \frac{v^0_\infty \pi^2}{a^2} + \frac{2\pi}{a} \frac{1}{4a^2} \int_{\mathbb{R}} |\hat{v}_\infty(\alpha q)|^2 dq \leq \frac{2\pi}{4a^3}(c_0^2 (\ln|\alpha|)^2 + c_1).
\end{aligned}$$

□

Lemme 5.1.4. *Soit $\varepsilon_0 > 0$ et $0 < \delta < 1/2$, il existe $\alpha_0 = \alpha_0(\varepsilon_0, \delta) > 0$, $C > 0$ et deux constantes $C_{5.28} > 0$ et $C_{5.29} > 0$ tels que si $0 < \alpha \leq \alpha_0$ et $\varepsilon_0 \leq d_\infty(z) \leq C(\ln \alpha)^2$, alors $z \in \rho(\widetilde{H})$ et*

$$\|(\widetilde{H} - z)^{-1} - S(z)\| \leq \frac{C_{5.28}\alpha^{\frac{1}{2}\delta}|\ln\alpha| + C_{5.29}\alpha^\delta |\ln\alpha|^2}{d_\infty(z)} \xrightarrow{\alpha \to 0} 0.$$

Démonstration. On va estimer successivement chaque terme de la matrice 5.8. Regardons d'abord le terme $R(z)$. Introduisons la notation, pour $d_\infty(z) > \varepsilon_0$, qui implique $z < 0$,

$$K(z) := (\widetilde{H}_0 \overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}} \overline{P}_\alpha (\Pi_\alpha \hat{w}_*(\alpha\cdot)\Pi_\alpha) \overline{P}_\alpha (\widetilde{H}_0 \overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}$$

où

$$\widetilde{H}_0 := (\frac{\mathcal{D}(k\alpha)}{\alpha^2}\Pi_\alpha \oplus \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2}\overline{\Pi}_\alpha).$$

On voudrait écrire sous certaines conditions, c'est à dire si $\|K\| \leq 1$:

$$R(z) = (\widetilde{H}_0 \overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{1 + K(z)} (\widetilde{H}_0 \overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}.$$

On a pour $\widetilde{H}_0$,

$$\widetilde{H}_0 \overline{P}_\alpha \geq \min \left\{ \inf_{|k| \in [\frac{\pi}{\alpha^\delta}, \frac{\pi}{\alpha}]} \frac{\mathcal{D}(k\alpha)}{\alpha^2}, \inf_{|k| \geq \frac{\pi}{\alpha}} \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2} \right\}$$

et il existe $c_m > 0$ tel que pour tout $k \in [-\frac{\pi}{\alpha}, \frac{\pi}{\alpha}]$ on a $\frac{\mathcal{D}(\alpha k)}{\alpha^2} \geq c_m k^2 > 0$ d'après les propriétés de $\mathcal{D}$ enoncées au lemme 4.3.15. Alors,

$$\widetilde{H}_0 \overline{P}_\alpha \geq \min \left\{ c_m \frac{\pi^2}{\alpha^{2\delta}}, \frac{\mathcal{D}''(0)\pi^2}{2\alpha^2} \right\} \tag{5.10}$$

et donc $(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)$ est inversible pour $z < 0$. En plus de cela, pour α petit, i.e. $\alpha^{2(1-\delta)} < \frac{1}{2c_m}$,

$$\min\left\{c_m\frac{\pi^2}{\alpha^{2\delta}}, \frac{\mathcal{D}''(0)\pi^2}{2\alpha^2}\right\} \geq c_m\frac{\pi^2}{\alpha^{2\delta}}$$

et

$$\|(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-1}\| \leq \alpha^{2\delta}\frac{1}{\pi^2 c_m - |\alpha^{2\delta}z|} \xrightarrow{\alpha\to 0} 0. \tag{5.11}$$

On obtient aussi de (5.10) que

$$\|(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-1}(c_m k^2\overline{P}_\alpha - z)\| \leq 1. \tag{5.12}$$

Maintenant, soit $a < 0$,

$$\begin{aligned}&\|\overline{P}_\alpha(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{-\frac{1}{2}}\Pi_\alpha\hat{w}(\alpha.) * \Pi_\alpha(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{-\frac{1}{2}}\overline{P}_\alpha\|_{HS}^2\\ &= \int_{|p|,|q|\in[\frac{\pi}{\alpha^\delta},\frac{\pi}{\alpha}]}\frac{1}{c_m p^2 + a^2}|\hat{w}(\alpha(p-q))|^2\frac{1}{c_m q^2 + a^2}dpdq\end{aligned}$$

et pour des petits α, d'après le lemme 5.1.3 il existe un α_0 tel que pour $C > 0$ et $\alpha < \alpha_0$,

$$\|\overline{P}_\alpha(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{-\frac{1}{2}}\Pi_\alpha\hat{w}_*(\alpha.)\Pi_\alpha(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{-\frac{1}{2}}\overline{P}_\alpha\|_{HS}^2 \leq C_{5.13}\frac{\alpha^{2\delta}}{a^2}|\ln(\alpha)|^2 \xrightarrow{\alpha\to 0} 0. \tag{5.13}$$

Comme nous avons

$$\begin{aligned}\|K(z)\| \leq &\|(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}(c_m k^2\overline{P}_\alpha - z)^{\frac{1}{2}}\|^2 \cdot \|(c_m k^2\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{\frac{1}{2}}\|\\ &\cdot \|(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{-\frac{1}{2}}\overline{P}_\alpha\Pi_\alpha\hat{w}(\alpha.) * \Pi_\alpha\overline{P}_\alpha(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{-\frac{1}{2}}\|\end{aligned} \tag{5.14}$$

et d'après l'annexe B.4 on a l'estimation $\|(c_m k^2\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}(c_m k^2\overline{P}_\alpha + a^2)^{\frac{1}{2}}\| = \max\{\frac{a^2}{|z|}, 1\}$, alors pour α assez petit, $\|K(z)\| < 1$ avec la condition sur z suivante :

$$\max\{\frac{a^2}{|z|}, 1\}C_{5.13}\frac{\alpha^{2\delta}}{a^2}|\ln(\alpha)|^2 < 1. \tag{5.15}$$

Cette dernière relation et $\|K(z)\| < 1$ sont vraies quand $\alpha \leq \alpha_R$ pour un certain $\alpha_R := \alpha_R(\varepsilon_0, \delta, a, z)$ assez petit. Alors on peut écrire pour tout $\alpha \leq \alpha_R$:

$$R(z) = (\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}\frac{1}{1 + K(z)}(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}},$$

qui montre, avec l'aide de (5.11), que pour $z < 0$, $R(z)$ est borné par

$$\|R(z)\| \leq C_{5.16}\alpha^{2\delta} \xrightarrow{\alpha\to 0} 0 \tag{5.16}$$

où $C_{5.16} > 0$.

Maintenant regardons l'opérateur $S(z)$. Remarquons d'abord que

$$\begin{aligned}P_\alpha(\widetilde{H} - H_\infty(\alpha))P_\alpha &= P_\alpha(\frac{\mathcal{D}(\alpha k)}{\alpha^2}\Pi_\alpha - \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2}\Pi_\alpha + \Pi_\alpha\hat{w}_*(\alpha.)\Pi_\alpha - \hat{v}_*^\infty(\alpha\cdot))P_\alpha\\ &= (\frac{\mathcal{D}(\alpha k)}{\alpha^2} - \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2})P_\alpha + P_\alpha(\hat{w}_*(\alpha.) - \hat{v}_*^\infty(\alpha\cdot))P_\alpha\\ &= P_\alpha(\frac{\mathcal{D}(\alpha k)}{\alpha^2}\Pi_\alpha - \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2}\Pi_\alpha)P_\alpha.\end{aligned}$$

Dans la suite, on va utiliser la notation de Kato [K, VI.2.7] pour définir la racine carré d'un opérateur T densément défini et fermé :

$$T = \mathrm{sgn}(T)|T|$$

où $\mathrm{sgn}(T)$ est un opérateur partiellement isométrique et $|T|$ est un opérateur auto-adjoint non négatif,

$$T^{\frac{1}{2}} := \mathrm{sgn}(T)|T|^{\frac{1}{2}} \quad \text{et} \quad T =: \mathrm{sgn}(T)|T|^{\frac{1}{2}}|T|^{\frac{1}{2}} =: T^{\frac{1}{2}}|T|^{\frac{1}{2}}.$$

On suppose que $d_\infty(z) > \varepsilon_0$. On introduit,

$$M(z) := |(H_\infty(\alpha) - z)|^{-\frac{1}{2}} P_\alpha(\widetilde{H} - H_\infty(\alpha))P_\alpha(H_\infty(\alpha) - z)^{-\frac{1}{2}}$$

et

$$\begin{aligned} N(z) :=& |(H_\infty(\alpha) - z)|^{-\frac{1}{2}} W(z)(H_\infty(\alpha) - z)^{-\frac{1}{2}} \\ =& |(H_\infty(\alpha) - z)|^{-\frac{1}{2}}(-P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z)\overline{P}_\alpha V P_\alpha)(H_\infty(\alpha) - z)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

alors on peut écrire, si $\|M(z)\| < \frac{1}{2}$ et $\|N(z)\| < \frac{1}{2}$

$$S(z) = |(H_\infty(\alpha) - z)|^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{1 - M(z) - N(z)} (H_\infty(\alpha) - z)^{-\frac{1}{2}}. \tag{5.17}$$

On va prouver maintenant que pour certains α, $\|M(z)\| < \frac{1}{2}$. On utilise le développement de Taylor de la fonction $\mathcal{D}$. Pour N fixé il existe α assez petit tel que pour $k \in [-\frac{\pi}{\alpha^\delta}, \frac{\pi}{\alpha^\delta}]$ alors $|k\alpha| \leq |\pi\alpha^{1-\delta}| \leq 2\pi/N$ et $\mathcal{D}'''(k\alpha)$ est continue d'après $iv)$ du lemme 4.3.15,

$$\frac{\mathcal{D}(k\alpha)}{\alpha^2} P_\alpha - \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2} P_\alpha = \frac{\mathcal{D}^{(3)}(\tilde{k}\alpha)\alpha^3\tilde{k}^3}{6\alpha^2} P_\alpha \tag{5.18}$$

où $|\tilde{k}| \in [0, \frac{\pi}{\alpha^\delta}]$. Alors,

$$\|\frac{\mathcal{D}(k\alpha)}{\alpha^2} P_\alpha - \frac{\mathcal{D}''(0)k^2}{2} P_\alpha\| \leq \frac{\pi^3\alpha^{1-3\delta}}{6} \sup_{|\tilde{k}| \in [0, \frac{\pi}{\alpha^\delta}]} \mathcal{D}^{(3)}(\tilde{k}\alpha),$$

et d'après $ii)$ du lemme 4.3.15,

$$\sup_{|\tilde{k}| \in [-\frac{\pi}{\alpha^\delta}, \frac{\pi}{\alpha^\delta}]} \mathcal{D}^{(3)}(\tilde{k}\alpha) \leq const|\alpha^{1-\delta}|,$$

ce qui est donc borné uniformément en α. Si l'on choisit $\delta < 1/2$ on obtient alors que $M(z)$ est borné pour tout z tel que $d_\infty(z) \geq \varepsilon_0$ et $\|M(z)\|$ tend vers zéro quand α tend vers zéro, et donc $\|M\| < 1/2$ pour $\alpha < \alpha_M := \alpha_M(\varepsilon_0, \delta)$, où $\alpha_M > 0$.

Pour $N(z)$, avec la condition sur z (5.15) :

$$\begin{aligned} \|N(z)\| \leq& \|(H_\infty(\alpha) - z)|^{-\frac{1}{2}} P_\alpha V\overline{P}_\alpha(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}\| \cdot \\ & \cdot \|\frac{1}{1 + K(z)}\| \cdot \|(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}\overline{P}_\alpha V P_\alpha(H_\infty(\alpha) - z)^{-\frac{1}{2}}\| \end{aligned} \tag{5.19}$$

Introduisons le paramètre $(-a^2) < \inf \sigma(H_\infty(\alpha))$, on écrit

$$\begin{aligned} & |(H_\infty(\alpha) - z)|^{-\frac{1}{2}} P_\alpha V\overline{P}_\alpha(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}} = \\ & |(H_\infty(\alpha) - z)|^{-\frac{1}{2}}(H_{\infty,0} + a^2)^{\frac{1}{2}}(H_{\infty,0} + a^2)^{-\frac{1}{2}} P_\alpha V\overline{P}_\alpha \cdot \\ & \cdot (H_{\infty,0} + a^2)^{-\frac{1}{2}}(H_{\infty,0} + a^2)^{\frac{1}{2}}(c_m k^2\overline{P} - z)^{-\frac{1}{2}}(c_m k^2\overline{P} - z)^{\frac{1}{2}}(\widetilde{H}_0\overline{P} - z)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{5.20}$$

et l'on a

$$\begin{aligned}
&\|(H_{\infty,0}+a^2)^{-\frac{1}{2}}P_\alpha\left(\Pi_\alpha\hat{w}_*(\alpha\cdot)\Pi_\alpha\right)\overline{P_\alpha}(H_{\infty,0}+a^2)^{-\frac{1}{2}}\|_{HS}^2\\
&=2\int_0^{\frac{\pi}{\alpha^\delta}}\int_{\frac{\pi}{\alpha^\delta}}^{\frac{\pi}{\alpha}}\frac{1}{cp^2+a^2}|\hat{w}(\alpha(p-q))|^2\frac{1}{cq^2+a^2}dpdq\\
&\leq C_{5.21}\frac{\alpha^\delta}{a^2}|\ln\alpha|^2
\end{aligned}\tag{5.21}$$

qui est borné et tend vers zéro quand α tend vers zéro d'après le lemme 5.1.3. On procède de la même façon pour $\overline{P_\alpha}(\widetilde{H}-H_\infty(\alpha))P_\alpha$. On écrit

$$|(H_\infty(\alpha)-z)|^{-\frac{1}{2}}(H_{\infty,0}+a^2)^{\frac{1}{2}}=|(H_\infty(\alpha)-z)|^{-\frac{1}{2}}(H_\infty(\alpha)+a^2)^{\frac{1}{2}}(H_\infty(\alpha)+a^2)^{-\frac{1}{2}}(H_{\infty,0}+a^2)^{\frac{1}{2}}$$

et on a l'estimation (voir annexe B.4)

$$\|(H_\infty(\alpha)-z)^{-\frac{1}{2}}(H_\infty(\alpha)+a^2)^{\frac{1}{2}}\|^2=\max\{\frac{d_\infty(-a^2)}{d_\infty(z)},1\}.$$

Deuxièmement on écrit

$$H_\infty(\alpha)+a^2=H_{\infty,0}+\hat{v}_*(\alpha\cdot)+a^2=(H_{\infty,0}+a^2)(1+(H_{\infty,0}+a^2)^{-\frac{1}{2}}\hat{v}_*(\alpha\cdot)(H_{\infty,0}+a^2)^{-\frac{1}{2}})$$

et avec l'aide du lemme 5.1.3 on obtient

$$\begin{aligned}
&\|(H_{\infty,0}+a^2)^{-\frac{1}{2}}\hat{v}_*(\alpha\cdot)(H_{\infty,0}+a^2)^{-\frac{1}{2}}\|^2\\
&\leq\frac{\hat{v}_\infty^0\pi^2}{a^2}+c_0^2|3\ln(\alpha)|^2 8\frac{c_m}{a^2}\pi^2<1,
\end{aligned}\tag{5.22}$$

si l'on pose

$$a^2=C_a(\ln\alpha)^2,\tag{5.23}$$

avec $C_a>0$ une constante assez grande. Ceci implique

$$\|(H_\infty(\alpha)+a^2)^{-\frac{1}{2}}(H_{\infty,0}+a^2)^{\frac{1}{2}}\|\leq 1\tag{5.24}$$

et

$$\sigma(H_\infty(\alpha))\cap(-\infty,-C_a(\ln\alpha)^2)=\emptyset$$

qui donne en fait une partie de la preuve de $i)$ de la proposition 5.1.2. Notons bien que a depend de α et on doit le prendre en compte dans l'équation (5.21) et pour la condition 5.15. On doit vérifier que la première tend toujours vers zéro quand α tend vers zéro, et que la seconde est toujours satisfaite, ce qui est le cas. Avec le théorème spectral

$$\|(H_{\infty,0}+a^2)^{\frac{1}{2}}(c_mk^2\overline{P}+a^2)^{-\frac{1}{2}}\|^2\leq\frac{c}{c_m}$$

et en utilisant (5.12) et (5.14) on conclut que $N(z)$ est borné. De plus, on peut trouver α assez petit tel que $\|N(z)\|<\frac{1}{2}$. On doit maintenant discuter la condition sur z pour que ce résultat soit valide. On veut satisfaire la condition suivante :

$$\|N(z)\|\leq\max\{\frac{d_\infty(-a^2))}{d_\infty(z)},1\}\frac{c}{c_m}\cdot const\cdot\frac{\alpha^\delta}{a^2}|\ln\alpha|^2\leq\frac{1}{2}.\tag{5.25}$$

Si l'on suppose que $d_\infty(z)\leq d_\infty(-a^2)$, qui est une condition requise si l'on veut faire l'analyse spectrale de $\widetilde{H}$, on doit satisfaire la condition

$$2d_\infty(-a^2)\frac{c}{c_m}\cdot const\cdot\frac{\alpha^\delta}{a^2}|\ln\alpha|^2\leq d_\infty(z).\tag{5.26}$$

Par ailleurs, comme l'on sait que H_∞ possède du spectre négatif, la condition $d_\infty(z) \leq d_\infty(-a^2)$ implique que $d_\infty(z) \leq C_a(\ln\alpha)^2$ et on peut remarquer que pour α assez petit, l'ensemble des z pour lesquel (5.25) est vérifiée n'est pas nul et de plus

$$2d_\infty(-a^2)\frac{c}{c_m} \cdot const \cdot \frac{\alpha^\delta}{a^2}|\ln\alpha|^2 \leq \varepsilon_0. \tag{5.27}$$

Pour z satisfaisant ces relations, ceci conclut la preuve que $S(z)$ est borné.

Pour les termes hors-diagonaux de (5.8), on définit

$$\alpha_0 := \min\{\alpha_R, \alpha_M, \alpha_N\}$$

et l'on suppose que $\alpha \leq \alpha_0$ et $\varepsilon_0 \leq d_\infty(z) \leq C_a(\ln\alpha)^2$. On écrit $S(z)P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z)$ comme

$$\begin{aligned} &S(z)P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z) = \\ &= |(H_\infty(\alpha)-z)|^{-\frac{1}{2}}\frac{1}{1-M(z)-N(z)}(H_\infty(\alpha)-z)^{-\frac{1}{2}}V(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}}\frac{1}{1+K(z)}(\widetilde{H}_0\overline{P}_\alpha - z)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Alors on retrouve l'expression (5.20) du potentiel V encadré par deux résolvantes et on peut utiliser les résultats précedents. On obtient :

$$\|S(z)P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z)\| \leq \frac{C_{5.28}}{d_\infty(z)}\alpha^{\frac{1}{2}\delta}|\ln\alpha|, \qquad \|R(z)\overline{P}_\alpha V P_\alpha S(z)\| \leq \frac{C_{5.28}}{d_\infty(z)}\alpha^{\frac{1}{2}\delta}|\ln\alpha| \tag{5.28}$$

où $C_{5.28} > 0$. Il reste le terme $R(z)\overline{P}_\alpha V P_\alpha S(z) P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z)$ que l'on peut estimer de la même manière par :

$$\|R(z)\overline{P}_\alpha V P_\alpha S(z) P_\alpha V\overline{P}_\alpha R(z)\| \leq \frac{C_{5.29}}{d_\infty(z)}\alpha^\delta|\ln\alpha|^2. \tag{5.29}$$

On va utiliser maintenant l'estimation suivante pour A, B bornés :

$$\left\|\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^* & B \end{pmatrix}\right\| \leq \|A\| + \|B\|,$$

prouvée en annexe B.5 et on obtient :

$$\|(\widetilde{H}-z)^{-1} - S(z)\| \leq \frac{C_{5.28}\alpha^{\frac{1}{2}\delta}|\ln\alpha| + C_{5.29}\alpha^\delta|\ln\alpha|^2}{d_\infty(z)} \xrightarrow{\alpha\to 0} 0.$$

□

On établit maintenant un dernier lemme qui nous permettra de conclure la preuve de la proposition 5.1.2

Lemme 5.1.5. *Soit $\varepsilon_0 > 0$ et $0 < \delta < 1/2$, Il existe $\alpha_0 = \alpha_0(\varepsilon_0, \delta) > 0$, $C > 0$ et deux constantes $A_{5.30}$ et $B_{5.30}$ telles que si $0 < \alpha \leq \alpha_0$ et $\varepsilon_0 \leq d_\infty(z) \leq C(\ln\alpha)^2$, alors*

$$\|S(z) - (H_\infty(\alpha)-z)^{-1}\| \leq \frac{1}{(d_\infty(z))^2}(A_{5.30}\alpha^{2-4\delta} + B_{5.30}\alpha^\delta|\ln\alpha|^2) \xrightarrow{\alpha\to 0} 0.$$

Démonstration. On a vu dans la preuve précédente que si $\alpha \leq \alpha_0$ et $\varepsilon_0 \leq d_\infty(z) \leq c_a(\ln\alpha)^2$, l'équation (5.17) est bien définie, et en utilisant l'équation de la résolvante on peut aussi écrire

$$S(z) = (H_\infty(\alpha)-z)^{-1} - |(H_\infty(\alpha)-z)|^{-\frac{1}{2}}\frac{M(z)+N(z)}{1-(M(z)+N(z))}(H_\infty(\alpha)-z)^{-\frac{1}{2}},$$

ce qui donne l'estimation

$$\begin{aligned}\|S(z)-(H_\infty(\alpha)-z)^{-1}\| &\leq \|(H_\infty(\alpha)-z)^{-\frac{1}{2}}\|^2\|M(z)+N(z)\|\cdot const\\ &\leq \frac{1}{(d_\infty(z))^2}(A_{5.30}\alpha^{2-4\delta}+B_{5.30}\alpha^\delta|\ln\alpha|^2)\xrightarrow{\alpha\to 0}0,\end{aligned}\tag{5.30}$$

où $A_{5.30}, B_{5.30}>0$ sont des constantes assez grandes. □

On conclut enfin la preuve du théorème 5.1.2 en utilisant les deux précédents lemmes et en remarquant que

$$\|(\widetilde{H}-z)^{-1}-(H_\infty(\alpha)-z)^{-1}\|\leq\|(\widetilde{H}-z)^{-1}-S(z)\|+\|S(z)-(H_\infty(\alpha)-z)^{-1}\|.$$

5.2 L'exciton

On va montrer ici que l'Hamiltonien $H_\infty(\alpha)$ possède un spectre proche de ceux des modèles étudiés dans les publications [CDP] et [CDR2].

Soit F l'opérateur transformée de Fourier sur la ligne et soit

$$h_e := F^{-1}H_\infty(\alpha)F.\tag{5.31}$$

L'Hamiltonien h_e peut s'écrire comme :

$$h_e =: -\frac{\mathcal{D}''(0)}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+v^{r,\alpha}(x)\tag{5.32}$$

où le potentiel $v^{r,\alpha}$ est la transformée de Fourier inverse de $\hat{v}_\infty(\alpha\cdot)$. On rappelle l'expression

$$\hat{v}_\infty(k-k')=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\sum_{n_1\in\mathbb{Z}^*}\frac{S_c(n_1)}{N}\hat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{N}n_1)-\sum_{n_1\in\mathbb{Z}}\widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(k-k'+\frac{2\pi}{N}n_1\right)\right),$$

et comme l'opérateur associé est un opérateur de convolution, la transformée de Fourier inverse donne un opérateur de multiplication par la fonction $v^{r,\alpha}$. Le premier terme de $\hat{v}^{r,\alpha}$ est une constante, ce qui va donner, au sens des distributions, après transformée inverse, une distribution de Dirac. Le second terme donne :

$$\begin{aligned}&\int_{\mathbb{R}}\sum_{n_1\in\mathbb{Z}}\widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(\alpha K+\frac{2\pi}{N}n_1\right)e^{iKx}dK=\\ &=\sum_{n_1\in\mathbb{Z}}\widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)\int_{\mathbb{R}}\hat{v}^r_{\text{eff}}\left(K'\right)e^{i\frac{K'x}{\alpha}}\frac{dK'}{\alpha}e^{i\frac{2\pi}{N}\frac{n_1x}{\alpha}}\\ &=\sum_{n_1\in\mathbb{Z}}\widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)e^{i\frac{2\pi}{N}n_1\frac{x}{\alpha}}\frac{1}{\alpha}v^r_{\text{eff}}(\frac{x}{\alpha})\sqrt{2\pi}\end{aligned}$$

On a[2] d'après (4.10)

$$\begin{aligned} C_u(\frac{x}{\alpha}) := C_u(x,L) := \sum_{n_1\in\mathbb{Z}} \widehat{|u_v|^2}(n_1)\widehat{|u_c|^2}(n_1)e^{i\frac{2\pi}{N}n_1\frac{x}{\alpha}} &= \left(F^{-1}\widehat{|u_v|^2}\widehat{|u_c|^2}\right)(\frac{x}{\alpha}) \\ =&\frac{1}{L}\left(F^{-1}\widehat{|u_v|^2|u_c|^2}\right)(\frac{x}{\alpha}) \\ =&\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}|u_v(\frac{x}{\alpha}-x')|^2|u_c(x')|^2dx' \\ =&\int_{-1/2}^{1/2}|u_v(\frac{x}{\alpha}-XL)|^2|u_c(XL)|^2dX. \end{aligned} \tag{5.33}$$

La fonction C_u est positive, périodique de période $2\pi/L$, bornée sur $\mathbb{R}$ et bornée uniformément par rapport au paramètre L. On obtient donc au sens des distributions :

$$v^{r,\alpha}(x) = C(r)\delta(x) - C_u(x)\frac{1}{\alpha}v^r_{\text{eff}}(\frac{x}{\alpha}) \tag{5.34}$$

où

$$C(r) := \frac{1}{2\pi}\sum_{n_1\in\mathbb{Z}^*}\widehat{\overline{u_v}u_c}(n_1)\widehat{\overline{u_c}u_v}(n_1)\hat{v}^r_{\text{eff}}(n_1)$$

c'est à dire que v_∞ est un opérateur défini au sens des formes avec forme associée q_i :

$$q_i(f,f) := C(r)|f(0)|^2 - \int_{\mathbb{R}} C_u(\frac{x}{\alpha})\frac{1}{\alpha}v^r_{\text{eff}}(\frac{x}{\alpha})|f(x)|^2dx$$

avec $f \in D(\frac{\partial^2}{\partial x^2})$. On rappelle la propriété du potentiel v^r_{eff} sur le cylindre infini :

$$\frac{1}{r}v^1_{\text{eff}}(\frac{x}{r}) = v^r_{\text{eff}}(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{1}{\sqrt{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2}}}dy.$$

On peut voir ici que α joue le même rôle que le paramètre r présent dans v^r_{eff}. On va donc pouvoir utiliser les résultats de l'analyse du comportement de v^r_{eff} quand r tend vers zéro, donnés dans le papier [CDR2] pour conclure sur le spectre de h. Ceci est fait au chapitre 6.

On peut enfin remarquer ici que la chiralité du nanotube, qui determine la fonction $\mathcal{D}$, influence le comportement de l'exciton à travers la valeur $\mathcal{D}''(0)$.

5.3 Coefficient d'absorption optique

Au chapitre 3, le coefficient d'absorption optique a été exprimé en fonction des états propres de l'Hamiltonien avec interactions entre électrons. Il est temps maintenant d'utiliser les résultats obtenus aux chapitres 4 et 5 pour obtenir la formule finale.

La convergence en norme des résolvantes de H_{exc} et h_e avec λ, ainsi que les propriétés du spectre de h_e que l'on verra dans le prochain chapitre, permettent, grâce à la théorie de perturbation, de donner une estimation des états propres de H_{exc}.

Soit la matrice d'opérateurs agissant dans $\ell^2(\mathbb{C}\times\mathbb{C}, L^2(-\pi,\pi))$

$$\widetilde{M} := \begin{pmatrix} E_G & 0 \\ 0 & E_G + \mathcal{D}(0) + H_{exc} \end{pmatrix},$$

[2]Dans l'équation qui suit, F^{-1} symbolise la transformée inverse de Fourier sur le cercle de périmètre L, comme définie en (4.10).

et soit $\{\widehat{\varphi_n}\}_n$ ses vecteurs propres et $\{\phi_n\}_n$ ceux de la matrice M. D'après le théorème 4.3.3 et les propositions 4.3.10et 4.3.14, pour λ petit et N grand, il existe une constante $C_p > 0$ telle que pour tout entier $n \in [0, N]$

$$\phi_n = (1 + \mathcal{R}(\lambda, N))J^*\widehat{\varphi_n},$$

où

$$\mathcal{R}(\lambda, N) \leq c_\lambda \lambda + c_N \frac{1}{\sqrt{N}},$$

avec c_λ, c_N des constantes positives. On rappelle que J^* (défini en (4.47)) est l'opérateur qui permet le passage de l'espace continu à l'espace discret et que l'on a pour tout $k_j = \frac{2\pi}{L} j \in [-\pi, \pi) \cap \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$:

$$(J^*\widehat{\varphi_n})(k_j) = \int_{-\pi}^{\pi} \chi_j(k)\widehat{\varphi_n}(k)dk = (\chi_j, \widehat{\varphi_n}).$$

Comme on connaît une approximation des états propres de $\widetilde{M}$ avec l'étude de h_e, on peut écrire $\widetilde{M}$ comme une matrice diagonale. Alors ψ_0, l'état fondamental, et ψ_n, les états excités de H_1 agissant dans $\mathcal{E}$ peuvent s'écrire si λ est suffisamment petit et N assez grand :

$$\psi_0 = (1 + \mathcal{R}(\lambda, N))|0>,$$
$$\psi_n = \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{N/2} (1 + \mathcal{R}(\lambda, N))(J^*\widehat{\varphi_n})(k_j)a^*_{c,k_j}a_{v,k_j}|0> .$$

On rappelle que $P = -i\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial}{\partial_{x_j}}$, et comme $\psi_0, \psi_n, |0> \in D(H_0) = \mathcal{W}^2(\mathcal{S}_L^N)$, on peut leur appliquer l'opérateur P, le résultat reste borné et on peut donc écrire

$$< \psi_0, P\psi_n >= \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{N/2} (1 + \mathcal{R}(\lambda, N))^2(J^*\widehat{\varphi_n})(k_j) < 0|Pa^*_{c,k_j}a_{v,k_j}|0> . \tag{5.35}$$

Si l'on exprime dans la base des vecteurs propres de l'Hamiltonien sans interaction entre électrons,

$$a^*_{c,k_j}a_{v,k_j}|0>=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma\in\Sigma_N}(-1)^{m(\sigma)}e_{c,k_j}(x_{\sigma(1)}) \otimes e_{v,k_{-\frac{N}{2}}}(x_{\sigma(2)}) \otimes ... \otimes e_{v,k_{j-1}}(x_{\sigma(j-1)})\otimes$$
$$\otimes e_{v,k_{j+1}}(x_{\sigma(j+1)}) \otimes ... \otimes e_{v,k_{\frac{N}{2}}}(x_{\sigma(\frac{N}{2})}),$$

alors on obtient

$$< 0|Pa^*_{c,k_j}a_{v,k_j}|0>= \frac{1}{N!}\sum_{l=1}^{N}\sum_{\sigma,\sigma'}(-1)^{m(\sigma)+m(\sigma')}$$
$$\times \int_{\mathcal{S}_L^N} e_{v,k_{-\frac{N}{2}}}(x_{\sigma(1)})...e_{v,k_{\frac{N}{2}}}(x_{\sigma(N)})\frac{d}{dx_l}e_{c,k_j}(x_{\sigma'(1)})...e_{v,k_{\frac{N}{2}}}(x_{\sigma'(N)})dx_1...dx_N.$$

Puisque pour tout k_j, k_l

$$\int_{\mathcal{S}_L} e_{v,k_j}(x)e_{c,k_l}(x)dx = 0$$

tous les termes où la dérivée n'est pas appliquée à e_{c,k_j} sont nuls. Alors, en utilisant que

$$\int_{\mathcal{S}_L} e_{v,k_j}(x)e_{v,k_l}(x)dx = \delta_{k_l k_j},$$

on a

$$\begin{aligned} < 0|Pa^*_{c,k_j}a_{v,k_j}|0 > &= \frac{1}{N!}\sum_{l=1}^{N}\int_{\mathcal{S}_L} e_{v,k_j}(x_l)e'_{c,k_j}(x_l)dx_j \cdot (N-1)! \\ &= < e_{v,k_j}, e'_{c,k_j} > . \end{aligned}$$

Alors l'expression (5.35) se simplifie en

$$\begin{aligned} < \psi_0, P\psi_n > &= \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{N/2} (1+\mathcal{R}(\lambda,N))^2 (J^*\widehat{\varphi_n})(k_j) < e_{v,k_j}, e'_{c,k_j} > \\ &= \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{N/2} (1+\mathcal{R}(\lambda,N))^2 (J^*\widehat{\varphi_n})(k_j)\frac{1}{L}\int_{\mathcal{S}_L} \overline{u_v(x)}u'_c(x)dx. \end{aligned}$$

On rappelle que u_v et u_c sont périodiques de période 1 et que $L \in \mathbb{N}$, ce qui donne

$$\frac{1}{L}\int_{\mathcal{S}_L} \overline{u_v(x)}u'_c(x)dx = \int_{-1/2}^{1/2} \overline{u_v(x)}u'_c(x)dx.$$

En outre,

$$\begin{aligned} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{N/2} (J^*\widehat{\varphi_n})(k_j) &= \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{j=-\frac{N}{2}}^{N/2} \chi_j(k)\widehat{\varphi_n}(k)dk = \sqrt{\frac{N}{2\pi}}\int_{-\pi}^{\pi} \widehat{\varphi_n}(k)dk \\ &= \sqrt{\frac{N}{2\pi}}\varphi_n(x=0). \end{aligned}$$

Et enfin, si l'on introduit la notation

$$U_{vc} := \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \overline{u_v(x)}u'_c(x)dx,$$

on obtient

$$< \psi_0, P\psi_n > = \varphi_n(0)\sqrt{N}(1+\mathcal{R}(\lambda,N))^2 U_{vc}.$$

On va maintenant exprimer les fonctions φ_n en fonction des vecteurs propres de l'Hamiltonien de l'exciton $H_\infty(\alpha)$ que l'on notera par f_n. Pour cela on utilise les résultats du théorème 5.1.2 où on prend $\delta = 4/9$. Pour λ assez petit, il existe une constante $C_1 > 0$ telle que l'on peut écrire :

$$\varphi_n = \left(1 + \lambda^{2/9}|\ln\lambda|C_1\right) f_n,$$

et donc

$$\begin{aligned} < \psi_0, P\psi_n > &= f_n(0)\sqrt{N}U_{vc}\left(1+\lambda^{2/9}|\ln\lambda|C_1\right)(1+\mathcal{R}(\lambda,N))^2, \\ < \psi_0, P\psi_n > &= f_n(0)\sqrt{N}U_{vc}\left(1+\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}}) + \mathcal{O}(\lambda^{2/9}|\ln\lambda|)\right). \end{aligned}$$

Si l'on revient maintenant sur la formule du spectre d'absorption optique donnée au chapitre 3, formule (3.17) :

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{Z_1}\sum_{k\geq 0} \frac{4\eta\omega}{[(\lambda_k-\lambda_0-\omega)^2+\eta^2][(\lambda_k-\lambda_0+\omega)^2+\eta^2]}|< \psi_k, P\psi_0 >|^2 + o_\beta(1),$$

on obtient pour λ assez petit, N assez grand

$$\begin{aligned}\alpha(\omega) =& \frac{|U_{vc}|^2 N}{Z_1} \sum_{k\geq 0} \frac{4\eta\omega}{[(\lambda_k - \lambda_0 - \omega)^2 + \eta^2][(\lambda_k - \lambda_0 + \omega)^2 + \eta^2]} |f_n(0)|^2 \times \\ & \times \left(1 + \mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}}) + \mathcal{O}(\lambda^{2/9} |\ln \lambda|)\right) + o_\beta(1). \end{aligned} \tag{5.36}$$

Pour les relations entre les valeurs propres, si on appelle ϵ_k les valeurs propres (négatives) de h_e, on peut approximer les énergies $\{\lambda_k\}_k$ par

$$\begin{aligned} \lambda_0 &= E_G, \\ \lambda_k &= (E_G + \mathcal{D}(0) + \epsilon_k) \left(1 + \mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}}) + \mathcal{O}(\lambda^{2/9} |\ln \lambda|)\right). \end{aligned}$$

On peut remarquer que le terme principal de α a le même comportement en ω que l'expression du coefficient d'absorption donné dans [HK].

Chapitre 6

L'exciton

On va maintenant étudier l'Hamiltonien h_e obtenu au chapitre précédent et défini en (5.32) et on va faire le lien avec les résultats obtenus dans l'étude [CDR2]. Dans cette publication, on étudie un système de deux particules sur un cylindre lisse, c'est à dire sans potentiel périodique. Ces deux particules ont des charges opposées et les auteurs suggèrent que le système étudié peut modéliser un exciton dans un nanotube de carbone. Le fait que l'on puisse trouver une relation entre la présente étude et l'étude [CDR2] pourrait justifier leur approche simplifié et en même temps justifier les travaux des physiciens Pedersen [P1], [P2] et Kostov *et al.* [KCM]. Il est donc intéressant de voir si le modèle utilisé ici avec prise en compte du potentiel périodique des atomes et d'un système à N particules peut se ramener au modèle plus simple de ces études.

On va donc discuter dans un premier temps sur le lien que l'on peut faire entre la présente approche et l'étude [CDR2]. On va ensuite donner l'étude [CDR2]. Enfin, on incluera le papier [CPR] qui effectue une comparaison entre les résultats analytiques de [CDR2] et une approche variationnelle, qui permet donc une comparaison avec la physique.

6.1 Du modèle à N particules au modèle a deux particules

Bien que partant de différentes suppositions, les deux approches, celle à N particules et celle à 2 particules, convergent dans leurs résultats. C'est après la réduction à une dimension, technique utilisée dans les deux études, que l'on peut montrer que le problème a N particules sur la ligne est "proche" de celui à 2 particules sur la ligne.

L'étude [CDR2] qui est incluse dans la suite de ce chapitre prend comme point de départ un système à 2 particules à la surface d'un cylindre infini. L'espace des configurations est $\mathbb{R} \times [-\pi r, \pi r)$ et l'Hamiltonien est définit formellement par la relation (2.1) de cette publication, et a pour expression :

$$\bar{H}^r = -\hbar^2 \left(\frac{\Delta_{x_1}}{2m_1} + \frac{\Delta_{x_2}}{2m_2} + \frac{\Delta_{y_1}}{2m_1} + \frac{\Delta_{y_2}}{2m_2} \right) - V^r(x_1 - x_2, y_1 - y_2), \tag{6.1}$$

où

$$V^r(x, y) := \frac{-e_1 e_2}{\varepsilon \sqrt{x^2 + 4r^2 \sin^2\left(\frac{y}{2r}\right)}} \tag{6.2}$$

$(x_i, y_i) \in (\mathbb{R} \times [-\pi r, \pi r))$ sont les coordonnées sur le cylindre des 2 particules chargées, m_i leur masse, et e_i leur charge qui sont de signe opposées telles que $V_r > 0$. Ici ε est la permittivité electrique du matériau. L'opérateur est en fait défini au sens des formes car le potentiel V_r est seulement L^1 autour de l'origine.

Il est ensuite procédé à la réduction à une dimension du problème en même temps qu'à la séparation du centre de masse. La procédure est exactement la même que dans le chapitre 1 de la

présente étude. C'est à dire que le caractère petit du rayon du tube est utilisé pour montrer que l'étude du spectre de basse énergie se réduit à l'étude du spectre d'un modèle à une dimension, qui est le projeté dans le sous-espace fondamental du Laplacien transverse du modèle de départ.

Un Hamiltonien unidimensionnel est obtenu en (2.28) de l'article

$$H^r_{\text{eff}} := -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - V^r_{\text{eff}}(x) \tag{6.3}$$

avec le potentiel effectif donné en (2.27)

$$V^r_{\text{eff}}(x) = \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} V^r(x,y)dy. \tag{6.4}$$

On remarque à ce stade que l'on a la propriété suivante pour le potentiel :

$$V^r_{\text{eff}}(x) = \frac{1}{r}V^1_{\text{eff}}(\frac{x}{r}).$$

Dans le cas de h_e, le potentiel (défini en (5.34)) est

$$v_\infty(x) = v^0_\infty - v^k_\infty = C(r)\delta(x) - C_u(\frac{x}{\alpha})\frac{1}{\alpha}v(\frac{x}{\alpha})$$

avec $C(r)$ dépendant de r mais pas de α. On introduit l'opérateur défini au sens des formes suivant :

$$\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} := H^\alpha_{\text{eff}} + C\delta,$$

et choisit cet opérateur, où précisément $\alpha = r$, comme opérateur limite de h_e quand α tend vers zéro. On va maintenant justifier ce choix. Les fonctions u_v et u_c sont continues, périodiques, bornées, normalisées et soit

$$A := \sup_x |C_u(\frac{x}{\alpha}) - 1| \leq |\sup_{x,x'} |u_v(\frac{x}{\alpha})|^2 \cdot |u_c(x')|^2 - 1| < \infty,$$

borné uniformément en α, alors pour $z \in \rho(H_{\text{eff}})$ la quantité

$$\|(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} - z)^{-\frac{1}{2}}(v^k_\infty - V^\alpha_{\text{eff}})(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} - z)^{-\frac{1}{2}}\| =: \|K^\alpha(z)\| \leq A\|(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} - z)^{-\frac{1}{2}}V^\alpha_{\text{eff}}(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} - z)^{-\frac{1}{2}}\| \tag{6.5}$$

Comme V^α_{eff} est relativement borné au Laplacien avec borne relative nulle on a :

$$\|(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} - z)^{-\frac{1}{2}}V^\alpha_{\text{eff}}(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} - z)^{-\frac{1}{2}}\| \leq \varepsilon + \frac{1}{\varepsilon d(z, \sigma(H^\alpha_{\text{eff}}))}$$

quel que soit $\varepsilon > 0$. Donc pour $d(z, \sigma(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}}))$ suffisamment grande, on peut choisir ε tel que la quantité (6.5) est inférieure à 1/2. Sous cette condition, on a $d(z, h_e)) > 0$ et

$$\|(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}} - z)^{-1} - (h_e - z)^{-1}\| \leq \frac{1}{d(z, \sigma(\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}}))}\|K\|(1 - \|K\|)^{-1}$$

Si les variations de u_v et u_c sont suffisamment petites, on peut tracer dans le plan complexe un contour Γ autour de chaque valeur propre de $\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}}$ et où pour tout $z \in \Gamma$, la différence des résolvantes est analytique et inférieure à 1 en norme. La théorie de perturbation permet de conclure sur la stabilité du spectre et montre aussi que les spectres de $\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}}$ et h_e sont proches. Pour conclure l'étude du spectre de h_e, on doit comprendre comment le spectre de $\widetilde{H}^\alpha_{\text{eff}}$ se comporte avec α.

Dans [CDR2], après une étude perturbative, l'étude du spectre de basse énergie de l'Hamiltonien de H^{α}_{eff} est réduite à l'étude de H_C défini au sens des formes en (3.26) de l'article, modèle dont l'expression formelle est la suivante :

$$H_C := -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\ln(\alpha/2)\,\delta - \frac{1}{|x|}, \tag{6.6}$$

Ceci est vrai pour des α assez petits.

Il apparait maintenant un lien entre H_C et l'Hamiltonien h_e obtenu en (5.32) via l'Hamiltonien $\widetilde{H}^{\alpha}_{\text{eff}}$. En effet, on peut écrire, en utilisant [CDR2], que $\widetilde{H}^{\alpha}_{\text{eff}}$ a un spectre proche du spectre de :

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\ln(\alpha/2)(1 - \frac{C(r)}{\ln(\alpha/2)})\,\delta - \frac{1}{|x|}$$

et il est clair que pour des α assez petits, celui-ci tend vers le spectre de H_C. L'étude [CDR2], développée dans la section qui suit, va donc donner une approximation des états propres du système de départ, c'est à dire du modèle à N particules du nanotube.

6.2 L'influence du rayon et de la chiralité

Ceci est une courte section qui revient sur le résultat du chapitre 1. On a vu dans ce chapitre que le potentiel d'interaction entre électrons, projeté en une dimension, dépend du rayon r du nanotube. Dans la suite de l'étude, on a fixé ce rayon à une valeur assez petite et non nulle, afin de pouvoir étudier l'influence d'autres paramètres. On peut maintenant revenir sur ce fait et discuter de la dépendance en r du système.

Dans l'expression de l'Hamiltonien H_0, le paramètre r est présent uniquement dans le potentiel v_L d'intéraction entre électrons. Plus précisément, v_L s'exprime en fonction de V_c^r qui est la fonction qui donne la dépendance en r. Dans ce qui a précédé, le potentiel V_c^r n'a pas été approximé par une autre fonction, et ainsi, on a obtenu à la section 5.2 que l'Hamiltonien final à étudier dépend de V_c^r, par le bias de v_∞. Grâce à cela, on obtient donc directement que l'Hamiltonien de l'exciton h dépend de r et on connait explicitement sa dépendance. Il faut cependant faire attention à la partie sur l'approximation de la matrice M traitée en 4.3.1. On demande dans cette partie que la perturbation hors-diagonale $\lambda\theta$ soit petite, ce qui est vrai pour r fixe et λ petit. Mais si on fixe λ, ce n'est plus vrai si l'on fait tendre r vers zéro car le potentiel v^r_{eff} diverge comme $|\ln r|$ quand r tend vers zéro. Pour l'étude quand r tend vers zéro du modèle à N particules, si l'on veut faire le lien avec l'étude [CDR2], il faut ajouter une condition sur r en fonction de λ, qui nécessite un travail supplémentaire. Après cela, on peut procéder similairement à la section précédente et s'inspirer de l'article cité pour obtenir des informations sur le spectre de M.

En ce qui concerne la chiralité, en utilisant les remarques en conclusion du chapitre 1, dans la section 4.2.1 et en conclusion de la section 5.2, on peut voir que son effet n'influence que seulement deux quantités : $\mathcal{D}(0)$, le gap entre bande de conduction et de valence et $\mathcal{D}''(0)/2$ qui est l'inverse de la masse de l'exciton.

6.3 Modèles effectif pour les excitons dans les nanotubes de carbone

Ann. Henri Poincaré 8 (2007), 135–163
© 2006 Birkhäuser Verlag Basel/Switzerland
1424-0637/010135-29, *published online* December 12, 2006
DOI 10.1007/s00023-006-0303-7

Annales Henri Poincaré

Effective Models for Excitons in Carbon Nanotubes

Horia D. Cornean, Pierre Duclos, and Benjamin Ricaud

Abstract. We analyse the low lying spectrum of a model of excitons in carbon nanotubes. Consider two particles with opposite charges and a Coulomb self-interaction, placed on an infinitely long cylinder. If the cylinder radius becomes small, the low lying spectrum of their relative motion is well described by a one-dimensional effective Hamiltonian which is exactly solvable.

1. Introduction

In order to understand the quantum mechanics of carbon nanotubes, one has to reconsider many classical problems in which the systems are restricted to low dimensional configuration spaces. The effects induced by these special shapes are significant. For example, optical properties and electrical conductivity in nanotubes and nanowires are highly influenced by their geometry.

In a periodic structure, bands of allowed and forbidden energies are characteristic for non-interacting electrons. When applying an external perturbation, such as light, electrons can only absorb the amount of energy which allows them to jump from an occupied level of energy to a free one. In the particular case of a semi-conductor, at low temperatures, the band of energies are either full (valence bands) or empty (conduction bands). So the electron must absorb a fairly large amount of energy to jump to the conduction band.

When the self-interaction is also considered, the mathematical problem of the optical response becomes very difficult, and there are not many rigorous results in this direction. Here is a sketchy description of what physicists generally do (see for example the book of Fetter and Walecka [7]):

1. Work in the grand-canonical ensemble, at zero temperature, and the Fermi energy E_F is in the middle of an energy gap;
2. Switch to an electron-hole representation, via a Bogoliubov unitary transformation. The new non-interacting ground state is the tensor product of two

vacua. If before an excited state meant that an electron was promoted from an occupied energy state from below E_F to an empty state above E_F, in the electron-hole representation it simply means that an electron-hole pair was created;

3. Try to diagonalize in one way or the other the true, self-interacting many-body Hamiltonian by restricting it to a certain subspace of "physically relevant" excited states; this usually amounts to formulate a Hartree–Fock problem;
4. Try to obtain an effective one-body Hamiltonian, whose spectrum approximates in some way the original problem in a neighborhood of E_F;
5. The bound states of this effective one-body operator are called excitons. They describe virtual, not real particles;
6. Use the exciton energies to correct the optical response formulas derived in the non-interacting case.

Now this one-body effective Hamiltonian is a complicated object in general. If one makes a number of further assumptions like:

1. There is only one conduction band above E_F and only one valence band below E_F;
2. The dispersion law of these two energy bands is replaced with paraboloids (effective mass approximation),

then this one body effective Hamiltonian is nothing but the one describing the relative motion of a positively charged particle (a hole) and a negatively charged particle (electron), interacting through an eventually screened Coulomb potential. Let us stress that this procedure is generally accepted as physically sound in the case when the crystal is periodic in all three dimensions.

If a special geometry is imposed (i.e., the electrons are confined on long and thin cylinders made out of carbon atoms) then the above procedure has to be completely reconsidered. The problem is even more complicated, because two dimensions are on a torus and the band structure only arises from the longitudinal variable. Even the position of the Fermi level moves when the radius of the cylinder varies.

It has been argued by physicists [11, 12] that one can still write down a Hartree–Fock type eigenvalue problem which describes the excited states near the Fermi level. This operator is a two-body one, which does not in general allow a complete reduction of its mass center. A mathematically sound formulation of this Hartree–Fock problem would be of certain interest, but it is not what we do in this paper. We rather perform the spectral analysis of an operator which has been conjectured by physicists as being the relevant one.

The main point in investigating these low dimensional structures, is that the interaction between electrons is enhanced and gives much stronger exciton effects than in three dimensions. This means that some new energy states appear deep inside the forbidden energy band. The smaller the radius, the more important

these new energies are. That is because they allow photons with much smaller energy than the band gap to be absorbed into the material.

We will therefore consider two charged particles living on a cylinder and interacting through an attractive Coulomb potential. As we have already pointed out above, this operator models an effective Hamiltonian for excitons in carbon nanotubes, according to [11] and [12]. *Remember that it has nothing to do with real particles living on the nanotube, the exciton being just a mathematical artifact describing virtual particles.* We hope that our current results could also describe excitons living in nanowires [2], or two particles in a strong magnetic field as in [4]. Let us mention that our paper is an improvement and a continuation of a previous work done in [6].

2. The mathematical model

Our configuration space is a cylinder of radius r and infinite length, space denoted by $\mathcal{C}_r = \mathbb{R} \times rS^1$, S^1 being the unit circle. The coordinates on the cylinder are $(x, y) \in (\mathbb{R} \times rS^1)$ where x is the variable along the tube axis and y is the transverse coordinate.

The two virtual particles live in the Hilbert space $L^2(\mathcal{C}_r \times \mathcal{C}_r)$. We formally consider the Hamiltonian

$$\bar{H}^r = -\hbar^2 \left(\frac{\Delta_{x_1}}{2m_1} + \frac{\Delta_{x_2}}{2m_2} + \frac{\Delta_{y_1}}{2m_1} + \frac{\Delta_{y_2}}{2m_2} \right) - V_r(x_1 - x_2, y_1 - y_2)\,, \tag{2.1}$$

where

$$V_r(x, y) := \frac{-e_1 e_2}{\varepsilon \sqrt{x^2 + 4r^2 \sin^2\left(\frac{y}{2r}\right)}}\,. \tag{2.2}$$

(x_i, y_i) are the coordinates on the cylinder of the two charged particles, m_i their masses, and e_i their charges which are of opposite sign so that $V_r > 0$. Here ε is the electric permittivity of the material. In the sequel we will set $\hbar = \varepsilon = 1$. The potential V^r is the three dimensional Coulomb potential simply restricted to the cylinder. We justify the expression of V^r by Pythagora's theorem. The cylinder is embedded in $\mathbb{R}^3$. The distance ρ from one particle to the other in $\mathbb{R}^3$ is:

$$\rho^2 = (x_1 - x_2)^2 + 4r^2 \sin^2\left(\frac{y_1 - y_2}{2r}\right)$$

where $|\, 2r \sin\left(\frac{y_1 - y_2}{2r}\right) |$ is the length of the chord joining two points of coordinate y_1 and y_2 on the circle.

Now consider the space

$$\mathcal{D}_0 = \Big\{ f \in C^\infty(\mathcal{C}_r \times \mathcal{C}_r) : \quad \forall \alpha_{1,2}, \beta_{1,2}, \gamma_{1,2} \in \mathbb{N} \tag{2.3}$$
$$\left| x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} D_{x_1}^{\beta_1} D_{x_2}^{\beta_2} D_{y_1}^{\gamma_1} D_{y_2}^{\gamma_2} f(x_1, y_1, x_2, y_2) \right| \leq C_{\alpha,\beta,\gamma} \Big\}$$

of "Schwartz functions along x" and smooth and $2\pi r$-periodic along y. Clearly $\mathcal{D}_0$ is dense in the Sobolev space $\mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r^2)$. Let us define on $\mathcal{D}_0$ the kinetic quadratic form

$$t_0[\psi] = \frac{1}{2m_1}\left(\|\partial_{x_1}\psi\|^2 + \|\partial_{y_1}\psi\|^2\right) + \frac{1}{2m_2}\left(\|\partial_{x_2}\psi\|^2 + \|\partial_{y_2}\psi\|^2\right) \tag{2.4}$$

and the quadratic form associated with the Coulomb potential on the cylinder:

$$t_V[\psi] = \|\sqrt{V_r}\psi\|^2, \tag{2.5}$$

$$\mathcal{D}_0 \subset \left\{ \psi \in L^2(\mathcal{C}_r^2), \right.$$
$$\left. \int_{\mathcal{C}_r^2} V_r(x_1 - x_2, y_1 - y_2) \mid \psi(x_1, x_2, y_1, y_2) \mid^2 dx_1 dx_2 dy_1 dx_2 < \infty \right\}.$$

Finally, define the form

$$t_H := t_0 - t_V \quad \text{on the domain } \mathcal{D}_0\,. \tag{2.6}$$

The sesquilinear form induced by t_0 is densely defined, closable, symmetric, non-negative, and its corresponding selfadjoint operator H_0 is $-\frac{1}{2m_1}\Delta_1 - \frac{1}{2m_2}\Delta_2$ with periodic boundary conditions in the y variables. Its form domain is $\mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r^2)$, and is essentially self-adjoint on $\mathcal{D}_0$.

2.1. Center of mass separation in the longitudinal direction

We introduce the total mass $M := m_1 + m_2$ and the reduced mass $\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$. Denote as usual with

$$\begin{cases} X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1+m_2}, & x = x_1 - x_2\,, \\ Y = y_2, & y = y_1 - y_2\,, \end{cases}$$

then,

$$\begin{cases} x_1 = X + \frac{m_2}{M}x, & x_2 = X - \frac{m_1}{M}x\,, \\ y_1 = y + Y, & y_2 = Y\,. \end{cases}$$

Unfortunately, for the $y_1,\ y_2$ variables we cannot use Jacobi coordinates because the transformation does not leave invariant the domain of the Laplacian (the periodic boundary conditions are not preserved). That is why we use atomic coordinates y and Y instead. In these new coordinates, the total Hilbert space splits in a tensor product $L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2[\mathbb{R} \times (rS^1)^2]$. More precisely, if we denote by

$$U^{-1} : L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2\left[\mathbb{R} \times (rS^1)^2\right] \mapsto L^2(\mathcal{C}_r^2), \quad [U^{-1}f](x_1, y_1, x_2, y_2) = f(X, x, Y, y)$$

then it is quite standard to show that after this variable change we can separate away the X variable and for $f, g \in U[\mathcal{D}_0]$ we get:

$$\begin{aligned} t_H(U^{-1}f, U^{-1}g) = & \frac{1}{2M}\langle \partial_X f, \partial_X g\rangle + \frac{1}{2m_2}\langle \partial_Y f, \partial_Y g\rangle \\ & + \frac{1}{2\mu}\langle \partial_x f, \partial_x g\rangle + \frac{1}{2\mu}\langle \partial_y f, \partial_y g\rangle \\ & - \frac{1}{m_2}\langle \partial_y f, \partial_Y g\rangle - \left\langle \sqrt{V_r(x,y)}f, \sqrt{V_r(x,y)}g\right\rangle . \end{aligned} \tag{2.7}$$

Note that the subset $U[\mathcal{D}_0]$ has the same properties as $\mathcal{D}_0$ but in the new variables. Therefore we can concentrate on the reduced form

$$\begin{aligned} t_h(f,g) = & \frac{1}{2m_2}\langle \partial_Y f, \partial_Y g\rangle \\ & + \frac{1}{2\mu}\langle \partial_x f, \partial_x g\rangle + \frac{1}{2\mu}\langle \partial_y f, \partial_y g\rangle \\ & - \frac{1}{m_2}\langle \partial_y f, \partial_Y g\rangle - \left\langle \sqrt{V_r(x,y)}f, \sqrt{V_r(x,y)}g\right\rangle , \end{aligned} \tag{2.8}$$

densely defined on smooth enough functions in $L^2[\mathbb{R}\times(rS^1)^2]$, decaying along the x variable. Consider the decomposition $L^2[\mathbb{R}\times(rS^1)^2] = \bigoplus_{k\in\mathbb{Z}} L^2(\mathbb{R}\times rS^1)$ implemented by the Fourier series

$$f(x,y,Y) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} \frac{e^{iY\frac{k}{r}}}{\sqrt{2\pi r}}\hat{f}_{k,r}(x,y)$$

where

$$\hat{f}_{k,r}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}}\int_0^{2\pi r} f(x,y,Y)e^{-iY\frac{k}{r}}dY .$$

Then for our form t_h we get:

$$t_h =: \bigoplus_{k\in\mathbb{Z}} t_{h_k} , \tag{2.9}$$

where t_{h_k} is

$$\begin{aligned} t_{h_k}(f,g) = & \frac{1}{2\mu}\langle \partial_x f, \partial_x g\rangle + \frac{1}{2\mu}\langle \partial_y f, \partial_y g\rangle + \frac{k^2}{2m_2r^2}\langle f, g\rangle \\ & - \frac{ik}{m_2 r}\langle f, \partial_y g\rangle - \left\langle \sqrt{V_r(x,y)}f, \sqrt{V_r(x,y)}g\right\rangle , \end{aligned} \tag{2.10}$$

defined on the domain $\mathcal{E}_k$,

$$\mathcal{E}_k = \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}\times rS^1) \ |x^\alpha D_x^\beta D_y^\gamma f(x,y)| \le C_{\alpha\beta\gamma},\ \forall \alpha,\beta,\gamma \in \mathbb{N}\right\} .$$

Now remember that we are only interested in the low lying spectrum of our original operator. We will now show that for small r, only t_{h_0} contributes to the bottom of the spectrum. Indeed, let us concentrate on the operator

$$-\frac{1}{2\mu}\partial_y^2 + \frac{k^2}{2m_2r^2} - i\frac{k}{m_2r^2}\partial_y$$

defined on rS^1 with periodic boundary conditions. Via the discrete Fourier transformation it is unitarily equivalent to:

$$\bigoplus_{p\in\mathbb{Z}}\left(\frac{1}{2\mu}\frac{p^2}{r^2}+\frac{k^2}{2m_2r^2}-\frac{kp}{m_2r^2}\right) \tag{2.11}$$

where

$$\frac{1}{2\mu}\frac{p^2}{r^2}+\frac{k^2}{2m_2r^2}-\frac{kp}{m_2r^2}=\frac{1}{2r^2}(p,k)\cdot\begin{pmatrix}\frac{1}{\mu} & -\frac{1}{m_2}\\ -\frac{1}{m_2} & \frac{1}{m_2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}p\\ k\end{pmatrix}. \tag{2.12}$$

A simple calculation shows that both eigenvalues of the above matrix are positive; denote with λ_- the smaller one. Then the operator in (2.11) obeys:

$$\bigoplus_{p\in\mathbb{Z}}\left(\frac{1}{2\mu}\frac{p^2}{r^2}+\frac{k^2}{2m_2r^2}-\frac{kp}{m_2r^2}\right)\geq-\frac{\lambda_-}{2}\partial_y^2+\frac{\lambda_-k^2}{2r^2}. \tag{2.13}$$

Using this in (2.10) we obtain the inequality

$$\begin{aligned} t_{h_k}(f,f) &\geq \min\{1,\mu\lambda_-\}\,\frac{1}{2\mu}\big[\langle\partial_xf,\partial_xf\rangle+\langle\partial_yf,\partial_yf\rangle\big] \\ &\quad-\left\langle\sqrt{V_r(x,y)}f,\sqrt{V_r(x,y)}f\right\rangle+\frac{\lambda_-k^2}{2r^2}\|f\|^2 \\ &=\tilde{t}_{h_0}(f,f)+\frac{\lambda_-k^2}{2r^2}\|f\|^2 \end{aligned} \tag{2.14}$$

where $\tilde{t}_{h_0}$ is obviously defined by the previous line. Now one of the results obtained in this paper will be that the spectrum of the self-adjoint operator associated to a form like $\tilde{t}_{h_0}$ is bounded from below by a numerical constant times $-(\ln(r))^2$. Hence if $k\neq 0$ and r is small enough, all t_{h_k} will be positive and only t_{h_0} will contribute to the negative part of the spectrum.

2.2. The self-adjointness problem

Due to (2.7), (2.8), (2.9) and (2.14), it is clear that it is enough to concentrate on t_{h_0}. If we can prove that it is bounded from below, then all other forms with $k\neq 0$ will also have this property, and the total Hamiltonian will be a direct sum of Friederichs' extensions. Because we can anyway scale the masses and charges away, and in order to simplify the notation, let us consider the sesquilinear form:

$$\begin{aligned} \widetilde{t_H}(f,g) &:= \frac{1}{2}\big[\langle\partial_xf,\partial_xg\rangle+\langle\partial_yf,\partial_yg\rangle\big]-\left\langle\sqrt{V_r(x,y)}f,\sqrt{V_r(x,y)}g\right\rangle \\ &=: \widetilde{t_0}(f,g)-\widetilde{t_V}(f,g) \end{aligned} \tag{2.15}$$

on the domain

$$\mathcal{E}=\left\{f\in C^\infty(\mathbb{R}\times rS^1)\ |x^\alpha D_x^\beta D_y^\gamma f(x,y)|\leq C_{\alpha\beta},\ \alpha,\beta,\gamma\in\mathbb{N}\right\},$$

now where V_r is as in (2.2) but with $e_1e_2=-1$.

We will now construct a self-adjoint operator out of this form.

Proposition 2.1. *The operator V_r is relatively compact in the form sense with respect to the operator $-1/2(\partial_x^2+\partial_y^2)$ with form domain $\mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r)$. Thus the form $\widetilde{t_H}$ defines a self adjoint operator $\widetilde{H^r}$ whose form domain is $\mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r)$, and $\sigma_{ess}(\widetilde{H^r}) = [0,\infty)$.*

Proof. We identify the cylinder $\mathcal{C}_r$ with the strip $\mathbb{R}\times[-r\pi, r\pi]$. For every $\alpha>0$ we define $\mathcal{H}^\alpha(\mathcal{C}_r)$ to be the set of all functions which (at least formally) can be expressed as:

$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\sqrt{r}}\sum_{m\in\mathbb{Z}}\int_{\mathbb{R}} e^{ipx+imy/r}\hat{f}_m(p)\,dp,$$

$$\sum_{m\in\mathbb{Z}}\int_{\mathbb{R}}(1+|p|^{2\alpha}+|m|^{2\alpha})|\hat{f}_m(p)|^2dp<\infty\,. \tag{2.16}$$

Let χ be the characteristic function of the interval $[-r/2, r/2]$. Since near the boundary of the strip $V_r(x,y)\cdot(1-\chi(y))$ is bounded, we only have to look at $\tilde{V}(x,y) := V(x,y)\cdot\chi(y)$. Then we can find a constant C such that everywhere in $\mathcal{C}_r$ we have

$$|\tilde{V}(x,y)| \le \frac{C}{\sqrt{x^2+y^2}}\,.$$

Denote with $\rho := \sqrt{x^2+y^2}$. Choose a function $\chi_1\in C_0^\infty(\mathbb{R})$ with support in $(-3r/2, 3r/2)$, such that $\chi\chi_1=\chi$. Then the operator of multiplication by χ_1 is bounded from $\mathcal{H}^\alpha(\mathcal{C}_r)$ to $\mathcal{H}^\alpha(\mathbb{R}^2)$ and vice versa, because it does not touch the boundary (the proof of this fact is standard). Moreover, if $-\Delta$ is the operator associated to $\widetilde{t_0}$, then we have

$$\mathcal{H}^\alpha(\mathcal{C}_r) = (-\Delta+1)^{-\alpha/2}L^2(\mathcal{C}_r)\,.$$

Note that $\mathcal{E}$ is dense in any $\mathcal{H}^\alpha(\mathcal{C}_r)$. Moreover, for every $\psi\in\mathcal{E}$ we have

$$|\langle\psi,\tilde{V}\psi\rangle_{L^2(\mathcal{C}_r)}| \le C\Big\langle\chi_1\psi, \frac{1}{\rho}\chi_1\psi\Big\rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)}\,. \tag{2.17}$$

We have that $\chi_1\psi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$. Then we can write

$$\langle\chi_1\psi,(1/\rho)\chi_1\psi\rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \int_0^{2\pi}\int_0^\infty \chi_1^2\big(\rho\sin(\theta)\big)\overline{\psi}(\rho,\theta)\cdot\psi(\rho,\theta)d\rho d\theta$$

and after integration by parts in the radial integral we obtain

$$\begin{aligned}&\langle\chi_1\psi,(1/\rho)\chi_1\psi\rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)}\\ &\quad= -\int_0^{2\pi}\int_0^\infty\Big\{\partial_\rho\Big[\chi_1\big(\rho\sin(\theta)\big)\overline{\psi}(\rho,\theta)\cdot\chi_1\big(\rho\sin(\theta)\big)\psi(\rho,\theta)\Big]\Big\}\rho d\rho d\theta\,.\end{aligned} \tag{2.18}$$

Then using the estimate $|\partial_\rho(\chi_1\psi)|\le|\nabla(\chi_1\psi)|$, and with the Cauchy–Schwarz inequality:

$$\begin{aligned}\langle\chi_1\psi,(1/\rho)\chi_1\psi\rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)} &\le 2\|\chi_1\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}\|\nabla(\chi_1\psi)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}\\ &\le \mathrm{const}\|\psi\|_{L^2(\mathcal{C}_r)}\|\psi\|_{\mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r)}\,.\end{aligned} \tag{2.19}$$

Now for an arbitrarily small $\epsilon > 0$ we have

$$|\langle \psi, \tilde{V}\psi\rangle_{L^2(\mathcal{C}_r)}| \leq (C_1/\epsilon)\|\psi\|^2_{L^2(\mathcal{C}_r)} + C_1\,\epsilon\,\widetilde{t_0}(\psi,\psi)\,,$$

where C_1 is just a numerical constant. The density of $\mathcal{E}$ in $\mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r)$ finishes the proof of relative boundedness, and we can define $\widetilde{H^r}$ as the Frederichs extension.

Until now we have shown in an elementary way that $\sqrt{V_r}(-\Delta+1)^{-1/2}$ is bounded, but one can do much better than that. In [3] it has been proved a two dimensional version of an inequality of Kato, which states the following:

$$\langle \psi, |\mathbf{x}|^{-1}\psi\rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq \frac{\Gamma(1/4)^4}{4\pi^2}\left\langle \psi, \sqrt{-\Delta}\psi\right\rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)}\,. \tag{2.20}$$

This inequality immediately implies that $\sqrt{V_r} : \mathcal{H}^{1/4}(\mathcal{C}_r) \to L^2(\mathcal{C}_r)$ is bounded. Now let us show that the operator $\sqrt{V_r}\mathcal{H}^{1/2}(\mathcal{C}_r) \to L^2(\mathcal{C}_r)$ is compact. We will in fact prove the sufficient condition that the operator $T := |\mathbf{x}|^{-1/2}(-\Delta+1)^{-1/2}$ defined on $L^2(\mathbb{R}^2)$ is compact.

Indeed, let us denote by χ_n the characteristic function of the ball of radius $n > 0$, centered at the origin in $\mathbb{R}^2$. Then we can write:

$$T = \chi_n(\mathbf{x})T\chi_n(-\Delta) + \big[(1-\chi_n)(\mathbf{x})\big]T + \chi_n(\mathbf{x})T\big[(1-\chi_n)(-\Delta)\big]\,.$$

First, the operator $\chi_n(\mathbf{x})T\chi_n(-\Delta)$ is Hilbert–Schmidt (its integral kernel is an $L^2(\mathbb{R}^4)$ function), thus compact. Second, the sequence of operators $[(1-\chi_n)(\mathbf{x})]T$ converges in norm to zero. Third, the sequence $\chi_n(\mathbf{x})T[(1-\chi_n)(-\Delta)]$ can be expressed in the following way:

$$\chi_n(\mathbf{x})T\big[1-\chi_n(-\Delta)\big] = \big\{\chi_n(\mathbf{x})|\mathbf{x}|^{-1/2}(-\Delta+1)^{-1/4}\big\}(-\Delta+1)^{-1/4}\big[(1-\chi_n)(-\Delta)\big]\,,$$

where the first factor is uniformly bounded in n, while the second one converges in norm to zero. Thus T can be approximated in operator norm with a sequence of compact operators, hence it is compact.

Therefore V_r is a relatively compact form perturbation to $-\Delta$, hence the essential spectrum is stable, and the proof is over. □

2.3. An effective operator for the low lying spectrum

We will show in this section that at small r, the negative spectrum of $\widetilde{H^r}$ can be determined by studying a one dimensional effective operator H^r_{eff}. It is natural to expect that the high transverse modes do not contribute much to the low region of the spectrum.

First, we separate $\widetilde{H^r}$ into different parts taking advantage of the cylindrical geometry, that is to say, we represent $\widetilde{H^r}$ as a sum of orthogonal transverse modes using the periodic boundary conditions along the circumference of the cylinder. Second, we analyze which part is relevant when the radius tends to zero.

We recall that $\widetilde{H^r}$ is formally given by $\widetilde{H^r} = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{\Delta_y}{2} - V_r$ in the space $L^2(\mathcal{C}_r) \sim L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(rS^1)$. The domain contains all $\psi \in \mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r)$ with the property

that in distribution sense we have

$$\left(-\frac{\Delta_x}{2}-\frac{\Delta_y}{2}-V_r\right)\psi\in L^2(\mathcal{C}_r)\,. \tag{2.21}$$

This does not mean that the domain is $\mathcal{H}^2(\mathcal{C}_r)$ because V_r is too singular at the origin.

Our problem has two degrees of freedom. We consider the orthonormal basis of eigenvectors of $-\Delta_y/2$ with domain $\mathcal{H}^2_{\rm per}((-\pi r,\pi r))\sim\mathcal{H}^2(rS^1)$. Here, the Sobolev space $\mathcal{H}^2_{\rm per}((-\pi r,\pi r))$ denotes functions which are $2\pi r$-periodic with first and second derivatives in the distribution sense in L^2. We can write

$$-\frac{\Delta_y}{2}=\sum_{n=-\infty}^{\infty}E^r_n\Pi^r_n$$

where the one dimensional projectors Π^r_n are defined by

$$\Pi^r_n=\langle\chi^r_n,\,\cdot\rangle\chi^r_n,\quad \chi^r_n(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi r}}e^{in\frac{y}{r}}\quad\text{and}\quad E^r_n=\frac{n^2}{2r^2},\ n\in\mathbb{Z}\,.$$

We now introduce a family of orthogonal projectors

$$\bar{\mathbf{\Pi}}^r_n:=\mathbf{1}\otimes\Pi^r_n\,, \tag{2.22}$$

which project from $L^2(\mathcal{C}_r)$ into what we call the nth *transverse mode*. The operator $\widetilde{H^r}$ can be split as follows:

$$\widetilde{H^r}=\sum_{n,m}\bar{\mathbf{\Pi}}^r_n\widetilde{H^r}\bar{\mathbf{\Pi}}^r_m=:\sum_n H^r_n\otimes(\langle\chi^r_n,\,\cdot\rangle\chi^r_n)+\sum_{n\neq m}H^r_{n,m}\otimes(\langle\chi^r_m,\,\cdot\rangle\chi^r_n)\,, \tag{2.23}$$

where the sum is a direct sum, since the projectors are orthogonal. By a natural unitary identification, we can work in a new Hilbert space:

$$\mathcal{H}=l^2\big[\mathbb{Z};L^2(\mathbb{R})\big],\qquad \mathcal{H}\ni\psi=\{\psi_n\}_{n\in\mathbb{Z}},\ \psi_n\in L^2(\mathbb{R})\,. \tag{2.24}$$

Therefore our original operator is an infinite matrix now, $\{H_{n,m}\}_{n,m\in\mathbb{Z}}$ whose elements are operators in $L^2(\mathbb{R})$.

If $n\neq m$, the only contribution comes from V_r, and the corresponding operator is a multiplication operator given by ($x\neq 0$):

$$V^r_{n,m}(x):=\frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r}V(x,y)e^{i(m-n)\frac{y}{r}}dy,\quad x\neq 0\,. \tag{2.25}$$

If $n=m$, then the corresponding diagonal element is given by the operator:

$$H^r_n=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}-V^r_{\rm eff}+\frac{n^2}{2r^2}\,, \tag{2.26}$$

where $V^r_{\rm eff}$ is deduced from $V^r_{n,m}$ when $m=n$ and is given by

$$V^r_{\rm eff}(x)=\frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r}V(x,y)dy\,. \tag{2.27}$$

Finally, let us introduce a last notation for what will be our effective one-dimensional comparison operator:

$$H^r_{\text{eff}} := -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - V^r_{\text{eff}}(x) \tag{2.28}$$

and note that

$$H^r_n = H^r_{\text{eff}} + \frac{n^2}{2r^2}\,. \tag{2.29}$$

One can see that for $n \neq 0$, the diagonal entries of our infinite operator valued matrix are pushed up by a term proportional with $1/r^2$. Thus a natural candidate for a comparison operator for the negative spectrum of $\widetilde{H^r}$ is H^r_{eff}. In the next section we will perform a careful study of this operator.

3. Spectral analysis of H^r_{eff}

We now want to study the spectrum of the operator H^r_{eff} when r becomes small. We recall that:

$$H^r_{\text{eff}} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - V^r_{\text{eff}}(x)$$

where

$$V^r_{\text{eff}}(x) = \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} \frac{1}{\sqrt{x^2 + 4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}}dy$$

with form domain $Q(H^r_{\text{eff}}) = \mathcal{H}^1(\mathbb{R})$. We are going to use perturbation theory around $r = 0$, which will turn out to be quite a singular limit. The strategy is to approximate the form associated to the potential $V^r_{\text{eff}}(x)$ around $r = 0$ by another quadratic form which provides a solvable approximation.

Let us define the sesquilinear form on $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ (later on we will show that it is bounded on $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$):

$$\begin{aligned} C_0(f,g) &:= -\int_0^\infty \ln(2x)\cdot\left[\overline{f(x)}g(x)\right]' dx + \int_{-\infty}^0 \ln(-2x)\cdot\left[\overline{f(x)}g(x)\right]' dx \\ &= -\int_0^\infty \ln(x)\cdot\left[\overline{f(x)}g(x)\right]' dx \\ &\quad + \int_{-\infty}^0 \ln(-x)\cdot\left[\overline{f(x)}g(x)\right]' dx + \ln(4)\overline{f(0)}g(0) \\ &= \left\{\text{fp}\frac{1}{|x|} + \ln(4)\,\delta\right\}(\overline{f}g)\,. \end{aligned} \tag{3.1}$$

The symbol fp means the finite part in the sense of Hadamard, while δ is the Dirac distribution. Note that up to an integration by parts, and for functions supported away from zero, we have $C_0(f,g) = \langle f, \frac{1}{|x|}g\rangle$.

The main result of this subsection is contained in the following proposition:

Proposition 3.1. *For $r < 1$ and for every $f \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R})$ we have the estimate*

$$\begin{aligned}\langle f, V^r_{\text{eff}} f\rangle &= -2\ln(r)\,|f(0)|^2 + C_0(f,f) + \mathcal{O}\left(r^{\frac{4}{9}}\right)\cdot \|f\|^2_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}\\ &= -2\ln(r/2)\,|f(0)|^2 + \left[\text{fp}\frac{1}{|x|}\right](|f|^2) + \mathcal{O}\left(r^{\frac{4}{9}}\right)\cdot \|f\|^2_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}\,. \qquad (3.2)\end{aligned}$$

Proof. The argument is a bit long, and we split it in several lemmas. Let us start by listing some of the properties of V^r_{eff}. First note that it scales like a "delta function", i.e., it is homogeneous of order -1:

$$V^r_{\text{eff}}(x) = \frac{1}{r} V^1_{\text{eff}}\left(\frac{x}{r}\right)\,. \qquad (3.3)$$

The next observation is that due to the integral with respect to y it is much less singular than V_r:

Lemma 3.2. *The behavior of $V^r_{\text{eff}}(x)$ is logarithmic at 0.*

Proof. There exists a constant $c > 0$ large enough such that for every $|y| \le \pi/2$ and $x \in \mathbb{R}$ we have

$$\frac{1}{c}(x^2+y^2) \le \frac{x^2}{4} + \sin^2(y) \le c(x^2+y^2)\,.$$

Thus we can integrate and obtain $V^1_{\text{eff}}(x) \overset{x\to 0}{\sim} -\ln(|x|) + \mathcal{O}(1)$. □

We now define on $\mathbb{R}$ a comparison function $Y_r(x) := \frac{1}{\sqrt{x^2+4r^2}}$. and we also denote by Y_r the associated quadratic form defined on $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$. For the following, let us recall the classical Sobolev estimate in one dimension:

$$\|f\|_\infty \le \frac{1}{\sqrt{2}}(\|f'\| + \|f\|) = \frac{1}{\sqrt{2}}\|f\|_{\mathcal{H}_1(\mathbb{R})}\,. \qquad (3.4)$$

Lemma 3.3. *We have the following properties:*

(i) $V^1_{\text{eff}} \ge Y_1$, $V^1_{\text{eff}}(x) - Y_1(x) = \mathcal{O}(|x|^{-5})$ *for* $|x| \ge 10$, *and*

$$\|V^1_{\text{eff}} - Y_1\|_{L^1(\mathbb{R})} = \ln(4)\,; \qquad (3.5)$$

(ii) $\langle f, (V^r_{\text{eff}} - Y_r) f\rangle = \ln(4)\,|f(0)|^2 + \mathcal{O}(r^{\frac{4}{9}})\|f\|^2_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}$ $\forall r \le 1$.

Proof. (i). To show that $V^1_{\text{eff}} \ge Y_1$, one uses $|\sin(\cdot)| \le 1$. The second estimate for $|x| \ge 10$ follows from:

$$\begin{aligned}V^1_{\text{eff}}(x) - Y_1(x) &= \frac{1}{|x|}\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left(1 + \frac{4\sin^2\frac{y}{2}}{x^2}\right)^{-\frac{1}{2}} dy - \left(1+\frac{4}{x^2}\right)^{-\frac{1}{2}}\right]\\ &= \frac{1}{|x|}\left(1 - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{2\sin^2\frac{y}{2}}{x^2}dy + \mathcal{O}(x^{-4}) - 1 + \frac{2}{x^2} + \mathcal{O}(x^{-4})\right)\,,\\ &= \mathcal{O}(|x|^{-5}), \quad |x| \ge 10\,. \qquad (3.6)\end{aligned}$$

Before computing the L^1 norm of (3.5), let us notice that none of the terms is in L^1. We first integrate with respect to x, and then over y, and get:

$$\|V^1_{\text{eff}} - Y^1\|_{L^1(\mathbb{R})} = -\frac{4}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \ln(\sin y)dy = 2\ln(2)\,, \tag{3.7}$$

thus (3.5) is proved.

Let us now prove (ii). We have due to the scaling properties:

$$\begin{aligned}\langle f, (V^r_{\text{eff}} - Y_r)f\rangle &= \frac{1}{r}\int_{\mathbb{R}} (V^1_{\text{eff}} - Y_1)(x/r)|f(x)|^2 dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} (V^1_{\text{eff}} - Y_1)(x)|f(rx)|^2 dx\,. \end{aligned}\tag{3.8}$$

Then, we subtract the term $\|V^1_{\text{eff}} - Y_1\|_{L^1}\cdot|f(0)|^2 = \ln(4)\cdot|f(0)|^2$ which gives

$$\begin{aligned}&\langle f, (V^r_{\text{eff}} - Y_r)f\rangle - \ln(4)\cdot|f(0)|^2 = \\ &\quad = \int_{\mathbb{R}} (V^1_{\text{eff}} - Y_1)(x)\left\{\left[f(rx) - f(0)\right]\overline{f(rx)} + \left[\overline{f(rx)} - \overline{f(0)}\right]f(0)\right\} dx\,. \end{aligned}\tag{3.9}$$

Let $\alpha \in (0,1)$ a real number. We split the above integral in two regions: $|x| \le r^{-\alpha}$ and $|x| \ge r^{-\alpha}$. We have, using (3.4):

$$\left|\int_{|x|\ge r^{-\alpha}} (V^1_{\text{eff}} - Y_1)(x)[f(rx) - f(0)]\overline{f(rx)}dx\right| \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}&\le 2\|f\|^2_{\mathcal{H}^1}\int_{|x|\ge r^{-\alpha}} |(V^1_{\text{eff}} - Y_1)(x)|dx \\ &\le \|f\|^2_{\mathcal{H}^1}\int_{|x|\ge r^{-\alpha}} \frac{1}{|x|^5}dx \quad \text{if } r^{-\alpha} \ge 10 \\ &\le \mathcal{O}(r^{4\alpha})\cdot\|f\|^2_{\mathcal{H}^1}. \end{aligned}\tag{3.11}$$

For the region $0 \le x \le r^{-\alpha}$ (and similarly for the other one), we can write:

$$\begin{aligned}&\int_{0\le x\le r^{-\alpha}} (V^1_{\text{eff}} - Y_1)(x)|f(rx) - f(0)|\,|f(rx)|dx \\ &\quad \le \int_0^{r^{-\alpha}} (V^1_{\text{eff}} - Y_1)(x)\cdot\left|\int_0^{rx} f'(t)dt\right|\cdot|f(rx)|dx \\ &\quad \le \|V^1_{\text{eff}} - Y_1\|_{L^1}\cdot\|f\|_{L^\infty}\cdot\int_0^{r^{1-\alpha}} |f'(t)|dt \end{aligned}\tag{3.12}$$

and the Cauchy–Schwarz inequality yields:

$$\int_0^{r^{1-\alpha}} |f'(t)|dt \le r^{\frac{1-\alpha}{2}}\|f\|_{\mathcal{H}^1}\,.$$

Then we set α as the solution of $(1-\alpha)/2 = 4\alpha$ which gives $\alpha = 1/9$. □

We now concentrate ourselves on Y_r when r is small. For the next two lemmas, we need to introduce the the following characteristic function:

$$\chi(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } |x| \leq 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} . \tag{3.13}$$

Then we have the following lemma:

Lemma 3.4. *Consider the self-adjoint operator of multiplication by* $\ln(|\cdot|)\chi$ *defined on its natural domain in* $L^2(\mathbb{R})$*. This operator is relatively bounded to* $p_x := -id/dx$*, with relative bound zero.*

Proof. Indeed, $\ln(|x|)\chi(|x|)\ (p_x + i\lambda)^{-1}$, $\lambda > 1$ is Hilbert–Schmidt since we have, from [13, XI.3]:

$$\begin{aligned} \|\ln(|\cdot|)\chi\ (p_x + i\lambda)^{-1}\|_{HS} &\leq \text{const} \cdot \|\ln(|\cdot|)\chi\|_{L^2} \|(\cdot + i\lambda)^{-1}\|_{L^2} \\ &\leq \frac{\text{const}}{\sqrt{\lambda}} . \end{aligned} \tag{3.14}$$

Note that by a similar argument as the one in (3.4) we get the estimate:

$$\|(p_x + i\lambda)^{-1}\|_{L^2 \mapsto L^\infty} \leq \frac{\text{const}}{\sqrt{\lambda}} . \tag{3.15}$$

Then a standard argument finishes the proof. □

We can now characterize the form C_0 introduced in (3.1):

Lemma 3.5. *The quadratic form induced by* C_0 *admits a continuous extension to* $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$*. Moreover,* C_0 *is infinitesimally form bounded with respect to the form associated to* $p_x^2 = -d^2/dx^2$*.*

Proof. Fix some $\epsilon \in (0,1)$. Then for every $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ we can write:

$$\begin{aligned} C_0(f,f) &= -\int_0^\infty \ln(2x) \cdot (d_x|f|^2)(x)dx + \int_{-\infty}^0 \ln(-2x) \cdot (d_x|f|^2)(x)dx \\ &= \int_{-\varepsilon}^0 \ln(-2x) \cdot (d_x|f|^2)(x)dx - \int_0^\varepsilon \ln(2x) \cdot (d_x|f|^2)(x)dx \\ &\quad + \ln(2\varepsilon)\left(|f(\varepsilon)|^2 + |f(-\varepsilon)|^2\right) + \int_{\mathbb{R}\setminus[-\varepsilon,\varepsilon]} \frac{1}{|x|} \cdot |f(x)|^2 dx . \end{aligned} \tag{3.16}$$

First we have

$$\int_{\mathbb{R}\setminus[-\varepsilon,\varepsilon]} \frac{1}{|x|} \cdot |f(x)|^2 dx \leq \frac{1}{\varepsilon}\|f\|^2 .$$

Then using (3.15) we have

$$\sup_{t\in\mathbb{R}} |f(t)| \leq \frac{\text{const}}{\sqrt{\lambda}} \|(p_x + i\lambda)f\| , \tag{3.17}$$

which takes care of the terms containing $f(\pm\varepsilon)$.

The remaining two integrals can be treated with the following argument:

$$\begin{aligned}\left|\int_0^\varepsilon \ln(2x)\cdot(d_x|f|^2)(x)dx\right| &\le 2\int_0^\varepsilon |\ln(2x)|\cdot|f(x)|\cdot|f'(x)|dx\\ &\le 2\|\chi\ \ln(2\,|\cdot|)f\|\ \|f\|_{\mathcal{H}^1}\\ &\le \frac{\text{const}}{\sqrt{\lambda}}\|(p_x+i\lambda)f\|\ \|f\|_{\mathcal{H}^1}\,, \end{aligned}\tag{3.18}$$

where in the second inequality we used the Cauchy inequality, while in the third inequality we used (3.14).

These estimates allow us to find two constants A and B (growing when λ grows) such that:

$$|C_0(f,f)|\le \frac{\text{const}}{\sqrt{\lambda}}\|f'\|^2+A\|f\|\ \|f'\|+B\|f\|^2\,.$$

But we use the inequality $\|f\|\ \|f'\|\le \frac{1}{\lambda A}\|f'\|^2+\lambda A\|f\|^2$, which finally allows us to say that for any $0<a<1$ we can find $b>0$ such that

$$|C_0(f,f)|\le a\ \|p_xf\|^2+b\ \|f\|^2\,,\tag{3.19}$$

and the proof is over. □

The final ingredient in proving Proposition 3.1 is contained in the following lemma:

Lemma 3.6. *Recall that $Y_r(x)=(x^2+4r^2)^{-1/2}$. Then for every $r<1$, and for every $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R})$, we have the estimate:*

$$\langle f,Y_rf\rangle=-2\ln(2r)\cdot|f(0)|^2+C_0(f,f)+\mathcal{O}\left(r^{\frac{4}{9}}\right)\cdot\|f\|^2_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}\,.$$

Proof. Integrating by parts we obtain:

$$\begin{aligned}\langle f,Y_rf\rangle &= -2\ln(2r)|f(0)|^2\\ &\quad-\int_0^\infty \ln(x+\sqrt{x^2+4r^2})\cdot\left[f'(x)\overline{f(x)}+f(x)\overline{f'(x)}\right]dx\\ &\quad+\int_{-\infty}^0 \ln(-x+\sqrt{x^2+4r^2})\cdot\left[f'(x)\overline{f(x)}+f(x)\overline{f'(x)}\right]dx \end{aligned}\tag{3.20}$$

and:

$$\begin{aligned}&\langle f,Y_rf\rangle-C_0(f,f)+2\ln(2r)\cdot|f(0)|^2 \qquad (3.21)\\ &\quad=-\int_0^\infty\Big[\ln(x+\sqrt{x^2+4r^2})-\ln(2x)\Big]\ (d_x|f(x)|^2)dx\\ &\quad+\int_{-\infty}^0\Big[\ln(-x+\sqrt{x^2+4r^2})-\ln(-2x)\Big]\ (d_x|f(x)|^2)dx\,. \end{aligned}$$

The idea is to show that the last two integrals are small when r is small. We only consider the first integral, since the argument is completely analogous for the second one.

Fix some $0 < \alpha < 1$ (its optimal value will be chosen later), and assume that r is small enough such that $r^{1-\alpha} \leq 1/10$. We split the domain of integration into two regions: one in which $x > r^\alpha$, and the other one where $x \leq r^\alpha$. For the first region we have:

$$\ln(x + \sqrt{x^2 + 4r^2}) - \ln(2x) = \ln \frac{1 + \sqrt{1 + 4\frac{r^2}{x^2}}}{2} = \mathcal{O}(r^2/x^2)\,. \tag{3.22}$$

Then by integration, and using (3.4) together with the Cauchy inequality, we get:

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{r^\alpha}^{\infty} \Big[\ln(x + \sqrt{x^2 + 4r^2}) - \ln(2x)\Big] f'(x)\overline{f(x)}dx \right| \\
&\quad \leq \left| \int_{r^\alpha}^{\infty} \Big[\ln(x + \sqrt{x^2 + 4r^2}) - \ln(2x)\Big] f'(x)dx \right| \|f\|_{\mathcal{H}^1} \\
&\quad \leq \left(\int_{r^\alpha}^{\infty} \Big[\ln(x + \sqrt{x^2 + 4r^2}) - \ln(2x)\Big]^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \|f\|^2_{\mathcal{H}^1} \\
&\quad \leq \mathcal{O}(r^{2-\frac{3}{2}\alpha})\|f\|^2_{\mathcal{H}^1}\,.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

For the region where $x \leq r^\alpha$, we use the monotonicity of the logarithm and write:

$$\begin{aligned}
|\ln(x + \sqrt{x^2 + 4r^2}) - \ln(2x)| &\leq |\ln(x + \sqrt{x^2 + 4r^2})| + |\ln(2x)| \\
&\leq |\ln(2r)| + |\ln(2x)|\,.
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Then we can write

$$\begin{aligned}
&\left| \int_0^{r^\alpha} \Big[\ln(x + \sqrt{x^2 + 4r^2}) - \ln(2x)\Big] f'(x)\overline{f(x)}dx \right| \\
&\quad \leq \text{const} \cdot \|f\|^2_{\mathcal{H}^1} \left(\int_0^{r^\alpha} \big[\ln(2x) + \ln(2r)\big]^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} = \mathcal{O}(r^{\frac{\alpha}{2}}|\ln r|) \cdot \|f\|^2_{\mathcal{H}^1}\,.
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Comparing (3.23) and (3.25), we see that we can take α arbitrarily close to 1. In particular, we can find some α such that $2 - 3\alpha/2 > 4/9$ and $\alpha/2 > 4/9$ and we are done. □

We can now conclude the proof of Proposition 3.1 by putting together the estimates from Lemma 3.3 and Lemma 3.6. □

Remark 3.7. One can improve the exponent 4/9 in the error estimate (3.2), and obtain 1/2 instead. One observes that the Fourier transform $\widehat{V^1_{\text{eff}}}(p)$ can be exactly computed in terms of modified Bessel functions, and then one expands it near $p = 0$ identifying the Fourier transforms of $\text{fp}\frac{1}{|x|}$ and δ. Then the error's Hilbert–Schmidt norm is estimated and shown to be of order $r^{1/2}$. A related problem treated with this method can be found in [5].

3.1. A solvable comparison operator H_C

Remember that we are interested in the negative spectrum of H^r_{eff}, operator given in (2.28). Lemmas 3.2 and 3.4 tell us that its operator domain is $\mathcal{H}^2(\mathbb{R})$, while the form domain is $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$. Proposition 3.1, see (3.2), indicates that a good approximation for H^r_{eff} at small r would be the operator formally defined as

$$H_C := \frac{1}{2}p_x^2 + 2\ln(r/2)\,\delta - \frac{1}{|x|}\,. \tag{3.26}$$

Of course, as it is written above H_C makes no sense. The correct definition of H_C can be found in the Appendix A of [5] in a more general setting. For the comfort of the reader we give below a version of this definition adapted to our simpler situation. H_C has to be understood in the following way: consider the sesquilinear form on $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ given by

$$t_C(f,g) := \frac{1}{2}\langle f', g'\rangle + 2\ln(r)\,\overline{f}(0)g(0) - C_0(f,g)\,. \tag{3.27}$$

A standard consequence of (3.17) and (3.19) is that the quadratic form associated with t_C is closable, bounded from below, and the domain of its closure is $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$. Then H_C is the self-adjoint operator generated by t_C, and its operator domain D_C is characterized by:

$$D_C := \left\{\psi \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}) :\ |t_C(\phi,\psi)| \le \text{const}\,\|\phi\|, \quad \forall \phi \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R})\right\}. \tag{3.28}$$

Moreover, if $\psi \in D_C$, then we have the equality:

$$t_C(\phi,\psi) = \langle \phi, H_C\psi\rangle, \quad \forall \phi \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R})\,. \tag{3.29}$$

Another representation for $\psi \in D_C$ is that there exists $f_\psi = H_C\psi \in L^2(\mathbb{R})$ such that the distribution ψ'' is a regular distribution on $\mathbb{R}\setminus\{0\}$ and is given by:

$$\psi''(x) = -2\frac{1}{|x|}\psi(x) - 2f_\psi(x)\,. \tag{3.30}$$

One important consequence is that $\psi' \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R}\setminus\{0\})$, and ψ' is continuous on $\mathbb{R}\setminus\{0\}$.

Let us now introduce the parity operators P_+ and P_-

$$P_\pm : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}) \to \mathcal{H}^1(\mathbb{R}), \quad f(x) \mapsto (P_\pm f)(x) = \frac{f(x) \pm f(-x)}{2}\,. \tag{3.31}$$

We have that $P_+ + P_- = 1$. We will call $\text{Ran}P_+$ the *even sector* and $\text{Ran}P_-$ the *odd sector*. The following lemma is an easy application of definitions, and we give it without proof:

Lemma 3.8. *We have that $t_C(P_\pm f, P_\mp g) = 0$ for all $f, g \in \mathcal{H}^1(\mathbb{R})$. Then the domain D_C of H_C is left invariant by $P_\pm$; moreover, H_C commutes with $P_\pm$.* □

A standard consequence of the elliptic regularity (see also (3.30)) is the following lemma, given again without proof:

Lemma 3.9. *The eigenvectors of H_C belong to $C^\infty(\mathbb{R}\setminus\{0\})$.* □

A less obvious result is the following characterization of D_C:

Lemma 3.10. *Every ψ in D_C obeys the following boundary condition at 0:*

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{\psi'(-\varepsilon)-\psi'(\varepsilon)}{2}+2\ln(r)\psi(0)-2\ln(2\varepsilon)\psi(0)\right]=0\,. \tag{3.32}$$

Proof. Now remember that ψ' is continuous outside the origin if $\psi\in D_C$, so $\psi'(\pm\varepsilon)$ makes sense. Moreover, for every $\phi\in\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$ we have:

$$\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}}\overline{\phi'(x)}\psi'(x)dx+2\ln(r)\overline{\phi(0)}\psi(0)-C_0(\phi,\psi)=\langle\phi,H_C\psi\rangle\,. \tag{3.33}$$

We can write for $x>0$ (see (3.30)):

$$\psi'(x)=\psi'(1)+\int_1^x\psi''(y)dy=\psi'(1)-2\int_1^x\left(\frac{\psi(y)}{y}+f_\psi(y)\right)dy$$

and then for x close to 0 we have:

$$|\psi'(x)|\le \text{const}+2|\ln x|\;\|\psi\|_\infty\,. \tag{3.34}$$

The same estimate is true for negative x near 0, and together with the estimate (3.4) it follows that ψ' diverges at 0 not faster than a logarithm.

Now we can integrate by parts outside the origin and write:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}}\overline{\phi'(x)}\psi'(x)dx&=\overline{\phi(-\varepsilon)}\psi'(-\varepsilon)-\int_{-\infty}^{-\varepsilon}\overline{\phi(x)}\psi''(x)dx-\overline{\phi(\varepsilon)}\psi'(\varepsilon)\\&\quad-\int_{\varepsilon}^{\infty}\overline{\phi(x)}\psi''(x)dx+\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\overline{\phi'(x)}\psi'(x)dx\end{aligned} \tag{3.35}$$

where the last integral will converge to zero with ε.

After a similar integration by parts we obtain:

$$\begin{aligned}C_0(\phi,\psi)=&\int_{-\varepsilon}^{0}\ln(-2x)\cdot\big(d_x(\overline{\phi}\psi)\big)(x)dx-\int_0^{\varepsilon}\ln(2x)\cdot\big(d_x(\overline{\phi}\psi)\big)(x)dx\\&+\ln(2\varepsilon)\left(\overline{\phi(\varepsilon)}\psi(\varepsilon)+\overline{\phi(-\varepsilon)}\psi(-\varepsilon)\right)\\&+\int_{\mathbb{R}\setminus[-\varepsilon,\varepsilon]}\frac{1}{|x|}\cdot\overline{\phi(x)}\psi(x)dx\,.\end{aligned} \tag{3.36}$$

Following the reasoning in (3.18), one can prove that :

$$\int_0^{\varepsilon}\ln(2x)\cdot\big[d_x(\overline{\phi}\psi)\big](x)dx\overset{\varepsilon\to 0}{=}\mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{1}{2}}|\ln\varepsilon|)\;\|\phi\|_{\mathcal{H}^1}\|\psi\|_{\mathcal{H}^1}$$

and thus:

$$C_0(\phi,\psi)\overset{\varepsilon\to 0}{=}\ln(2\varepsilon)\left(\overline{\phi(\varepsilon)}\psi(\varepsilon)+\overline{\phi(-\varepsilon)}\psi(-\varepsilon)\right)+\int_{\mathbb{R}\setminus[-\varepsilon,\varepsilon]}\frac{1}{|x|}\cdot\overline{\phi(x)}\psi(x)dx\,. \tag{3.37}$$

Putting (3.37) and (3.35) in (3.33), and using (3.30), we eventually get:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{1}{2}\left(\overline{\phi(-\varepsilon)}\psi'(-\varepsilon)-\overline{\phi(\varepsilon)}\psi'(\varepsilon)\right)+2\ln(r)\overline{\phi(0)}\psi(0)\right.$$
$$\left.-\ln(2\varepsilon)\left(\overline{\phi(\varepsilon)}\psi(\varepsilon)+\overline{\phi(-\varepsilon)}\psi(-\varepsilon)\right)\right]=0\,. \quad (3.38)$$

The last ingredient is the embedding $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})\subset C^{1/2-\delta}(\mathbb{R})$, and the estimate (3.34) which allows us to simplify the limit:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\overline{\phi(0)}\left[\frac{\psi'(-\varepsilon)-\psi'(\varepsilon)}{2}+2\ln(r)\psi(0)-2\ln(2\varepsilon)\psi(0)\right]=0 \quad (3.39)$$

for all $\phi\in\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$. The lemma is proved. □

3.2. The eigenvalues and eigenvectors of H_C

In this subsection we give analytic expressions for eigenvalues and eigenvectors of H_C corresponding to the negative, discrete spectrum; much of the information we need about special functions is borrowed from [10]. We want to have the same formal expression for our eigenvalue problem outside $z=0$ as in that paper, namely

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi-\frac{1}{4}\psi+\frac{\alpha}{|z|}\psi=0$$

where ψ will be an eigenfunction with an associated eigenvalue $E=-\frac{1}{2\alpha^2}$. Let us now do this in a rigorous manner.

We want to implement the change of variables $x=\frac{1}{2}\alpha z$, $\alpha>0$, which amounts to defining a unitary operator on $L^2(\mathbb{R})$:

$$(U_W\psi)(z)=\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\,\psi(\alpha z/2),\quad (U_W^{-1}\psi)(z)=\sqrt{\frac{2}{\alpha}}\,\psi(2z/\alpha)\,. \quad (3.40)$$

Now assume ϕ is a normalized eigenvector for H_C satisfying

$$H_C\phi=E\phi,\quad E<0\,. \quad (3.41)$$

Instead of solving the above equation, we will reformulate it in terms of $\psi=U_W\phi$, and $\phi=U_W^{-1}\psi$. To do that, we need to fulfill two conditions. The first one is:

$$[U_WHU_W^{-1}\psi](z)=\frac{2}{\alpha^2}\left[-\psi''(z)-\frac{\alpha}{|z|}\psi(z)\right]=E\psi(z),\quad z\neq 0,\quad \text{or}$$
$$\psi''(z)-\frac{1}{4}\psi(z)+\frac{\alpha}{|z|}\psi(z)=0,\quad z\neq 0,\ E=-\frac{1}{2\alpha^2}\,. \quad (3.42)$$

The second thing is to see what condition at $z=0$ should ψ obey in order to be sure that $U_W^{-1}\psi$ is in the domain of H_C. If we replace ψ in (3.32) by $\phi=U_W^{-1}\psi$, then we get the modified condition:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{2}{\alpha}\frac{\psi'(-\frac{2}{\alpha}\varepsilon)-\psi'(\frac{2}{\alpha}\varepsilon)}{2}+2\ln(r)\psi(0)-2\ln(2\varepsilon)\psi(0)\right]=0 \quad (3.43)$$

or

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{\psi'(-\varepsilon)-\psi'(\varepsilon)}{2}+\alpha\big(\ln r-\ln(\alpha\varepsilon)\big)\psi(0)\right]=0\,. \tag{3.44}$$

Therefore we reduced the problem of finding the eigenfunctions and eigenvalues of H_C to solving the ordinary differential equations in (3.42), with the boundary condition given in (3.44). We will see that L^2 solutions can be constructed only if α obeys some conditions.

A priori, α can be any positive real number. First assume that α is not a positive integer. Then if we solve (3.42) for $z>0$, we see that the only square integrable solution at $+\infty$ is the one given by a Whittaker function:

$$W_{\alpha,\frac{1}{2}}(z)=ze^{-\frac{1}{2}z}U(1-\alpha,2,z)\,, \tag{3.45}$$

where U is the confluent hypergeometric function or Kummer function, see [1]. If α is a positive integer, the solution is obtained as the limit of $W_{\alpha,\frac{1}{2}}(z)$ when α tends to a positive integer N and get:

$$\lim_{\alpha\to N}W_{\alpha,\frac{1}{2}}(z)=e^{-\frac{1}{2}z}z\frac{1}{N}L^1_{N-1}(z) \tag{3.46}$$

where L^1_{N-1} is an associated Laguerre polynomial.

We denote with $\Gamma(z)$ and $\psi(z)=\Gamma'(z)/\Gamma(z)$ the usual gamma and digamma functions. We have the following first result:

Proposition 3.11. (i). *All negative eigenvalues of H_C are non-degenerate. The eigenfunctions of H_C are also eigenfunctions of $P_\pm$.*

(ii). *There exists an infinite number of odd eigenfunctions $\phi_{odd,k}$, $k\in\mathbb{Z}_+$, corresponding to every $\alpha\in\{1,2,\dots\}$.*

(iii). *There also exists an infinite number of even eigenfunctions $\phi_{even,k}$, $k\in\mathbb{Z}_+$, each corresponding to a certain $\alpha_k\in(k-1,k)$ for every $k\in\mathbb{Z}_+$.*

Proof. (i). Choose any eigenfunction ϕ of H_C corresponding to $E<0$. Make the change $\psi=U_W^{-1}\phi$, and then look at the associated differential equation:

$$\psi''(z)-\frac{1}{4}\psi(z)+\frac{\alpha}{|z|}\psi(z)=0,\quad z\neq 0,\ E=-\frac{1}{2\alpha^2}\,, \tag{3.47}$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{\psi'(-\varepsilon)-\psi'(\varepsilon)}{2}+\alpha\big(\ln r-\ln(\alpha\varepsilon)\big)\psi(0)\right]=0\,. \tag{3.48}$$

First assume $\alpha=N\in\mathbb{Z}_+$. The theory of ordinary differential equations insure the existence of two constants C_1 and C_2 such that

$$\begin{aligned}\psi(z)&=C_1e^{-\frac{1}{2}z}z\frac{1}{N}L^1_{N-1}(z),\quad z>0\,,\\ \psi(z)&=C_2e^{\frac{1}{2}z}z\frac{1}{N}L^1_{N-1}(-z),\quad z<0\,.\end{aligned} \tag{3.49}$$

By inspection (and by continuity) we get that $\psi(0)=0$. If we put ψ in (3.48), and using the explicit form of the Laguerre polynomials, we get that the boundary

condition is fulfilled only if $C_1 = C_2$ which amounts to $\psi(z) = -\psi(-z)$, i.e., there is one and only one solution which is also odd.

Now assume $\alpha \notin \mathbb{Z}_+$. The theory of ordinary differential equations insure the existence of two constants C_3 and C_4 such that

$$\begin{aligned} \psi(z) &= C_3 W_{\alpha,\frac{1}{2}}(z), \quad z > 0\,, \\ \psi(z) &= C_4 W_{\alpha,\frac{1}{2}}(-z), \quad z < 0\,. \end{aligned} \tag{3.50}$$

By inspection we see that $W_{\alpha,\frac{1}{2}}(0) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \neq 0$, hence by continuity at zero we must have $C_3 = C_4$, hence $\psi(z) = \psi(-z)$ and the eigenfunction must be even.

(ii). The proof is already contained in (i), since the boundary condition is trivially fulfilled for odd functions. There is exactly one eigenfunction, an odd one, corresponding to every $\alpha \in \mathbb{Z}_+$.

(iii). We saw in (i) that if there are eigenfunctions corresponding to $\alpha \notin \mathbb{Z}_+$, then they must be even. In order to get all possible α's which are compatible with the boundary condition (3.48), we compute (note that ψ' is odd):

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[-W'_{\alpha,\frac{1}{2}}(\varepsilon) + \alpha\big(\ln r - \ln(\alpha\varepsilon)\big)\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\right] = 0 \tag{3.51}$$

and using the explicit expression of these special functions we obtain the condition on α:

$$f(\alpha, r) := \psi(1-\alpha) + 2\gamma + \frac{1}{2\alpha} - \ln\alpha + \ln r = 0\,, \tag{3.52}$$

where ψ here means the digamma function and γ is Euler's constant. Since the digamma function is strictly increasing from $-\infty$ to $+\infty$ on each interval of the form $(-m, -m+1)$, $m \in \mathbb{Z}_+$, one can easily see that $f(\cdot, r)$ is strictly decreasing from $+\infty$ to $-\infty$ when α varies in an interval of the form $(k-1, k)$ for every $k \in \mathbb{Z}_+$. Therefore we have a unique solution $\alpha_k \in (k-1, k)$ of the equation $f(\alpha_k, r)$ for every $k \in \mathbb{Z}_+$. The proposition is proved. □

The previous proposition stated that only the eigenvalues from the even sector can vary with r. Let us now further investigate this dependence.

Corollary 3.12. (i). *The excited states with even parity tend to those with odd parity when r is small. More precisely, for $k \geq 2$, we have that* $\lim_{r\to 0}\alpha_k = k-1$*;*

(ii). *For $k = 1$, we have the following asymptotic behavior of the ground state:*

$$\alpha_1(r) = -\frac{1}{2\ln(r)}\{1 + o_r(1)\}, \quad E_1(r) = -2[\ln(r)]^2\{1 + o_r(1)\}\,. \tag{3.53}$$

Proof. (i). The limit follows easily from the properties of the digamma function.

(ii). We apply the implicit function theorem. Define the function

$$F(\alpha, y) := \frac{2\alpha}{1 + 2\alpha[2\gamma + \psi(1-\alpha) - \ln(\alpha)]} - y\,,$$

for (α, y) in a small disk around the origin in $\mathbb{R}^2$. This function is C^1 near $(0,0)$, $(\partial_\alpha F)(0,0) = 2$, and $F(0,0) = 0$. Then for every $y > 0$ small enough there exists

$\alpha(y) > 0$ such that $F(\alpha(y), y) = 0$. Now put $y = -1/\ln(r)$ and we are done because (3.52) is also satisfied with this α. □

3.3. Approximation of H^r_{eff} by H_C

We will now show that the negative spectrum of H^r_{eff} converges in a certain sense to the one of H_C. This is made precise in the next proposition, but before we need a definition. For a given subset S of $\mathbb{R}$, and for any $\epsilon > 0$ we define

$$S_\epsilon := \bigcup_{x \in S} B_\epsilon(x)\,. \tag{3.54}$$

If S is a discrete, finite set, then S_ϵ is a finite union of intervals of length 2ϵ, centered at the points of S.

Proposition 3.13. *The following three statements hold true:*

(i). *Fix $a < 0$, and denote by $A := \sigma(H_C) \cap (-\infty, a]$ and $B := \sigma(H^r_{\text{eff}}) \cap (-\infty, a]$. Then for every $\epsilon > 0$, there exists $r_\epsilon > 0$ such that for every $r < r_\epsilon$ we have*

$$A \subset B_\epsilon, \quad B \subset A_\epsilon\,. \tag{3.55}$$

(ii). *The ground-state of H^r_{eff} is non-degenerate, has even parity, and diverges to $-\infty$ when $r \to 0$. Moreover:*

$$\lim_{r \to 0} |\inf \sigma(H_C) - \inf \sigma(H^r_{\text{eff}})| = 0\,. \tag{3.56}$$

(iii). *Fix a compact interval $[a, b] \subset (-\infty, 0)$ and suppose that H_C has exactly one eigenvalue of a given parity E_C in $[a, b]$, for all $r < r_0$. Then if r is small enough, H^r_{eff} has exactly one eigenvalue of the same parity E_{eff} in this interval and*

$$\lim_{r \to 0} |E_{\text{eff}} - E_C| = 0\,.$$

Proof. Let us introduce the resolvents $R_{\text{eff}}(z) = (H^r_{\text{eff}} - z)^{-1}$ for all $z \in \rho(H^r_{\text{eff}})$ and $R_C(z) = (H_C - z)^{-1}$ for all $z \in \rho(H_C)$. The first ingredient in the proof is contained by the following lemma:

Lemma 3.14. *There exists a constant $K > 1$ sufficiently large, and r_0 small enough, such that for every $r < r_0$ we have that the form defined on $L^2(\mathbb{R}) \times L^2(\mathbb{R})$ (see also* (3.27)*)*

$$\begin{aligned} V_C(f, g) := \; & t_C\left([p_x^2/2 + \lambda_r]^{-1/2} f, [p_x^2/2 + \lambda_r]^{-1/2} g\right) \\ & + \lambda_r \langle f, [p_x^2/2 + \lambda_r]^{-1} g\rangle - \langle f, g\rangle \\ \text{“}=\text{”} \; & [p_x^2/2 + \lambda_r]^{-1/2}\{H_C + \lambda_r\}[p_x^2/2 + \lambda_r]^{-1/2} - \mathrm{Id}, \quad \lambda_r := K \ln^2(r)\,, \end{aligned} \tag{3.57}$$

generates a bounded operator on $L^2(\mathbb{R})$ denoted in the same way. Moreover, $\sup_{0<r<r_0} \|V_C\| \le 1/2$. And we have

$$\{H_C + \lambda_r\}^{-1} = [p_x^2/2 + \lambda_r]^{-1/2}\{\mathrm{Id} + V_C\}^{-1}[p_x^2/2 + \lambda_r]^{-1/2}\,. \tag{3.58}$$

Proof. The key estimate is contained in

$$\|(p_x^2/2+\lambda)^{-1/2}\|_{L^2\to L^\infty} \leq \text{const}\,\frac{1}{\lambda^{1/4}}\,, \tag{3.59}$$

obtained with an argument as in (3.15). Then if we have $|\ln(r)|/\sqrt{\lambda_r}$ small enough, then the "delta function" part of t_C will be small uniformly in $r < r_0$. Using also (3.19), and the definition (3.27), then one can show that (3.57) is a bounded sesquilinear form on $L^2(\mathbb{R})$, with a norm which can be made arbitrarily small if K is chosen large enough. Now the equality (3.58) is easy, and note that this is also compatible with (3.53). □

Introduce the notation:

$$\tilde{V}_{\text{eff}} := (p_x^2/2+\lambda_r)^{-1/2} V_{\text{eff}}^r (p_x^2/2+\lambda_r)^{-1/2}\,. \tag{3.60}$$

The second ingredient in the proof of the above proposition is the following estimate, which is an easy consequence of Proposition 3.1:

$$\|V_C - \tilde{V}_{\text{eff}}\| = \mathcal{O}(r^{4/9}), \quad r < r_0\,. \tag{3.61}$$

We also have that $\|\tilde{V}_{\text{eff}}\| \leq 2/3$ if r_0 is small enough, uniformly in $r < r_0$, and then

$$\{H_{\text{eff}}^r + \lambda_r\}^{-1} = [p_x^2/2+\lambda_r]^{-1/2}\{\text{Id} + \tilde{V}_{\text{eff}}\}^{-1}[p_x^2/2+\lambda_r]^{-1/2}\,. \tag{3.62}$$

It is clear that a similar identity would hold for any other $\lambda \geq \lambda_r$, and this already tells us that the spectrum of H_{eff}^r is contained in an interval of the type $(-\lambda_r, \infty)$, thus justifying the discussion after (2.14).

From (3.62), (3.61) and (3.58), we get the crucial estimate:

$$\|R_{\text{eff}}(-\lambda_r) - R_C(-\lambda_r)\| \leq \text{const}\,\frac{r^{4/9}}{\lambda_r}, \quad r < r_0\,. \tag{3.63}$$

This estimate allows us to prove (i). Introduce the notation

$$d_C(z) := \text{dist}\big(z, \sigma(H_C)\big)\,. \tag{3.64}$$

Choose $z \in \rho(H_C)$ (thus $d_C(z) > 0$). From the identity:

$$(H_C - z)R_C(-\lambda_r) = \text{Id} - (z+\lambda_r)R_C(-\lambda_r) \tag{3.65}$$

we get that the right hand side is invertible and:

$$\big\{\text{Id} - (z+\lambda)R_C(-\lambda_r)\big\}^{-1} = (H_C+\lambda_r)R_C(z) = \text{Id} + (z+\lambda_r)R_C(z)\,. \tag{3.66}$$

The first equality implies that

$$R_C(z) = R_C(-\lambda_r)\big\{\text{Id} - (z+\lambda_r)R_C(-\lambda_r)\big\}^{-1}\,, \tag{3.67}$$

while the second one gives the norm estimate:

$$\Big\|\big\{\text{Id} - (z+\lambda_r)R_C(-\lambda_r)\big\}^{-1}\Big\| \leq \big[1 + (|z|+\lambda_r)/d_C(z)\big]\,. \tag{3.68}$$

Note the important fact that (3.67) is just another form of the resolvent identity, valid for any self-adjoint operator. If we could replace $R_C(-\lambda_r)$ by $R_{\text{eff}}(-\lambda_r)$, then the right hand side would immediately imply that $z \in \rho(H_{\text{eff}})$.

We can restrict ourselves to those z's which obey $|z| \leq \lambda_r$. Then using (3.63) and (3.68), we get that for $r < r_0$ and $d_C(z) \geq r^{1/3}$, the operator

$$\mathrm{Id} - (z + \lambda_r) R_{\mathrm{eff}}(-\lambda_r)$$

is invertible and we get the estimate:

$$\left\| \{\mathrm{Id} - (z + \lambda_r) R_{\mathrm{eff}}(-\lambda_r)\}^{-1} \right\| \leq \frac{\mathrm{const}}{d_C(z)} \, \lambda_r \, [1 - \mathrm{const}\, \lambda_r \, r^{4/9}/d_C(z)]^{-1} \,. \quad (3.69)$$

Therefore we have proved that for every z which obeys $|z| \leq \lambda_r$ and $d_C(z) > r^{1/3}$, the operator

$$R_{\mathrm{eff}}(-\lambda_r) \big\{ \mathrm{Id} - (z + \lambda_r) R_{\mathrm{eff}}(-\lambda_r) \big\}^{-1} \quad (3.70)$$

exists and defines $R_{\mathrm{eff}}(z)$. It means that the spectrum of H^r_{eff} is "close" to that of H_C, and the distance between them is going to zero at least like $r^{1/3}$.

Let us now prove (ii). We know that the ground-state of H_C diverges like $-\ln^2(r)$ for small r, and it is isolated from the rest of the spectrum. Choose a circular contour Γ of radius 1 around this ground-state. It means that $d_C(z) = 1$ for $z \in \Gamma$. Then (3.70), (3.69) and (3.63) imply the estimate

$$\sup_{z \in \Gamma} \| R_{\mathrm{eff}}(z) - R_C(z) \| \leq \mathrm{const} \cdot r^{4/9}, \quad r < r_0 \,. \quad (3.71)$$

Now we can employ the regular perturbation theory, see [8], by using Riesz projections defined as complex integrals of the resolvents on contours like Γ. Then the estimate (3.56) is straightforward.

Finally, let us prove (iii). We know that for small r, the excited states of H_C tend to cluster in pairs. The eigenvalues from the odd parity sector are independent of r, while those from the even parity sector will converge from above to the odd ones (see Proposition 3.11). Consider such a pair of eigenvalues, which will always remain separated from the rest of the spectrum if $r < r_1$ and r_1 is small enough. Then we can find a contour Γ which contains them and $\inf_{z \in \Gamma} d_C(z)$ is bounded from below uniformly in $r < r_1$. Then we can again write an estimate like (3.71), and then apply the regular perturbation theory. The proof is over. □

4. Reduction of $\widetilde{H^r}$ to H^r_{eff}

We are now ready to go back to (2.24), and argue why only the diagonal entries of the infinite operator-valued matrix $\{H_{m,n}\}_{m,n \in \mathbb{Z}}$ are important for the low lying spectrum of $\widetilde{H^r}$.

Let us formally write $\widetilde{H^r}$ as:

$$\widetilde{H^r} = H_{\mathrm{diag}} + V_{\mathrm{offdiag}} \,,$$

where $H_{\mathrm{diag}} = \bigoplus_{n \in \mathbb{Z}} (H^r_{\mathrm{eff}} + \frac{n^2}{2r^2})$, and V_{offdiag} contains all the non-diagonal entries of the form $V^r_{m,n}$, $m \neq n$, (see (2.25)), and zero on the diagonal. We will prove in this section that V_{offdiag} is relatively form bounded with respect to H_{diag}, and moreover, it is a "small" perturbation when r is small.

The main result is very similar to Proposition 3.13, where we only have to change H_C by $H_{\rm diag}$ and $H^r_{\rm eff}$ by $\widetilde{H^r}$. Parity here only refers to the x variable. Therefore we will start comparing the two operators. Before that, let us note that the negative spectrum of $H_{\rm diag}$ is given by $H^r_{\rm eff}$ if r is small enough.

4.1. $V_{\rm offdiag}$ is $H_{\rm diag}$-form bounded

Let $\lambda_r = K\ln^2(r)$ with K large enough and $r < r_0$, as in the previous section. We know that $-\lambda_r \in \rho(H_{\rm diag})$, and denote by $R_{\rm diag}(-\lambda_r)$ the resolvent $(H_{\rm diag}+\lambda_r)^{-1}$. Then the main technical result of this subsection will be the following estimate: there exists $\delta > 0$ and $r_0(\delta)$ such that

$$\left\| R^{1/2}_{\rm diag}(-\lambda_r) V_{\rm offdiag} R^{1/2}_{\rm diag}(-\lambda_r) \right\|_{B_\infty(l^2(\mathbb{Z};L^2(\mathbb{R})))} = \mathcal{O}(r^\delta\ \lambda_r^{-1/2}), \quad r < r_0\,. \tag{4.1}$$

Let us first notice that we can replace $R^{1/2}_{\rm diag}$ by a simpler operator, namely $\bigoplus_{n\in\mathbb{Z}}(\epsilon p_x^2 + 1 + \frac{n^2}{2r^2})^{-1/2}$, where ϵ is a small enough positive number. Indeed, we can write

$$\langle f, [H^r_{\rm eff} + \lambda_r + n^2/(2r^2)]f\rangle \geq \langle f, [\epsilon p_x^2 + \lambda_r/2 + n^2/(2r^2)]f\rangle\,,$$

where we used that for ϵ small enough we can show that:

$$(1/2-\epsilon)p_x^2 - V^r_{\rm eff} + \lambda_r/2 \geq 0, \quad r < r_0\,.$$

This means that

$$\left\| \left[\epsilon p_x^2 + \lambda_r/2 + n^2/(2r^2)\right]^{1/2} \left[H^r_{\rm eff} + \lambda_r + n^2/(2r^2)\right]^{-1/2} \right\|_{B_\infty(L^2(\mathbb{R}))} \leq 1\,. \tag{4.2}$$

Define the bounded operators in $L^2(\mathbb{R})$ (see (2.25)):

$$\begin{aligned} &\tilde V^r_{m,n} := \left[\epsilon p_x^2 + \lambda_r/2 + m^2/(2r^2)\right]^{-1/2} V^r_{m,n} \left[\epsilon p_x^2 + \lambda_r/2 + n^2/(2r^2)\right]^{-1/2}, m \neq n\,,\\ &\tilde V^r_{m,m} := 0, \quad m \in \mathbb{Z}\,. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Then (4.1) would be implied by the following, stronger estimate:

$$\left\| \left\{ \tilde V^r_{m,n} \right\}_{m,n\in\mathbb{Z}} \right\|_{B_\infty(l^2(\mathbb{Z};L^2(\mathbb{R})))} = \mathcal{O}(r^\delta \lambda_r^{-1/2}), \quad r < r_0\,. \tag{4.4}$$

By an easy application of the Schur–Holmgren lemma, one can prove the estimate:

$$\left\| \left\{ \tilde V^r_{m,n} \right\}_{m,n\in\mathbb{Z}} \right\|_{B_\infty(l^2(\mathbb{Z};L^2(\mathbb{R})))} \leq \sup_{m\in\mathbb{Z}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} \|\tilde V^r_{m,n}\|_{B_\infty(L^2(\mathbb{R}))}\,. \tag{4.5}$$

We now concentrate on the norms $\|\tilde V^r_{m,n}\|_{B_\infty(L^2(\mathbb{R}))}$ and study their behavior in r, m, and n. Remember that only the case $m \neq n$ is of interest, since the diagonal terms are zero.

Before anything else, let us do a unitary rescaling of $L^2(\mathbb{R})$ by $(Uf)(x) := r^{1/2}f(rx)$ and $(U^*f)(x) := r^{-1/2}f(x/r)$. Then due to various homogeneity properties we get:

$$U\tilde V^r_{m,n}U^* = r\cdot\left[\epsilon p_x^2 + r^2\lambda_r/2 + m^2/2\right]^{-1/2} V^1_{m,n} \left[\epsilon p_x^2 + r^2\lambda_r/2 + n^2/2\right]^{-1/2}. \tag{4.6}$$

We first give an important estimate for $V^1_{m,n}$, stated in the next lemma:

Lemma 4.1. *Let $0 < \alpha < 1$ and $|m-n| \geq 1$. Fix any $0 < \epsilon < 1$. Then there exists a constant $C = C(\alpha, \epsilon)$ such that we have the following estimate:*

$$|V^1_{m,n}|(x) \leq C \left\{ \frac{1}{|n-m|^\alpha} \frac{1}{|x|^\alpha} + \frac{1}{|n-m|} \right\}, \quad |x| \leq r^{-\epsilon}, \tag{4.7}$$

and

$$|V^1_{m,n}|(x) \leq \text{const} \frac{r^{3\epsilon}}{|n-m|}, \quad |x| \geq r^{-\epsilon}. \tag{4.8}$$

Proof. Due to symmetry properties we can write

$$V^1_{m,n}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos[(n-m)y]}{[x^2 + 4\sin^2(y/2)]^{1/2}} dy. \tag{4.9}$$

Integrating by parts we get:

$$V^1_{m,n}(x) = \frac{1}{2\pi(n-m)} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin[(n-m)y]\sin(y)}{[x^2 + 4\sin^2(y/2)]^{3/2}} dy. \tag{4.10}$$

This equality immediately proves (4.8). So we now focus on $|x| \leq r^{-\epsilon}$. We can split the integral in two: one in which $|y| \geq \pi/2$, and where the integrand has no singularities when x is small, and the second where $|y| \leq \pi/2$. In that region we can use the same idea as in Lemma 3.2 of replacing $\sin^2(y/2)$ by y^2. We hence get:

$$|V^1_{m,n}|(x) \leq \frac{\text{const}}{|n-m|} \left(1 + \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{|\sin[(n-m)y]\sin(y)|}{[x^2+y^2]^{3/2}} dy \right). \tag{4.11}$$

Now we employ the inequalities (here $0 < \alpha < 1$ is arbitrary):

$$|\sin[(n-m)y]| \leq |n-m|^{1-\alpha}|y|^{1-\alpha}, \quad |\sin(y)| \leq |y|,$$

then we make the change of variables $s = y/|x|$ and write:

$$|V^1_{m,n}|(x) \leq \frac{\text{const}}{|n-m|} \left(1 + 2\frac{|n-m|^{1-\alpha}}{|x|^\alpha} \int_0^\infty \frac{s^{2-\alpha}}{[1+s^2]^{3/2}} ds \right). \tag{4.12}$$

Thus the lemma is proved. □

Now let us go back to (4.6), and estimate the various norms. If we write $V^1_{m,n} = V^1_{m,n}\chi(|\cdot| \leq r^{-\epsilon}) + V^1_{m,n}\chi(|\cdot| > r^{-\epsilon})$, then we have two different types of estimates. When we keep $V^1_{m,n}\chi(|\cdot| > r^{-\epsilon})$, which is bounded, then for the two resolvents we can use the usual $B_\infty(L^2)$ norm, which together with (4.8) gives a contribution:

$$\frac{\text{const}\, r^{3\epsilon}}{\sqrt{r^2\lambda_r + n^2}\,\sqrt{r^2\lambda_r + m^2}\,|m-n|}, \quad n \neq m. \tag{4.13}$$

When we keep $V^1_{m,n}\chi(|\cdot| \leq r^{-\epsilon})$, the estimate from (4.7) gives us that $[|V^1_{m,n}|\chi(|\cdot| \leq 1)]^{1/2}$ is an L^2 function, hence the operator

$$\sqrt{|V^1_{m,n}|}\,\chi(|\cdot| \leq r^{-\epsilon}) \left[\epsilon p_x^2 + r^2\lambda_r/2 + n^2/2\right]^{-1/2}$$

is Hilbert–Schmidt. Thus we have a product of two Hilbert–Schmidt operators, and we can give an upper bound for the B_∞ norm of their product of the form:

$$\frac{\mathrm{const}(\alpha)\, r^{-\epsilon}}{(r^2\lambda_r + n^2)^{1/4}\,(r^2\lambda_r + m^2)^{1/4}\,|m-n|^\alpha}, \quad n \neq m\,. \tag{4.14}$$

Therefore we obtained an upper bound for the norm of the operator in (4.6) of the form:

$$\begin{aligned}\|\tilde{V}^r_{m,n}\| \leq{}& \frac{r\cdot \mathrm{const}\; r^{3\epsilon}}{\sqrt{r^2\lambda_r + n^2}\,\sqrt{r^2\lambda_r + m^2}\,|m-n|} \\ &+ \frac{r\cdot \mathrm{const}\cdot r^{-\epsilon}}{(r^2\lambda_r + n^2)^{1/4}\,(r^2\lambda_r + m^2)^{1/4}\,|m-n|^\alpha}, \quad m \neq n\,. \end{aligned}\tag{4.15}$$

Remember that one is interested in the right hand side of (4.5). Now choose $1/2 < \alpha < 1$. We have to investigate several cases:

1. When $m = 0$ and $|n| \geq 1$. Then the first term in (4.15) will behave like $\lambda_r^{-1/2}\, r^{3\epsilon}|n|^{-2}$.

   The second term will behave like $r^{1/2-\epsilon}\lambda_r^{-1/4}|n|^{-1/2-\alpha}$. Both contributions are summable with respect to n. Note that if ϵ is small enough, both exponents of r are positive. Denote by δ the smaller one.
2. Fix $m \neq 0$, and consider all $n \neq m$. When $n = 0$, we get similar terms as above. If $n \neq 0$, then we remain with the problem of summing up something like

   $$\sup_{m\neq 0} |m|^{-1/2} \sum_{n\neq 0, n\neq m} \frac{1}{|n|^{1/2}|n-m|^\alpha},\ 1/2 < \alpha\,.$$

   We can either use Hölder's inequality, or we can split the above sum in the following way:

   $$\begin{aligned}&\sum_{n\neq 0, n\neq m} \frac{1}{|n|^{1/2}|n-m|^\alpha} \\ &= \left(\sum_{n\neq 0, n\neq m, |n|\leq |n-m|} + \sum_{n\neq 0, n\neq m, |n|>|n-m|}\right) \frac{1}{|n|^{1/2}|n-m|^\alpha} \\ &\leq \sum_{n\neq 0, n\neq m} \left(\frac{1}{|n|^{\alpha+1/2}} + \frac{1}{|n-m|^{1/2+\alpha}}\right) \leq \mathrm{const}(\alpha)\,. \end{aligned}\tag{4.16}$$

   We therefore consider (4.1) as proved.

4.2. Comparison between $\widetilde{H^r}$ and H_{diag}

If r is small enough, we have the identity:

$$(\widetilde{H^r} + \lambda_r)^{-1} = R^{1/2}_{\mathrm{diag}}(-\lambda_r)\left\{\mathrm{Id} + R^{1/2}_{\mathrm{diag}}(-\lambda_r) V_{\mathrm{offdiag}} R^{1/2}_{\mathrm{diag}}(-\lambda_r)\right\}^{-1} R^{1/2}_{\mathrm{diag}}(-\lambda_r)\,.$$

Moreover, this implies:

$$\left\|(\widetilde{H^r}+\lambda_r)^{-1}-R_{\mathrm{diag}}(-\lambda_r)\right\| \leq \frac{\mathrm{const}}{\lambda_r}\left\|R^{1/2}_{\mathrm{diag}}(-\lambda_r)V_{\mathrm{offdiag}}R^{1/2}_{\mathrm{diag}}(-\lambda_r)\right\|$$
$$\leq \mathrm{const}\frac{r^\delta\lambda_r^{-1/2}}{\lambda_r}\,. \tag{4.17}$$

This is the same as what we had in (3.63), but with $\lambda_r^{-1/2}\ r^\delta$ instead of $r^{4/9}$. Therefore we can repeat the arguments of Proposition 3.13 and prove a similar kind of spectrum stability for $\widetilde{H^r}$ and H_{diag}.

5. The main theorem and some conclusions

We now try state a concentrated main result of our paper. Let us first go back to the very first Hamiltonian which was declared to be relevant for the exciton problem. This is $\bar{H}^r$, written in (2.1). Because of the Coulomb singularity, the best way to look at the spectral problem is to consider its form t_H, given by (2.4), (2.5) and (2.6). We then managed to separate the mass center motion in the longitudinal direction, and we got a simpler form t_h in (2.8). The center of the mass cannot be separated in the transverse direction because of the cylindrical geometry, but at least we can write t_h as a direct sum of $\bigoplus_{k\in\mathbb{Z}} t_{h_k}$. A crucial observation has been stated in (2.14), which says that only t_{h_0} is responsible for the lowest lying spectrum of the original form.

This gave us the possibility of renaming t_{h_0} with $\widetilde{t_H}$ in (2.15), and declare it as the central object of study. Then in Proposition 2.1 we constructed its associated self-adjoint operator $\widetilde{H^r}$, where we had to take care of the Coulomb-type singularity in two dimensions.

Then after a unitary transformation induced by the discrete Fourier transform with respect to the y variable, we can see $\widetilde{H^r}$ as an infinite operator valued matrix acting on the Hilbert space $l^2(\mathbb{Z};L^2(\mathbb{R}))$. We then decomposed $\widetilde{H^r}$ as the sum of a diagonal operator H_{diag} and an off-diagonal part V_{offdiag}. Eventually we proved in Section 4 that the low lying spectrum of $\widetilde{H^r}$ is only slightly influenced by the off-diagonal part for small r, and therefore the relevant object remains H_{diag}.

But this diagonal part has the nice feature that each of its entry is of the form $H^r_{\mathrm{eff}}+\frac{n^2}{2r^2}$, $n\in\mathbb{Z}$, where H^r_{eff} is given in (2.28) and (2.27). Then in Section 3, more precisely in Proposition 3.13 we prove that the low lying spectrum of H^r_{eff} is well approximated by the spectrum of a solvable operator, H_C, which we discussed in Proposition 3.11.

We are now ready to collect all these results in the main theorem of our paper:

Theorem 5.1. *The following three statements hold true:*

(i). *Fix $a<0$, and denote by $A:=\sigma(H_C)\cap(-\infty,a]$ and $B:=\sigma(\widetilde{H^r})\cap(-\infty,a]$. With the definition introduced in* (3.54)*, we have that for every $\epsilon>0$, there*

exists $r_\epsilon > 0$ such that for every $r < r_\epsilon$ we have

$$A \subset B_\epsilon, \quad B \subset A_\epsilon\,. \tag{5.1}$$

(ii). *The ground-state of $\widetilde{H^r}$ is non-degenerate, and diverges to $-\infty$ when $r \to 0$. The corresponding eigenfunction has even parity with respect to both variables. Moreover:*

$$\lim_{r\to 0} |\inf \sigma(H_C) - \inf \sigma(\widetilde{H^r})| = 0\,. \tag{5.2}$$

(iii). *Fix a compact interval $[a, b] \subset (-\infty, 0)$ and suppose that H_C has exactly one eigenvalue E_C in $[a, b]$, of parity $p = \pm$, for all $r < r_0$. Then if r is small enough, $\widetilde{H^r}$ has exactly one eigenvalue $\tilde{E}$ in this interval and*

$$\lim_{r\to 0} |\tilde{E} - E_C| = 0\,.$$

Moreover, the corresponding eigenfunction has parity p with respect to x.

Another important aspect of this problem is to determine how fast these limits are assumed. We have not touched this issue here, but we will study the numerical and physical implications of our results in a consequent paper.

Acknowledgements

The authors thank T. G. Pedersen for many fruitful discussions. H. C. was partially supported by the embedding grant from *The Danish National Research Foundation: Network in Mathematical Physics and Stochastics*. H. C. acknowledges support from the Danish F.N.U. grant *Mathematical Physics and Partial Differential Equations*, and partial support through the European Union's IHP network Analysis & Quantum HPRN-CT-2002-00277.

References

[1] M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, Dover, New York, 1964.

[2] H. Akiyama, *One dimensional excitons in GaAs quantum nanowires*, J. Phys.: Condens. Matter **10** (1998), 3095–3139.

[3] A. Bouzouina, *Stability of the two-dimensional Brown–Ravenhall operator*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A **132** no. 5, (2002), 1133–1144.

[4] R. Brummelhuis, P. Duclos, *Effective Hamiltonians for atoms in very strong magnetic fields*, Few-Body Systems **31** (2002), 1–6.

[5] R. Brummelhuis, P. Duclos, *Effective Hamiltonians for atoms in very strong magnetic fields*, J. Math. Phys. **47** (2006), 032103.

[6] H. D. Cornean, P. Duclos, T. G. Pedersen, *One dimensional models of excitons in carbon nanotubes*, Few-Body Systems **34** no. 1–3, (2003), 155–161.

[7] A. L. Fetter, J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, Dover, 2003.

[8] T. Kato, Perturbation Theory for Linear Operators, Springer-Verlag, 1966.

[9] M. K. Kostov, M. W. Cole, G. D. Mahan, *Variational approach to the coulomb problem on a cylinder*, Phys. Rev. B **66** (2002), 075407.

[10] R. Loudon, *One-dimensional hydrogen atom*, Amer. J. Phys. **27** (1959), 649–655.

[11] T. G. Pedersen, *Variational approach to excitons in carbon nanotubes*, Phys. Rev. B **67** (2003), 073401.

[12] T. G. Pedersen, *Exciton effects in carbon nanotubes*, Carbon **42** (2004), 1007.

[13] M. Reed, B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics. III: Scattering Theory, Academic Press, 1972.

[14] M. Shinada, S. Sugano, *Interband optical transitions in extremely anisotropic semiconductors. I. Bound and unbound exciton absorption*, J. Phys. Soc. Jpn. **21** no.7, (1966), 1936.

Horia D. Cornean
Department of Mathematics
Aalborg University
Fredrik Bajers Vej 7G
DK-9220 Aalborg
Denmark
e-mail: `cornean@math.aau.dk`

Pierre Duclos and Benjamin Ricaud
Centre de Physique Théorique
UMR 6207
Unité Mixte de Recherche du CNRS et des Universités Aix-Marseille I
Aix-Marseille II et de l'Université du Sud Toulon-Var
Laboratoire affilié à la FRUMAM
Luminy Case 907
F-13288 Marseille Cedex 9
France
e-mail: `duclos@univ-tln.fr`
`ricaud@cpt.univ-mrs.fr`

Communicated by Claude Alain Pillet.

Submitted: February 2, 2006.

Accepted: March 24, 2006.

6.4 Une comparaison avec des résultats variationnels

arXiv:math-ph/0605014v2 2 May 2007

Rigorous perturbation theory versus variational methods in the spectral study of carbon nanotubes

May 1st, 2007

Horia D. Cornean[1], **Thomas G. Pedersen**[2], **Benjamin Ricaud** [3]

Abstract

Recent two-photon photo-luminescence experiments give accurate data for the ground and first excited excitonic energies at different nanotube radii. In this paper we compare the analytic approximations proved in [CDR], with a standard variational approach. We show an excellent agreement at sufficiently small radii.

1 Introduction

Recent experimental results on carbon nanotubes using two photon photo luminescence [Sc02], [W], [MPR] reveal the energy levels of the excitons, especially the ground and first excited states, and point out the dependence of these energies on the radius of the nanotube. As it is, this technique appears to be a promising way to sort out nanotubes. But on the other hand, theoretical results seem to require heavy ab initio calculation like in [MPR] [CBRM], to cite the most recent, in order to find the absorption peaks due to excitons. Nevertheless, a simple formula for the optical response based on excitons levels [HK] can give a good approximation. It has been pointed out [BGEH] [OT] that the exciton binding energy in quantum wires depends on the width of the wires by a relatively simple relation. This property is also valid for nanotubes [P1]. In the first part of the paper, we outline a rigorous justification for this latter fact and write a simple analytic formula for the energy levels of the exciton depending on the radius of the tube, based on the paper [CDR]. In the second part we compare our results with a variational numerical method and show a very good agreement between them.

2 The exciton model

As first suggested in [P1], we deal with Wannier excitons (a rigorous justification of this procedure is in preparation [R]). We take as configuration space a cylinder of radius r and infinite length, space denoted by $\mathcal{C}_r = \mathbb{R} \times rS^1$, S^1 being the unit circle. The coordinates on the cylinder are $(x, y) \in (\mathbb{R} \times rS^1)$ where x is the variable along the tube axis and y is the transverse coordinate.

The two quasi-particles live in the Hilbert space $\mathrm{L}^2(\mathcal{C}_r \times \mathcal{C}_r)$. We formally consider the Hamiltonian

$$\bar{H}^r = -\hbar^2 \left(\frac{\Delta_{x_1}}{2m_1} + \frac{\Delta_{x_2}}{2m_2} + \frac{\Delta_{y_1}}{2m_1} + \frac{\Delta_{y_2}}{2m_2} \right) - V^r(x_1 - x_2, y_1 - y_2), \tag{2.1}$$

where

$$V^r(x, y) := \frac{-e_1 e_2}{\varepsilon \sqrt{x^2 + 4r^2 \sin^2\left(\frac{y}{2r}\right)}} \tag{2.2}$$

[1]Dept. of Mathematical Sciences, Aalborg University, Fredrik Bajers Vej 7G, 9220 Aalborg, Denmark; e-mail: cornean@math.aau.dk

[2]Dept. Phys. and Nanotech., Aalborg University, 9220 Aalborg, Denmark; e-mail: tgp@physics.aau.dk

[3]Centre de Physique Théorique UMR 6207 - Unité Mixte de Recherche du CNRS et des Universités Aix-Marseille I, Aix-Marseille II et de l'université du Sud Toulon-Var - Laboratoire affilié à la FRUMAM, Luminy Case 907, F-13288 Marseille Cedex 9 France; e-mail: ricaud@cpt.univ-mrs.fr

(x_i, y_i) are the coordinates on the cylinder of the two charged particles, m_i their masses, and e_i their charges. Here ε is the electric permittivity of the material. The potential V^r is the three dimensional Coulomb potential simply restricted to the cylinder. We justify the expression of V^r by Pythagoras's theorem. The cylinder is embedded in $\mathbb{R}^3$. The distance ρ from one particle to the other in $\mathbb{R}^3$ is:

$$\rho^2 = (x_1 - x_2)^2 + 4r^2 \sin^2\left(\frac{y_1 - y_2}{2r}\right)$$

where $|2r \sin\left(\frac{y_1-y_2}{2r}\right)|$ is the length of the chord joining two points of coordinate y_1 and y_2 on the circle.

2.1 "Separation of the center of mass"

Due to the restrictions imposed by the cylindrical geometry, the usual separation of the center of mass does not work here.

The standard separation with Jacobi coordinates only works for the longitudinal variable, and introducing $M := m_1 + m_2$ and $\mu := m_1 m_2/(m_1 + m_2)$, we denote $X := (m_1 x_1 + m_2 x_2)/M$ and $x := x_1 - x_2$. For the transverse variable, we change to atomic coordinates $Y = y_2$ and $y = y_1 - y_2$. Let us also define the effective Rydberg $Ry^* = \mu e^4/2\hbar^2\varepsilon^2$ and Bohr radius $a_B^* = \hbar^2\varepsilon/\mu e^2$, where we set $e = e_1 = e_2$. By a scaling, the new energy and radius will be expressed in multiple of these units. This gives us the Hamiltonian:

$$H^r = -\frac{1}{M}\partial_X^2 - \frac{1}{m_2}\partial_Y^2 - \frac{1}{\mu}\partial_x^2 - \frac{1}{\mu}\partial_y^2 + \frac{2}{m_2}\partial_y\partial_Y - 2V^r(x, y).$$

First, we can separate the partial center of mass with coordinate X. Second, since on the Y variable there are periodic boundary conditions, let us consider the orthonormal basis of eigenvectors of $-\partial_Y^2$,

$$-\partial_Y^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n^r |\chi_n^r\rangle\langle\chi_n^r|$$

where

$$\chi_n^r(Y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} e^{in\frac{Y}{r}} \text{ and } E_n^r = \frac{n^2}{r^2},\ n \in \mathbb{Z}.$$

One can see that for small radii, the separation between different transverse levels of energy is high. A recent theoretical study based on ab initio calculations [MPR] shows that the probability density of the exciton is constant along the circumference. So it is reasonable to assume that the radius is so small that the system stays in the ground state of $-\partial_Y^2$, where $n = 0$ and the density of probability is constant along the circumference. (Note that this has been rigorously proved in [CDR]). As a consequence, we can approximate the eigenfunctions ψ of H as:

$$\psi(x, y, Y) = \phi(x, y) \cdot \chi_0^r(Y) = \phi(x, y) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi r}}.$$

After this restriction to the lowest transverse mode, we only have to study the following operator:

$$\widetilde{H}^r = -\frac{1}{\mu}\partial_x^2 - \frac{1}{\mu}\partial_y^2 - 2V^r(x, y),$$

which is two dimensional and acts on $L^2(\mathcal{C}_r)$.

2.2 An effective one dimensional operator for the low lying spectrum

It will turn out that the limit $r \to 0$ is too singular and $\widetilde{H}^r$ does not have a "nice" limit. It is suitable at this point to introduce the quadratic form associated to $\widetilde{H}^r$, defined on the Sobolev space $\mathcal{H}^1(\mathcal{C}_r)$:

$$t_{\widetilde{H}}(\psi, \phi) = \frac{1}{\mu}\langle\partial_x\psi, \partial_x\phi\rangle + \frac{1}{\mu}\langle\partial_y\psi, \partial_y\phi\rangle - 2\langle\sqrt{V^r(x, y)}\psi, \sqrt{V^r(x, y)}\phi\rangle.$$

Reasoning as in the previous subsection, a good approximation of the behavior of eigenfunctions along the transverse variable when the radius is small is given by the ground state of the free Laplacian with periodic boundary conditions. If we restrict the above quadratic form to functions of the type:

$$\phi(x,y) = \varphi(x) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi r}}, \tag{2.3}$$

we have:

$$\begin{aligned} t_{\widetilde{H}}(\phi,\phi) &= \frac{1}{2\pi r\mu}\langle \partial_x\varphi, \partial_x\varphi\rangle - \frac{1}{\pi r}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\pi r}^{\pi r} \frac{1}{\sqrt{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}}\varphi(x)\overline{\varphi}(x)dydx \\ &= \frac{1}{\mu}\int_{-\infty}^{\infty} \overline{(\partial_x\varphi)}(x)(\partial_x\varphi)(x)dx - 2\int_{-\infty}^{\infty} V^r_{\text{eff}}(x)\varphi(x)\overline{\varphi}(x)dx \end{aligned}$$

where

$$V^r_{\text{eff}}(x) = \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} \frac{1}{\sqrt{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}}dy.$$

For the sake of simplicity, we will put $\mu = 1$. Let us introduce what will be our effective one-dimensional comparison operator:

$$H^r_{\text{eff}} := -\frac{d^2}{dx^2} - 2V^r_{\text{eff}}(x). \tag{2.4}$$

We now have reduced our problem of two particles on a cylinder to a one dimensional problem describing a particle interacting with an external potential. A complete and detailed mathematical justification of these steps can be found in [CDR].

2.3 The one dimensional Coulomb Hamiltonian

2.3.1 Approximation of H^r_{eff}

We now try to approximate as accurate as possible the eigenfunctions and eigenvalues of H^r_{eff} when the radius is small. Using the notation $Y_r(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2+4r^2}}$, it was shown in [CDR] that if $r \leq 1$ and f, g are two smooth functions

$$\langle f, V^r_{\text{eff}} g\rangle = \langle f, Y_r g\rangle + \ln(4) f(0)\overline{g(0)} + O(r^{4/9})||f||_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}||g||_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}. \tag{2.5}$$

One can recognize in Y_r a form of the regularized one dimensional Coulomb potential. In the following, our approach will be quite similar to the one of Loudon [L] in the sense that we let the regularizing parameter tend to zero. Note though that our parameter has a clear physical interpretation being given by the radius of the nanotube, and it is not just an artifact as in Loudon's case. Hence this will give us the exciton energies as functions of r, and allow us to estimate the errors we make using this approximation.

Define the quadratic form $C_0(.,.)$ by[1]

$$\begin{aligned} C_0(f,f) &:= -\int_0^{\infty} \ln(x)\cdot(|f|^2)'(x)dx + \int_{-\infty}^{0} \ln(-x)\cdot(|f|^2)'(x)dx \\ &= \int_{-\varepsilon}^{0} \ln(-x)\cdot(|f|^2)'(x)dx - \int_0^{\varepsilon} \ln(x)\cdot(|f|^2)'(x)dx \\ &\quad + \ln(\varepsilon)\left(|f(\varepsilon)|^2 + |f(-\varepsilon)|^2\right) + \int_{\mathbb{R}\setminus[-\varepsilon,\varepsilon]} \frac{1}{|x|}\cdot|f(x)|^2dx. \end{aligned} \tag{2.6}$$

[1] Notice that this definition of C_0 differs from the one of [CDR] in which there is an additional term: $2\ln 2|f(0)|^2 = \int_{-\infty}^0 \ln 2\cdot(|f|^2)'(x)dx + \int_0^{\infty}\ln 2\cdot(|f|^2)'(x)dx$. This term is here put together with the other term depending on the function at zero.

Note the last equality is obtained by an integration by parts, and holds for all $\varepsilon > 0$; also note the appearance of a Coulomb potential in one dimension. Again from [CDR] we have

$$\langle f, Y_r g\rangle = -2\ln(r) f(0)\overline{g(0)} + C_0(f,g) + O(r^{4/9})||f||_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}||g||_{\mathcal{H}^1(\mathbb{R})}. \tag{2.7}$$

Now let us define a new "potential" via a quadratic form

$$\langle f, V_C g\rangle := -2\ln(\frac{r}{2}) f(0)\overline{g(0)} + C_0(f,g),$$

which is close to V_{eff}^r when r is small and is exactly the Coulomb potential when we look away from the origin. We will see in the following that this particular potential gives a solvable eigenvalue problem for the associated Hamiltonian.

2.3.2 Boundary conditions of the Coulomb Hamiltonian

The operator H_C we will now consider is given by its associated quadratic form defined on $\mathcal{H}^1(\mathbb{R})$:

$$t_C(\psi,\phi) := \int_{\mathbb{R}} \overline{\phi'(x)}\psi'(x)dx + 2\left(2\ln(\frac{r}{2})\overline{\phi(0)}\psi(0) - C_0(\phi,\psi)\right).$$

One can recognize the kinetic energy in the first term and the potential V_C in the second term. The general theory of closed symmetric quadratic forms gives us the existence of an associated operator H_C defined by

$$t_C(\phi,\psi) = \langle \phi, H_C\psi\rangle, \tag{2.8}$$

whenever ψ is in the domain of H_C. The difficulty here is that V_C is not a usual Schrödinger-type multiplication potential, but due to various Sobolev embeddings it turns out that if ψ is in the domain of H_C then ψ'' is square integrable outside the origin, and we still have:

$$(H_C\psi)(x) = -\psi''(x) - \frac{2\psi(x)}{|x|}, \quad x \neq 0. \tag{2.9}$$

Now if ψ is an eigenfunction of H_C corresponding to an energy E, then it obeys the differential equation:

$$-\psi''(x) - \frac{2\psi(x)}{|x|} = E\psi(x), \quad x \neq 0. \tag{2.10}$$

In order to get the behavior at the origin of the eigenfunctions of H_C, we integrate by parts and use (2.10). For $\varepsilon > 0$ we have:

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}} \overline{\phi'(x)}\psi'(x)dx \\ &= \overline{\phi(-\varepsilon)}\psi'(-\varepsilon) - \int_{-\infty}^{-\varepsilon} \overline{\phi(x)}\psi''(x)dx - \overline{\phi(\varepsilon)}\psi'(\varepsilon) - \int_{\varepsilon}^{\infty} \overline{\phi(x)}\psi''(x)dx \\ &+ \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \overline{\phi'(x)}\psi'(x)dx \end{aligned} \tag{2.11}$$

where the last integral will converge to zero as ε goes to zero. On the other hand,

$$\begin{aligned} C_0(\phi,\psi) &= \int_{-\varepsilon}^{0} \ln(-x)\cdot(d_x(\overline{\phi}\psi))(x)dx - \int_0^{\varepsilon} \ln(x)\cdot(d_x(\overline{\phi}\psi))(x)dx \\ &+ \ln(\varepsilon)\left(\overline{\phi(\varepsilon)}\psi(\varepsilon) + \overline{\phi(-\varepsilon)}\psi(-\varepsilon)\right) + \int_{\mathbb{R}\setminus[-\varepsilon,\varepsilon]} \frac{1}{|x|}\cdot\overline{\phi(x)}\psi(x)dx. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Then adding (2.11) with (2.12), using (2.10) and letting ε tend to zero (see [CDR] for technical details) we have:

$$\lim_{\varepsilon\to 0} t_C(\phi,\psi) = \langle \phi, E\psi\rangle + 2\lim_{\varepsilon\to 0}\overline{\phi(0)}\left[\frac{\psi'(-\varepsilon)-\psi'(\varepsilon)}{2} + 2\ln(\frac{r}{2})\psi(0) - \ln(\varepsilon)\left(2\psi(0)\right)\right].$$

Now using (2.8) and the eigenvalue equation $H_C\psi = E\psi$ we get the boundary condition:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{\psi'(-\varepsilon)-\psi'(\varepsilon)}{2} + 2\ln(\frac{r}{2})\psi(0) - 2\ln(\varepsilon)\psi(0)\right] = 0. \tag{2.13}$$

2.4 Eigenvalues and eigenfunctions

We now have to solve the equation

$$-\partial_x^2\psi - \frac{2}{|x|}\psi = E\psi, \qquad x \neq 0, \tag{2.14}$$

with the boundary condition (2.13). Similarly to Loudon in [L], we introduce a dimensionless quantity α and the change of variables

$$E = -\frac{1}{\alpha^2} \text{ and } x = \frac{\alpha}{2}z, \tag{2.15}$$

then we obtain

$$\frac{d^2}{dz^2}\widetilde{\psi} - \frac{1}{4}\widetilde{\psi} + \frac{\alpha}{|z|}\widetilde{\psi} = 0, \qquad z \neq 0. \tag{2.16}$$

The solutions are known for $z > 0$ and $z < 0$, see [AS, chap. 13] for example. The second thing is to see what condition at $z = 0$ should the eigenfunctions $\widetilde{\psi}$ obey. If we scale (2.13),

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{\widetilde{\psi}'(-\varepsilon)-\widetilde{\psi}'(\varepsilon)}{2} + \alpha(\ln r - \ln(\alpha\varepsilon))\widetilde{\psi}(0)\right] = 0. \tag{2.17}$$

We only give here the results. Details of calculations can be found in [CDR]. If we take the only square integrable solution, we have two cases: If $\alpha = N$ is a positive integer, then the eigenstates are the odd functions $\widetilde{\psi}_{n_\alpha p}$ with associated eigenvalues $E_{n_\alpha p}$, where $n_\alpha = N + 1$,

$$\widetilde{\psi}_{n_\alpha p}(z) = e^{-\frac{1}{2}|z|}z\frac{1}{\sqrt{2N}}L^1_{N-1}(|z|), \qquad E_{n_\alpha p} = -\frac{1}{N^2},$$

where L^1_{N-1} is an associated Laguerre polynomial. Notice that these energies are independent of the radius of the tube. If α is not an integer, the eigenstates are the even functions $\widetilde{\psi}_{n_\alpha s}$ with associated eigenvalues $E_{n_\alpha s}$, where n_α is the smallest integer larger than α and:

$$\widetilde{\psi}_{n_\alpha s} = C_\alpha W_{\alpha,\frac{1}{2}}(|z|) = C_\alpha|z|e^{-\frac{1}{2}|z|}U(1-\alpha, 2, |z|) \qquad E_{n_\alpha s} = -\frac{1}{\alpha^2},$$

where C_α is a normalizing constant, W is the Whittaker function and U is the confluent hypergeometric function or Kummer function of the second kind. We denote with $\Gamma(z)$ and $\Psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ the usual gamma and digamma functions, and we get from (2.17) that for even solutions α must satisfy the relation:

$$\Psi(1-\alpha) + 2\gamma + \frac{1}{2\alpha} - \ln\alpha + \ln r = 0. \tag{2.18}$$

From this relation, which contains an implicit expression for $\alpha(r)$, one can deduce several important facts. For all integers N and for α in between N and $N + 1$, there is only one solution of (2.16) satisfying the boundary condition. Furthermore, the energies associated with the non integer α tend to their closest lower integer when r tends to zero. A special case is the one of the ground state E_{1s} of the exciton which tends to minus infinity as the radius tends to zero. The behavior for small r is

$$E_{1s} \overset{r\to 0}{=} -4(\ln r)^2.$$

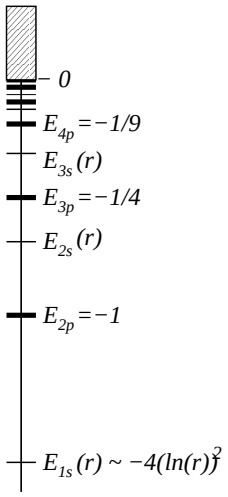

Figure 1: Energy of the bound states of the exciton. Energies are expressed in multiples of the effective Rydberg of the exciton.

Notice that equation (2.18) is exactly what one gets by explicitly calculating the condition requiring the derivative of even states to vanish at the origin, relation (3.22) in Loudon's paper, and replacing his parameter a by $r \cdot a_0/2$, for small r. We can also compare with the result from [BGEH] where Banyai et al. found numerically $a = 0.3a_0 \cdot r$ for the exciton problem in a quantum wire of radius r. The energies associated to the exciton are drawn on figure 1 and we calculated numerically the lowest four eigenvalues with respect to the radius on figure 3, along with a comparison of the ground state given by the variational method of [P1]. On figure 4 a zoom was made around the first and second excited states.

One can notice that the odd states possess a constant energy, independent of the radius. This is due to the fact that the odd states vanish at zero where there is the singularity of the potential. Indeed, the potential becomes, for an odd function f:

$$\langle f, V^r_{\text{eff}} f\rangle \simeq C_0(f, f),$$

which is independent of r.

3 Variational approach and comparison

The variational method operates by minimizing the energy of a trial function and is therefore usually applied to approximate the ground state. However, by restricting the trial function to forms that are orthogonal to the ground state, low lying excited states can be obtained variationally as well. In Ref. [P1], the variational method was applied to the ground state and in Ref. [P3] a similar approach was applied to calculate the $2p$ oscillator strength of interest for two-photon absorption. The $2p$ state is especially important because this state is used for excitation in two-photon fluorescence measurements [W]. By recording the energy of photons emitted from the lowest ($1s$) exciton, a direct measure of the $2p - 1s$ energy difference is obtained. In turn, the $1s$ exciton binding energy (i.e the 1s excitation energy measured relative to the band gap) can be derived if a reliable model for the exciton energy spectrum is invoked.

In the present work, we wish to compare results of the relatively complicated variational approach to the straight-forward and analytical Coulomb model. Hence, in the following we briefly explain the reasoning behind our variational estimate of the lowest excited ($2p$) state. In practical applications, the trial function must be sufficiently simple that calculation of the energy is manageable. This implies that relatively few adjustable parameters should be considered. At

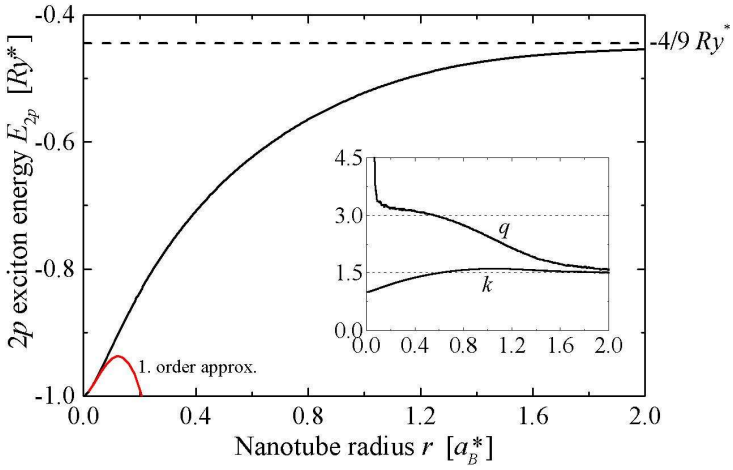

Figure 2: Variational $2p$ state energy as a function of nanotube radius. Inset: the r-dependence of decay lengths k and q of the trial wave function.

the same time, a certain flexibility is required to provide reasonable accuracy. A useful strategy consists in constructing trial functions so that they correctly accommodate the known solutions in limiting cases of the general problem. Thus, we are guided by the analytical solution for the plane, i.e. for nanotube radii much larger than the effective Bohr radius. In our units, this state is simply $\varphi_{2p} \propto x \exp\{-2/3(x^2+y^2)^{1/2}\}$. On the other hand, in the extreme 1D limit we expect $\varphi_{2p} \propto x \exp\{-|x|\}$. To accommodate both limits, we consequently suggest the (un-normalized) trial form

$$\varphi_{2p}(x,y) = x \exp\{-(x^2/k^2 + y^2/q^2)^{1/2}\}, \tag{3.1}$$

where q and k are variational parameters to be determined by minimizing the expectation value of the energy . This expectation value is found as $E_{2p} = (K - V)/N$, where K, V and N are the kinetic energy, potential energy and normalization constant, respectively. The integrations are quite cumbersome and only K and N can be obtained in closed form in terms of Struve and modified Bessel functions. The potential energy V is evaluated numerically using Gaussian quadrature.

The minimized energy as a function of radius r is illustrated in Fig. 2. The limiting values are $E_{2p} = -1$ and $E_{2p} = -4/9$ for small and large r, respectively, in agreement with the analytic solutions in these limits. In between these limits, the curve interpolates smoothly between the limiting values and the dominant correction at small r is $-8(1+\gamma+\ln(r))r^2$.

In order to judge the usefulness of the different approaches used in the present work it is essential to determine the appropriate nanotube radius r in excitonic units, i.e. in units of a_B^*. An important point in this respect is that, in fact, a_B^* varies between different nanotubes. The relation needed for conversion is $a_B^* = 0.529\text{Å}\varepsilon/\mu$, where ε is the dielectric constant screening the Coulomb interaction and μ is the reduced effective mass. Whereas ε may be assumed the same for all nanotubes, μ must be derived from the curvature of the band structure and, hence, depends on both radius and chirality of the nanotube. However, detailed studies [P2] show that a_B^* is roughly proportional to the nanotube diameter and as a consequence r (in units of a_B^*) is nearly constant and given by $r \approx 0.1a_B^*$ if $\varepsilon \approx 3.5$. It should be noted, though, that in media with little screening a larger r/a_B^* is expected. The smallness of r means that approximations based on expansion around $r = 0$ are expected to be accurate.

In figure 3 and 4, a comparison of variational energies and the results of the Coulomb model is given. In both the $1s$ and $2p$ cases, reasonable agreement between the two approaches is found

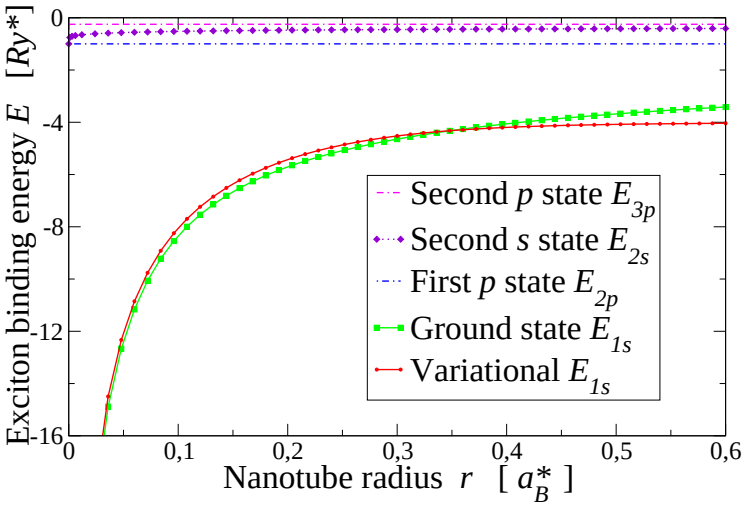

Figure 3: Energy of the four lowest bound states of the exciton with respect to the radius. Even states were calculated numerically using (2.18). Notice that the energy of the second s state is equal to the one of the first p state at zero. In red: graph of the ground state computed with the variational method on the cylinder from [P1].

around $r \approx 0.1a_B^*$. Also, in both cases, the variational result lies slightly higher than the Coulomb model. The ground state has deviated by more than 100% from the plane value for radii around $0.1a_B^*$. An error of less than 5% is seen between the curves at this point. Note that if the curve from the Coulomb model is lower in energy than the variational one, this does not means that the approximation is better. Although in the variational approach the lower is the better since the exact solution is always below the variational result, in the Coulomb model the exact value is somewhere around the approximation, bounded by an error bound. In this work the error bound was not calculated because, unfortunately, the compromises made to get a simple formula implied a difficult calculus to optimize on the bound, even by numerical computations. For the first excited state, the Coulomb model approximation for the energy is independent of the radius of the tube. This must be a good approximation for very small radii. However, this approximation becomes increasingly inaccurate as the radius increases, as the exact value should tend to the energy of the problem on the plane with energy equal to $-4/9a_B^*$ as do the variational curve.

4 Conclusion

The Coulomb model applied to excitons in carbon nanotubes demonstrates that the energy associated with each even state decreases to the energy of its closest odd state as the radius tends to zero. Since each odd state energy is independent of the size of the tube in this approach, all energies associated to excited states stay in the range $(-1, 0)$ (in effective Rydberg energy units). So only the ground state diverges when the radius gets smaller. This is confirmed by the behavior of the first variational excited state which converges to -1. The simple exciton model proposed in this paper and studied both by means of rigorous perturbation theory and by a variational approach is a good starting point for attacking the difficult problem of electron-electron interactions in low dimensional structures such as carbon nanotubes.

5 Acknowledgments.

H.C. acknowledges support from the Danish F.N.U. grant *Mathematical Physics and Partial Differential Equations*.

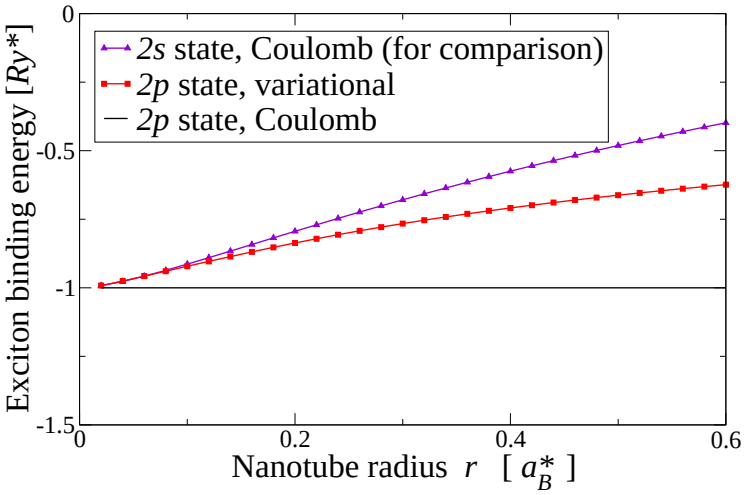

Figure 4: Zoom around the energy of the $2p$ state showing both variational and Coulomb model results. In addition, the $2s$ state obtained with Coulomb model is included for comparison.

References

[Sc02] S. M. Bachilo, M. S. Strano, C. Kittrell, R. H. Hauge, R. E. Smalley, R. B. Weisman, Structure-Assigned Optical Spectra of Single-Walled Carbon Nanotubes, Science, 298 (2002).

[W] F. Wang *et al.*, The Optical Resonances in Carbon Nanotubes Arise from Excitons, Science **308** nr. 5723, 838 - 841 (2005).

[MPR] J. Maultzsch, R. Pomraenke, S. Reich, E. Chang, D. Prezzi, A. Ruini, E. Molinari, M. S. Strano, C. Thomsen and C. Lienau, Exciton binding energies in carbon nanotubes from two-photon photoluminescence, Phys. Rev. B **72**, 241402(R), (2005).

[CBRM] E. Chang, G. Bussi, A. Ruini, E. Molinari, First principles approach for the calculation of optical properties of one-dimensional systems with helical symmetry: the case of carbon nanotubes, Phys. Rev. B **72**, 195423 (2005).

[HK] H. Haug, S. W. Koch, Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors, World Scientific.

[R] B. Ricaud, PhD thesis, in preparation.

[P1] T. G. Pedersen, Variational approach to excitons in carbon nanotubes. Phys. Rev. B **67**, 073401 (2003).

[P2] T. G. Pedersen, Exciton effects in carbon nanotubes, Carbon **42**, 1007-1010 (2004).

[P3] T. G. Pedersen, A. G. Silva, K. Pedersen, Excitonic two-photon absorption in carbon nanotubes, submitted.

[CDR] H.D. Cornean, P. Duclos, B. Ricaud, Effective models for excitons in carbon nanotubes, Ann. Henri Poincaré **8** nr.1, 135-163 (2007)

[L] R. Loudon, One-dimensional hydrogen atom, Amer. J. Phys. **27**, 649-655 (1959).

[AS] Abramowitz M., Stegun I. A., Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, Dover, New York, 1964.

[LTL] Z.M. Li, Z.K. Tang, H.J. Liu, N. Wang, C.T. Chan, R. Saito, S. Okada, G.D. Li, J.S. Chen, N. Nagasawa, S. Tsuda, Polarized Absorption Spectra of Single Walled 4Å Carbon Nanotubes Aligned in Channels of an $AlPO_4$-5 Single Crystal, Phys. Rev. Lett. **87**, 127401 (2001).

[BGEH] L. Banyai, I. Galbraith, C. Ell, H. Haug, Excitons and biexcitons in semiconductor quantum wires, Phys. Rev. B **36**, 6099 (1987)

[OT] T. Ogawa, T. Takagahara, Optical absorption and Sommerfeld factors of one-dimensional semiconductors: An exact treatment of excitonic effects, Phys. Rev. B **44**, 8138 (1991).

Conclusion

Résumé

Une approche rigoureuse pour le calcul du spectre d'absorption optique des nanotubes semi-conducteurs a été faite. Le nanotube a été modélisé par un système à grand nombre N d'électrons évoluants à la surface d'un tore de longueur L où est présent un potentiel périodique lisse dû aux atomes. Les électrons intéragissent faiblement entre eux via un potentiel périodique approchant le potentiel de Coulomb sur le cylindre infini quand L grandit. Il a été expliqué au chapitre 1 comment le problème peut être réduit à un problème unidimensionnel en utilisant le fait que les nanotubes possèdent une rayon très petit et avec l'aide de la théorie de perturbation. Le modèle sur le cercle ainsi obtenu est décrit par un Hamiltonien avec potentiel périodique lisse et un potentiel effectif entre électrons divergeant comme un logarithme en zéro et avec un comportement coulombien à l'infini.

L'action de la lumière sur le nanotube est ensuite étudiée au chapitres 2 et 3 et est vue comme une petite perturbation appliquée au système unidimensionnel. Ceci permet d'obtenir la réponse linéaire du système à la pertubation. La lumière est décrite par une champ électromagnétique classique allumé quasi-adiabatiquement. La formule du spectre d'absorption optique est reliée à la conductivité du matériau, et cette dernière quantité est estimée à la manière que Kubo. La matrice densité, solution de l'équation de Liouville pour le système sur la ligne avec interactions entre électrons, est introduite. Son existence et unicité est montrée. Elle est ensuite exprimée perturbativement en puissance de F_0, l'amplitude des oscillations du champ électromagnétique, jusqu'à l'ordre linéaire. Après avoir utilisé la supposition que le matériau est à basse température, une première formule pour le spectre d'absorption est obtenue. Cette formule est fonction des valeurs propres et vecteurs propres du système à N électrons avec interactions entre eux, décrit par l'Hamiltonien unidimensionnel du chapitre 1.

Au chapitre 4, le système avec intéractions entre électrons est analysé afin d'obtenir l'expression de certains de ses états propres. L'Hamiltonien est exprimé dans le sous-espace de Fock anti-symétrique à N particules avec comme base celle engendrée par les vecteurs propres du système sans intéraction entre électrons. Ceci est une idée originellement proposée par les physiciens dans [SS] et [Wa]. Par des considérations physiques, l'étude est réduite à un sous-espace : il est supposé qu'il n'y a qu'une bande de conduction et une bande de valence séparés par une lacune non nulle. Il est aussi supposé que l'étude de l'Hamiltonien dans le sous-espace appelé ici sous-espace de l'exciton, engendré par les états de plus basse énergie du système sans interaction, est suffisante pour donner une bonne idée du spectre d'absorption optique. Ceci est une hypothèse que l'on trouve dans les publications physiques [Ma], [Wa], [El]. L'Hamiltonien devient ainsi une matrice hermitienne de dimension $(N+1)$ (le spin n'est pas pris en compte). La théorie de perturbation est ensuite utilisée par deux fois. Pour cela, il est supposé quelques propriétés sur le spectre de l'opérateur final qui sont confirmées au chapitre 6. Premièrement, en utilisant l'interaction faible entre électrons paramétrée par λ, il est montré que le spectre de la matrice peut être approximée par le spectre d'une matrice diagonale par blocs, avec une erreur d'ordre λ^2. Deuxièmement, pour N grand, les états excités de cette dernière matrice agissant

dans $\ell^2(N+1)$ peuvent être à leur tour approximés par les états de l'opérateur H_{exc} agissant dans $L^2(-\pi,\pi)$ avec une erreur d'ordre $1/\sqrt{N}$.

Au chapitre 5, il est montré que les états propres de H_{exc} peuvent être approximés, pour λ petit, par ceux de l'Hamiltonien h_e agissant dans $L^2(\mathbb{R})$ avec une erreur d'ordre $\lambda^{2/9}|\ln\lambda|$. En se servant des résultats de toutes les approximations successives, la formule finale du spectre d'absorption est exprimée en fonction des états propres de h_e.

Au chapitre 6, l'Hamiltonien h_e est comparé à l'Hamiltonien étudié dans [CDR2]. Le rayon du tube étant fixé, et pour N grand, leur spectre est asymptotique quand λ tend vers zéro. Il est déduit une expression analytique pour les valeurs propres et vecteurs propres de h_e, pour λ petit et r fixé. L'influence du rayon est discutée brièvement. Enfin, la validité de l'étude mathématique de [CDR2] est mise à l'épreuve en comparant ses résultats analytiques avec des travaux variationnels faisant référence chez les physiciens : il est observé une concordance des résultats et ceci a donné lieu à la publication [CPR].

Les résultats et leurs limites

D'un côté il existe des études physiques théoriques [El], [Wa] sur le spectre d'absorption de matériaux semi-conducteurs, qui établissent, sous les hypothèses exprimées précédemment, qu'une approximation du spectre d'absorption optique d'une structure à grand nombre de particules peut être obtenue en étudiant uniquement les états propres d'un certain modèle à deux particules appelé "exciton". Ces études ne donnent pas précisément la dépendance du modèle de l'exciton par rapport aux paramètres physiques du système étudié, par exemple le rayon du tube, ni les erreurs commises. De l'autre côté il existe des travaux [P1], [P2], [KCM] étudiant directement un modèle à deux particules sur un tube interagissant avec un potentiel de Coulomb et prenant en compte les caractéristiques du nanotube de carbone. Ces articles donnent des résultat précis, notamment sur la relation entre le rayon du tube et le spectre, mais il n'est pas sûr que leur modèle ait un lien avec le spectre d'absorption. Une étude [A97] tente de relier les deux problèmes mais l'expression finale de l'exciton est assez complexe et ne semble pas permettre un calcul analytique, de plus elle n'établit pas de lien avec les potentiels d'interaction utilisés par Pedersen et Kostov *et al.*.

Le travail présenté ici établit un lien entre les différentes études. Il montre d'abord que le spectre d'absorption pour un nanotube semi-conducteur est lié au spectre d'un Hamiltonien à deux particules (avec centre de masse séparé) sur la ligne interagissant à travers un potentiel effectif dépendant du rayon du tube. Ensuite il est montré que les états propres du modèle étudié par Pedersen sont approximés par le même Hamiltonien unidimensionnel. Ce travail fournit aussi des expressions quasi-analytiques, dépendantes du rayon, pour les valeurs propres et vecteurs propres de l'exciton, non seulement pour l'état fondamental mais aussi pour les états excités.

Mais la présente étude a aussi des limites qu'il est intéressant de discuter. La plus importante concerne la justification de la réduction au sous-espace de l'exciton. On a vu que ce sous-espace ne correspondait pas au sous-espace incluant les états propres de plus basse énergie du spectre de l'Hamiltonien considéré. On ne peut pour l'instant pas justifier cette réduction mathématiquement et l'on a donc admis l'argumentaire physique qui suggèrent que cette réduction donne des informations précises sur le spectre pour un système à basse température. Mais on sait que des systèmes plus complexes que l'exciton, formés de plus de deux quasi-particules, comme les biexcitons, peuvent exister et ces systèmes ont des niveaux d'énergie plus bas que ceux de l'exciton. Ils devraient donc apparaitre dans la formule du spectre d'absorption optique.

Les calculs perturbatifs faits dans cette étude ne comportent pas d'applications numériques et les résultats sont donnés de manière qualitatives. C'est à dire qu'on ne peut pas calculer de barres d'erreurs à partir des résultats ni déterminer le rayon exact pour lequel les approximations ont un sens.

Enfin, la question de la réduction du problème à une dimension faite au chapitre 1 pour des rayons r petits reste en suspend car le comportement du le spectre de l'opérateur limite avec r n'est pas connu.

Perspectives

Un des développements intéressants de ce travail peut être l'étude du biexciton. Pour cela il faut considérer un sous-espace de l'espace de Fock plus grand que celui choisi au chapitre 4. C'est a dire qu'il faut aussi prendre en compte le sous-espace engendré par les fonctions propres non perturbées correspondant à 2 électrons dans la bande de conduction et 2 trous dans la bande de valence. Cette étude n'a jamais été faite et cela permettrait peut être de justifier la réduction au sous-espace de l'exciton, en montrant que les pics d'absorption dus aux biexcitons soit n'existent pas, soit sont beaucoup plus faibles que ceux des excitons. En effet, on sait que le spectre d'absorption ne dépend que du module au carré de la valeur en zéro de la fonction propre de l'exciton. Ceci représente la probabilité que les deux quasi-particules se trouvent au même endroit. Intuitivement, on peut comprendre que l'annihilation d'un exciton est proportionnelle à la probabilité que les deux quasi-particules se trouvent au même endroit. On peut supposer que cela est aussi vrai pour le processus inverse, l'absorption d'un photon créant un exciton, bien que moins évident. Sachant cela, on peut conjecturer que la partie du coefficient d'absorption dépendant des états propres du biexciton sera proportionnelle à la valeur en zéro de la fonction d'onde de ce système, c'est à dire à la probabilité que 2 électrons et 2 trous se trouvent au même endroit. On peut supposer que cette probabilité est assez faible et donc l'amplitude des pics d'absorption correspondants aux niveaux du biexciton seront très faibles et difficilement détectables par les expérimentateurs, bien qu'ils existent. L'étude du biexciton devra confirmer cela.

On doit aussi étudier le comportement du spectre de l'Hamiltonien unidimensionnel par rapport au rayon du tube pour pouvoir définitivement conclure sur la réduction à une dimension.

La généralisation de l'étude à toutes les nanostructures en une dimension comme les nanofils ou les guides d'ondes quantiques est aussi une voie possible. La réduction à une dimension pour ce type de structure est similaire, elle consiste à projeter le système sur les modes propres du Laplacien suivant la direction transverse et à montrer que le spectre de basse énergie est décrit par l'Hamiltonien projeté sur l'état transverse fondamental.

On pourra aussi tenir compte d'un nombre de bande dans le semiconducteur plus importantes que 2. Ceci pourra permettre d'obtenir des résultats plus complexes comme suggéré par le papier [KM].

Un travail avec des résultats plus hypothétiques serait d'essayer d'obtenir la réponse non linéaire du système à la perturbation lumineuse. Il faut montrer que l'on peut développer l'expression de la matrice densité jusqu'a l'ordre 2 de la perturbation electromagnétique mais il n'est pas sûr que ce soit possible pour ce type de perturbation non bornée.

Annexes

Annexe A

Propriétés du potentiel électron-électron

A.1 Potentiel électron-électron sur le cylindre

Soit

$$V_c^r(x,y) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + 4r^2\sin^2(\frac{y}{2r})}}$$

sur le cylindre infini. On remarque d'abord la propriété suivante :

$$V_c^r(x,y) = \frac{1}{r}\frac{1}{\sqrt{(\frac{x}{r})^2 + 4\sin^2(\frac{y}{2r})}} = \frac{1}{r}V_c^1(\frac{x}{r},\frac{y}{r}).$$

La projection en une dimension que l'on appellera ici v_{eff}^r possède aussi cette propriété :

$$\begin{aligned} v_{\text{eff}}^r(x) :=& \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r}\frac{dy}{\sqrt{x^2 + 4r^2\sin^2(\frac{y}{2r})}} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dy}{\sqrt{x^2 + 4r^2\sin^2(\frac{y}{2})}} \\ =& \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dy}{\sqrt{(\frac{x}{r})^2 + 4\sin^2(\frac{y}{2})}} \\ =& \frac{1}{r}v_{\text{eff}}^1(\frac{x}{r}) \end{aligned}$$

La fonction v_{eff}^1 peut être exprimée comme une combinaison de fonctions spéciales :

$$v_{\text{eff}}^1(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dy}{\sqrt{x^2 + 4\sin^2(\frac{y}{2})}} = \frac{2K(-\frac{4}{x^2})}{\pi \mid x \mid} \tag{A.1}$$

où K désigne l'intégrale elliptique complète de première espèce, voir [AS, 17.3.1]. Cette fonction est continue sur $\mathbb{R}\backslash\{0\}$ et v_{eff}^1 est donc localement intégrable en dehors de l'origine. Les comportements asymptotiques de v_{eff}^1 sont :

$$v_{\text{eff}}^1(x) \overset{|x|\to\infty}{=} \frac{1}{\mid x \mid} - \frac{1}{|x|^3} + \mathcal{O}(x^{-5})$$

$$v_{\text{eff}}^1(x) \overset{|x|\to 0}{=} -\frac{\log \mid x \mid}{\pi} + \frac{3\log(2)}{\pi} + \mathcal{O}(x^2|\ln x|)$$

On en conclut que $v^1_{\text{eff}} \in L^2(\mathbb{R})$ and donc $v^r_{\text{eff}} \in L^2(\mathbb{R})$. Le calcul numérique donne,

$$\|v^1_{\text{eff}}\|_2^2 = 3.5143.$$

On peut aussi remarquer que v^1_{eff} est intégrable sur tout intervalle borné de $\mathbb{R}$. Enfin, pour $r > 0$

$$\|v^r_{\text{eff}}\|_2^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\frac{1}{r} v^1_{\text{eff}}(\frac{x}{r})|^2 dx = \frac{1}{r}\|v^1_{\text{eff}}\|_2^2.$$

La transformée de Fourier de v^1_{eff} est :

$$\hat{v}^1_{\text{eff}}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} I_0(|p|) K_0(|p|). \tag{A.2}$$

où I_0 et K_0 sont les fonctions de Bessel modifiées de première et deuxième espèces respectivement, voir [AS, 9.6]. On a aussi pour la dérivée d'après la formule [AS, 9.6.27] :

$$(\hat{v}^1_{\text{eff}})'(p) = \text{sgn}(p)\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(I_1(|p|)K_0(|p|) - I_0(|p|)K_1(|p|)\right). \tag{A.3}$$

On peut calculer les dérivées successives à l'aide de la formule [AS, 9.6.29] et elles s'expriment comme combinaisons de fonctions de Bessel.

On a le comportement asymptotique suivant :

$$\begin{aligned}
&\sqrt{2\pi}\widehat{v}^1_{\text{eff}}(p) \overset{p\to 0}{=} -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\log(|p|) + \sqrt{\frac{2}{\pi}}(-\gamma + \log 2) + \mathcal{O}(p^2 \log|p|),\\
&\sqrt{2\pi}\widehat{v}^1_{\text{eff}}(p) \overset{p\to\infty}{=} \frac{1}{|p|} + \mathcal{O}(\frac{1}{p^2}) \qquad \text{et}\\
&\sup\left\{|\hat{v}^1_{\text{eff}}|,\ |p| \geq 1\right\} < +\infty
\end{aligned}$$

où γ est la constante d'Euler.

On a la propriété suivante :

$$\begin{aligned}
\hat{v}^r_{\text{eff}}(p) &= \int_{\mathbb{R}} e^{-ipx} v^r_{\text{eff}}(x)dx = \int_{\mathbb{R}} e^{-ipx}\frac{1}{r} v^1_{\text{eff}}(\frac{x}{r})dx\\
&= \hat{v}^1_{\text{eff}}(rp).
\end{aligned} \tag{A.4}$$

On va maintenant donner une majoration de $\widehat{v}^1_{\text{eff}}$. Soit f la fonction telle que :

$$\begin{aligned}
f : \mathbb{R} &\to \mathbb{R}\\
f : x &\mapsto C\frac{\log^2(x)+1}{x^2+1} \text{ avec } C \text{ un nombre positif.}
\end{aligned}$$

Alors $|\widehat{v}^1_{\text{eff}}(x)|^2 \leq f(x)\ \forall\ x \in \mathbb{R}$. On le prouve en définissant la fonction $g(x) = \frac{|\widehat{v}^1_{\text{eff}}(x)|^2(x^2+1)}{C\log^2(x)+1}$;

- (i) $g \in C^0(\mathbb{R}^*)$ car les fonctions de Bessel sont continues, la fonction K_0 possède une discontinuité en 0.
- (ii) $\lim\limits_{x\to 0} g(x) = \frac{2}{C\pi}$. Soit $\overline{g}$ l'extension par continuité en 0 de g.
- (iii) $\lim\limits_{x\to\infty} g(x) = 0$

alors $\overline{g}$ est bornée. On trouve par le calcul numérique

$$|\widehat{v}^1_{\text{eff}}(p)|^2 \leq 0.646\frac{\log^2(p)+1}{p^2+1} \quad \forall\ p \in \mathbb{R} \tag{A.5}$$

De même,

$$\exists C_{\text{eff}},\ \forall p \in \mathbb{R} \quad |\widehat{v}^1_{\text{eff}}(p)| \leq C_{\text{eff}}(|\log(|p|| + 1).$$

avec $C_{\text{eff}} \approx 0.803229$.

En utilisant les relations 9.6.7-9 de [AS] on obtient pour p assez petit qu'il existe $C_1, C_2, C_3 > 0$ tel que

$$|(\hat{v}^1_{\text{eff}})'(p)| \leq \frac{C_1}{|p|}, \qquad |(\hat{v}^1_{\text{eff}})''(p)| \leq \frac{C_2}{p^2}, \qquad |(\hat{v}^1_{\text{eff}})'''(p)| \leq \frac{C_3}{|p^3|}. \tag{A.6}$$

On remarque aussi que les dérivées successives de $\hat{v}^1_{\text{eff}}$ s'écrivent avec les combinaisons de termes $I_\mu K_\nu$ avec $\mu, \nu \in \mathbb{N}$ et d'après [AS] la valeur absolue de ces termes est croissante sur $\mathbb{R}^-$, décroissante sur $\mathbb{R}^+$ et ces termes possèdent une singularité à l'origine.

A.2 Potentiel électron-électron sur le tore

On rappelle que

$$V_c^r(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + 4r^2 \sin^2(\frac{y}{2r})}}.$$

On peut proposer deux premières définitions pour la périodisation du potentiel V_c^r qui entrainent des résultats différents. Les deux définitions sont les suivantes : pour $y \neq 0$

$$V_c^{r,L}(x, y) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'} V_c^r(x', y) dx' \frac{2\pi}{L} \tag{A.7}$$

et

$$V_c^{r,L}(x, y) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'} V_c^r(x', y) dx' \frac{2\pi}{L}. \tag{A.8}$$

Il faut faire attention ici au terme $m = 0$ car l'intégrale sur $\mathbb{R}$ de V_c^r n'est pas définie, c'est pourquoi on introduit ces deux définitions.

Le deuxième modèle est en fait l'application de la transformée de Fourier sur le cercle puis de la transformée inverse à V_c^r tronqué. On obtiendra donc un potentiel qui sera V_c^r tronqué périodisé et qui ne possède pas de dérivées continues en $(-L/2)$ et $L/2$. Comme on a besoin dans l'étude que les dérivées soit continues partout, on laissera de coté cette définition.

Le premier modèle semble intéressant mais ce potentiel est singulier quel que soit x si $y = 0$ (voir plus bas). Il possède toujours la singularité en $(0, 0)$, comme V_c^r, mais il y a une singularité nouvelle pour $y = 0$ et tout $x \neq 0$ qui se comporte comme $\ln y$ quand y tend vers zéro. Ceci est un peu gênant et on va préférer la définition de $V_c^{r,L}$ suivante :

$$V_c^{r,L}(x, y) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'} V_c^r(x', y) dx' \frac{2\pi}{L} + \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} V_c^r(x', y) dx' \tag{A.9}$$

où le deuxième terme est le terme $m = 0$ tronqué, qui va tendre vers zéro quand L tend vers l'infini en se comporant comme $\ln(L)/L$. Ce potentiel est périodique en x, et on va voir qu'il se comporte comme V_c^r autour de l'origine et qu'il est continu avec au moins sa deuxième dérivée continue. On va maintenant analyser les modèles (A.7) et (A.9) pour étayer notre argumentaire.

A.2.1 comportement du modèle (A.7)

On va étudier le comportement de l'equation (A.7). Pour tout $y \neq 0$ on peut écrire

$$\begin{aligned}
V_c^{r,L}(x,y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'} V_c^r(x',y)dx' \frac{2\pi}{L} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'} V_c^r(x',y)dx' \frac{2\pi}{L} + \\
&+ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{L/2}^{\infty} 2\cos(\frac{2\pi}{L}mx')V_c^r(x',y)dx' \frac{2\pi}{L} \qquad \text{(A.10)} \\
&=: I_1(x,y) + I_2(x,y) \qquad \text{(A.11)}
\end{aligned}$$

Le terme I_1

On écrit I_1 comme étant :

$$I_1(x,y) = \sum_{m\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'} V_c^r(x',y)dx' \frac{1}{L} - \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} V_c^r(x',y)dx'$$

Le premier terme contient l'application sur V_c^r tronqué de la transformée de Fourier puis de son inverse sur le cercle de longueur L. On a donc par unitarité de la transformée de Fourier que ce terme correspond au potentiel V_c^r tronqué sur le cercle et périodisé. Le deuxième terme peut être calculé et l'on trouve :

$$\begin{aligned}
\int_{-L/2}^{L/2} V_c^r(x',y)dx' &= \int_{-L/2}^{L/2} \frac{1}{\sqrt{x'^2 + 4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}} dx' \\
&= 2\ln(\frac{L}{2} + \sqrt{(\frac{L}{2})^2 + 4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}) - \ln(4r^2\sin^2\frac{y}{2r}).
\end{aligned}$$

On note qu'il y a une singularité logarithmique quand y tend vers zéro. On remarque aussi que pour L tend vers l'infini cette partie se comporte comme $\ln(L)/L$ donc tend vers zéro (sauf pour $y = 0$).

Le terme I_2

On va montrer maintenant que le terme I_2 est borné uniformément en x et y. On réécrit I_2 comme

$$\begin{aligned}
I_2(x,y) &= \frac{1}{L} \sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \int_{L/2}^{\infty} \cos(\frac{2\pi}{L}ms)V_c^r(s,y)ds \\
&= \frac{2}{L} \sum_{m\geq 1} \cos(\frac{2\pi}{L}mx) \int_{L/2}^{\infty} \cos(\frac{2\pi}{L}ms)V_c^r(s,y)ds \\
&=: \frac{2}{L} \sum_{m\geq 1} \cos(\frac{2\pi}{L}mx)J(m,y).
\end{aligned}$$

On va noter par $(V_c^r)'$ la dérivée de V_c^r par rapport à la première variable. En intégrant par parties une première fois :

$$J(m,y) = -\frac{L}{2\pi m} \int_{L/2}^{\infty} \sin(\frac{2\pi}{L}ms)(V_c^r)'(s,y)ds$$

puis une seconde fois :

$$J(m,y) = -\cos(\pi m)\left(\frac{L}{2\pi m}\right)^2 (V_c^r)'(\frac{L}{2},y) - \left(\frac{L}{2\pi m}\right)^2 \int_{L/2}^{\infty} \cos(\frac{2\pi}{L}ms)(V_c^r)''(s,y)ds.$$

On peut majorer le terme ci-dessus par

$$|J(m,y)| \leq \left(\frac{L}{2\pi m}\right)^2 |(V_c^r)'(\frac{L}{2},y)| + \left(\frac{L}{2\pi m}\right)^2 \int_{L/2}^{\infty} |(V_c^r)''(s,y)|ds$$

On a

$$(V_c^r)'(x,y) = \frac{-x}{(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^{3/2}} \tag{A.12}$$

et

$$\begin{aligned}(V_c^r)''(x,y) &= \frac{3x^2}{(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^{5/2}} - \frac{1}{(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^{3/2}} \\ &= \frac{1}{(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^{3/2}} \frac{2x^2-4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}\end{aligned} \tag{A.13}$$

et on remarque que $(V_c^r)''(x,y) \geq 0$ pour tout $x \geq 2r$ et pour tout y, on peut donc écrire pour $L \geq 4r$

$$\begin{aligned}|J(m,y)| &\leq \left(\frac{L}{2\pi m}\right)^2 |(V_c^r)'(\frac{L}{2},y)| + \left(\frac{L}{2\pi m}\right)^2 \int_{L/2}^{\infty} (V_c^r)''(s,y)ds \\ &\leq 2\left(\frac{L}{2\pi m}\right)^2 |(V_c^r)'(\frac{L}{2},y)|\end{aligned}$$

La fonction $J(\cdot,y)$ est donc sommable en m quel que soit $y \in [-\pi r, \pi r)$ et le terme I_2

$$I_2(x,y) = -2L\sum_{m\geq 1} \frac{\cos(\frac{2\pi}{L}mx)}{(2\pi m)^2}\left(\cos(\pi m)(V_c^r)'(\frac{L}{2},y) + \int_{L/2}^{\infty}\cos(\frac{2\pi}{L}ms)(V_c^r)''(s,y)ds\right) \tag{A.14}$$

est majoré uniformément en x et y par une constante. En effet,

$$|I_2(x,y)| \leq \frac{L}{6}|(V_c^r)'(\frac{L}{2},y)|. \tag{A.15}$$

On peux noter que $(V_c^r)'$ se comporte comme $1/L^2$ quand L tend vers l'infini et donc I_2 tend vers zéro quand L tend vers l'infini.

A.2.2 comportement du modèle (A.9)

On écrit ce modèle comme suit :

$$\begin{aligned}V_c^{r,L}(x,y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'}V_c^r(x',y)dx'\frac{2\pi}{L} + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{L/2}^{\infty} 2\cos(\frac{2\pi}{L}mx')V_c^r(x',y)dx'\frac{2\pi}{L} \qquad \text{(A.16)} \\ &=: M_1(x,y) + M_2(x,y) \qquad \text{(A.17)}\end{aligned}$$

Le premier terme, M_1, contient l'application sur V_c^r tronqué de la transformée de Fourier puis de son inverse sur le cercle de longueur L. On a donc par unitarité de la transformée de Fourier que ce terme correspond au potentiel V_c^r tronqué sur le cercle et périodisé. On vient de voir dans l'étude du modèle (A.7) que le terme $M_2 = I_2$ est borné uniformément en x, y, il n'apporte donc pas de singularité supplémentaire et au contraire il va permettre au potentiel périodisé d'être dérivable aux points $(-L/2)$ et $L/2$.

Dérivabilité

Lemme A.2.1. *Pour tout $r > 0, L > 1$, $y \neq 0$, la fonction $V_c^{r,L}(\cdot, y)$ possède une dérivée continue, négative.*

Démonstration. on a pour $y \neq 0$

$$V_c^{r,L}(x,y) = \frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}V_c^r(s,y)ds+ \\ + \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}V_c^r(s,y)ds \tag{A.18}$$

Comme V_c^r, $(V_c^r)'$ et $(V_c^r)''$ sont nulles à l'infini, d'après les relations (A.12) et (A.13), on integre le premier terme par parties deux fois :

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}V_c^r(s,y)ds = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}L^2}{(2\pi m)^2}(V_c^r)''(s,y)ds$$

On a aussi

$$(V_c^r)'''(x,y) = (V_c^r)''(x,y)\frac{2x^2-4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}} + (V_c^r)'(x,y)\frac{24xr^2\sin^2\frac{y}{2r}}{(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^2}$$

et

$$(V_c^r)^{(4)}(x,y) =(V_c^r)'''(x,y)\frac{2x^2-4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}{x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}} + 2(V_c^r)''(x,y)\frac{24xr^2\sin^2\frac{y}{2r}}{(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^2}+ \\ + (V_c^r)'(x,y)\frac{24r^2\sin^2\frac{y}{2r}\left(-2x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}\right)\left(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r}\right)}{(x^2+4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^4}$$

qui sont nulles à l'infini, et qui sont intégrables : pour $y \neq 0$ $(V_c^r)'''(\cdot,y)$ et $(V_c^r)^{(4)}(\cdot,y)$ se comportent comme $1/x^3$ à l'infini. Ce qui permet d'écrire

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}V_c^r(s,y)ds = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}L^3}{(-i2\pi m)^3}(V_c^r)'''(s,y)ds = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}L^4}{(2\pi m)^4}(V_c^r)^{(4)}(s,y)ds$$

et donc on a d'une part

$$(V_c^{r,L})'(x,y) = \frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*}\frac{2i\pi m}{L}e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}V_c^r(s,y)ds \\ = -\frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*}(\frac{L}{2\pi m})^2 e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}(V_c^r)'''(s,y)ds \tag{A.19}$$

qui est négative car $(V_c^r)'''(\cdot,y) \geq 0$ et d'autre part

$$(V_c^{r,L})''(x,y) = -\frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*}(\frac{2\pi m}{L})^2 e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}V_c^r(s,y)ds \\ = -\frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*}(\frac{L}{2\pi m})^2 e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}(V_c^r)^{(4)}(s,y)ds \tag{A.20}$$

que l'on peut majorer par

$$|(V_c^{r,L})''(x,y)| \leq -\frac{1}{L}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*}(\frac{L}{2\pi m})^2\int_0^{\infty} 2|(V_c^r)^{(4)}(s,y)|ds < \infty \tag{A.21}$$

qui montre que $(V_c^{r,L})''$ existe pour tout x. □

Positivité

Lemme A.2.2. *$\forall x \in \mathbb{R}, y \in [-\pi r, \pi r)$, $r > 0$ et $L > 0$, $V_c^{r,L}(x,y) \geq 0$.*

Démonstration. On a vu en (A.15) que l'on avait l'estimation

$$\begin{aligned}|I_2(x,y)| &\leq \frac{L}{6}|(V_c^r)'(\frac{L}{2},y)| = \frac{L}{6}\frac{L}{2}\frac{1}{((\frac{L}{2})^2 + 4r^2\sin^2\frac{y}{2r})^{3/2}} \\ &\leq \frac{1}{3}\frac{1}{\sqrt{(\frac{L}{2})^2 + 4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}}.\end{aligned}$$

D'autre part, comme I_1 est positif et égal a $V_c^{r,L}$ tronqué périodisé en x, son minimum est atteint au point $L/2$ et

$$|I_1(x,y)| \geq V_c^r(\frac{L}{2},y) = \frac{1}{\sqrt{(\frac{L}{2})^2 + 4r^2\sin^2\frac{y}{2r}}}$$

ce qui montre que quel que soit $x \in \mathbb{R}$ et $y \in [-\pi,\pi)$, on a $I_1(x,y) \geq |I_2(x,y)|$ et donc $V_c^{r,L}$ est positif. □

Interversion entre projection et périodisation

On rappelle que v_L a été défini par :

$$v_L(x) = \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x,y)dy$$

avec

$$V_c^{r,L}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'}V_c^r(x',y)dx'\frac{2\pi}{L} + \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} V_c^r(x',y)dx'. \quad \text{(A.22)}$$

On rappelle aussi que

$$v_{\text{eff}}^r(x) = \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^r(x,y)dy$$

et on veux montrer que l'on peut intervertir les sommes et intégrales, c'est à dire :

Lemme A.2.3. *On a la propriété suivante :*

$$v_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m\in\mathbb{Z}^*} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{2\pi}{L}mx'}v_{\text{eff}}^r(x')dx'\frac{2\pi}{L} + \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} v_{\text{eff}}^r(x')dx' \quad \text{(A.23)}$$

Démonstration. On reprend les notations définies en (A.16) :

$$\begin{aligned}v_L(x) &= \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} M_1(x,y)dy + \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} M_2(x,y)dy \\ &=: N_1(x) + N_2(x).\end{aligned}$$

Pour la partie N_1, on a

$$\begin{aligned}N_1(x) &= \frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r}\sum_{m\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}V_c^r(s,y)ds\frac{1}{L}dy \\ &= \sum_{m\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi}{L}ms}\frac{1}{2\pi r}\int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^r(s,y)dyds\frac{1}{L}\end{aligned}$$

car la transformée de Fourier sur LS^1et son inverse sont appliquées. Pour la partie N_2 on va écrire, d'après la relation (A.14),

$$\begin{aligned} M_2(x,y) &= I_2(x,y) \\ &= -2L \sum_{m\geq 1} \frac{\cos(\frac{2\pi}{L}mx)}{(2\pi m)^2} \left(\cos(\pi m)(V_c^r)'(\frac{L}{2},y) + \int_{L/2}^{\infty} \cos(\frac{2\pi}{L}ms)(V_c^r)'(s,y)ds \right). \end{aligned} \tag{A.24}$$

On peut maintenant utiliser le théorème de Fubini pour inverser somme et intégrales car la quantité ci-dessous :

$$\sum_{m\geq 1} \frac{1}{(2\pi m)^2} \left(|(V_c^r)'(\frac{L}{2},y)| + \int_{L/2}^{\infty} |(V_c^r)''(s,y)|ds \right)$$

est bien définie. On écrit

$$\begin{aligned} N_2(x) &= \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} M_2(x,y)dy = \\ &= -2L \sum_{m\geq 1} \frac{\cos(\frac{2\pi}{L}mx)}{(2\pi m)^2} \left(\cos(\pi m) \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} (V_c^r)'(\frac{L}{2},y)dy + \right. \\ &\left. + \int_{L/2}^{\infty} \cos(\frac{2\pi}{L}ms) \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} (V_c^r)''(s,y)dyds \right). \end{aligned}$$

Maintenant, d'après les propriétés de v_{eff}^r (données en annexe A.1), cette fonction est dérivable une infinité de fois en dehors de zéro et on peut échanger dérivées par rapport à x et intégrale par rapport à y et

$$\begin{aligned} N_2(x) &= \\ &= -2L \sum_{m\geq 1} \frac{\cos(\frac{2\pi}{L}mx)}{(2\pi m)^2} \left(\cos(\pi m)(v_{\text{eff}}^r)'(\frac{L}{2}) + \int_{L/2}^{\infty} \cos(\frac{2\pi}{L}ms)(v_{\text{eff}}^r)''(s)ds \right). \end{aligned} \tag{A.25}$$

Ceci nous donne donc le résultat. □

Intégrabilité

Lemme A.2.4. *Pour tout $r > 0, L > 1$, $v_L \in L^2(\mathcal{S}_L)$ et il existe deux constantes numériques $c_1, c_2 > 0$ telles que*

$$\|v_L\|^2_{L^2(\mathcal{S}_L)} \leq \frac{c_1}{r} + c_2.$$

Démonstration. On part de la relation

$$v_L(x) = \frac{1}{2\pi r} \int_{-\pi r}^{\pi r} V_c^{r,L}(x,y)dy$$

et on utilise l'expression de $V_c^{r,L}$ obtenues précédemment en (A.16)

$$V_c^{r,L}(x,y) = V_c^r(x,y) + I_2(x,y), \qquad x \in \mathcal{S}_L$$

et la majoration (A.15)

$$|I_2(x,y)| \leq \frac{L}{6} |(V_c^r)'(\frac{L}{2},y)|.$$

Ceci donne

$$|v_L(x)| \leq |v^r_{\text{eff}}(x)| + \frac{L}{3}\frac{1}{2\pi r}\int_0^{\pi r} |(V^r_c)'(\frac{L}{2}, y)|dy,$$

et d'après A.1 le premier terme est de carré sommable sur $\mathcal{S}_L$, et

$$\int_{-L/2}^{L/2} |v_L(x)|^2 dx \leq \frac{c_1}{r} + \frac{L^2}{3}|(V^r_c)'(\frac{L}{2}, 0)| \leq c_2$$

avec $c_1, c_2 > 0$ indépendants de L □

A.3 Potentiel électron-électron sur le cercle

On va montrer que le potentiel périodisé sur le cercle, définit par la fonction v_L en (1.4) sur $[-L/2, L/2)$, converge au sens de la norme $L^2(\mathbb{R})$ vers le potentiel sur la ligne, noté v^r_{eff}, quand L tend vers l'infini et pour tout $r > 0$.

On introduit χ_L la fonction caractéristique de l'intervalle $(-L/2, L/2)$, on va maintenant montrer la propriété suivante :

Lemme A.3.1.

$$\|v^r_{\text{eff}} - \chi_L v_L\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq o_L(1)$$

Démonstration. On a premièrement

$$\|(1-\chi_L)(v^r_{\text{eff}} - \chi_L v_L)\|_{L^2(\mathbb{R})} = 2\int_L^\infty |v^r_{\text{eff}}(x)|^2 dx$$

et comme $v^r_{\text{eff}} \in L^2(\mathbb{R})$, avec le théorème de convergence dominée, la quatité ci-dessus tend vers zéro quand L tend vers l'infini.

Deuxièmement, on regarde maintenant le comportement dans l'intervalle $(-L, L)$. On désigne par χ_{L^β} la fonction caractéristique de l'intervalle de longueur L^β ,$0 < \beta < 1$, centré en zéro. On peut écrire en utilisant le théorème de convergence dominée

$$\|(1-\chi_{L^\beta})\chi_L(v^r_{\text{eff}} - \chi_L v_L)\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq 2\int_{L^\beta}^L (|v^r_{\text{eff}}(x)|^2 + |v_L(x)|^2)dx \xrightarrow{L\to\infty} 0$$

car ces deux fonctions sont de carré sommable sur $(-L, L)$ et tendent vers zéro sur (L^β, L) quand L tend vers l'infini.

Pour la partie où $|x| \leq L^\beta$

$$\begin{aligned}
\chi_{L^\beta}(x)(v^r_{\text{eff}}(x) - v_L(x)) &= \sum_{|m|\leq L^{1+\beta}} \int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}} \widehat{v}^r_{\text{eff}}(k)e^{ikx}dk - \frac{\sqrt{2\pi}}{L}\sum_{\substack{|m|\leq L^{1+\beta}\\ m\neq 0}} e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m) - \\
&- \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} v^r_{\text{eff}}(s)ds \\
&= \int_0^{\frac{2\pi}{L}} \widehat{v}^r_{\text{eff}}(k)e^{ikx}dk - \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} v^r_{\text{eff}}(s)ds + \\
&+ \sum_{\substack{|m|\leq L^{1+\beta}\\ m\neq 0}} \int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}} \left(\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k)e^{ikx} - e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right)dk. \qquad \text{(A.26)}
\end{aligned}$$

Pour le terme autour de zéro, en utilisant le comportement à l'origine de $\widehat{v}^r_{\text{eff}}$ donné dans l'annexe A.1, il existe $L_0 > 0$ et $C_3 > 0$ tels que pour tout $L \geq L_0$

$$\begin{aligned}|\int_0^{\frac{2\pi}{L}} \widehat{v}^r_{\text{eff}}(k)e^{ikx}dk| &\leq \int_0^{\frac{2\pi}{L}} |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k)|dk = \int_0^{2\pi} |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{k'}{L})|\frac{dk}{L} \\ &\leq \int_0^{2\pi} |C_3 \ln(\frac{k'}{L})|\frac{dk}{L} \leq \frac{|\ln L|}{L}C_4\end{aligned}$$

où C_4 est une constante positive. Le deuxième terme tend aussi vers zéro quand L tend vers l'infini comme $(\ln L)/L$, voir discussion dans la section A.2.1. On étudie maintenant le troisième terme de droite de (A.26). On a

$$\begin{aligned}\left|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k)e^{ikx} - e^{i\frac{2\pi}{L}mx}\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right| &= \left|(\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m))e^{ikx} + (e^{ikx} - e^{i\frac{2\pi}{L}mx})\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right| \\ &\leq |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m))| + |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)(e^{ikx} - e^{i\frac{2\pi}{L}mx})| \quad \text{(A.27)}\end{aligned}$$

On traite d'abord le second terme de droite de la relation ci-dessus. On a d'une part

$$\begin{aligned}&\sum_{0<|m|\leq L^{1+\beta}} \int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}} |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)(e^{ikx} - e^{i\frac{2\pi}{L}mx})|dk \leq \\ &\leq \sum_{0<|m|\leq L^{1+\beta}} \int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}} |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)2\sin((k - \frac{2\pi}{L}m)\frac{x}{2})|dk.\end{aligned}$$

On utilise $|\sin((k - \frac{2\pi}{L}m)\frac{x}{2})| \leq |(k - \frac{2\pi}{L}m)\frac{x}{2}| \leq \frac{2\pi}{L}|\frac{x}{2}|$, et pour chaque $x \neq 0$,

$$\begin{aligned}&\sum_{0<|m|\leq L^{1+\beta}} \int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}} |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)(e^{ikx} - e^{i\frac{2\pi}{L}mx})|dk \leq \\ &\leq \sum_{0<|m|\leq L^{\beta}} |\widehat{v}^r_{\text{eff}}(2\pi m)| \cdot \frac{2\pi}{L} \cdot \frac{2\pi}{L}|x| \leq C_a|\ln(L^\beta)|\frac{2\pi}{L}|x| \quad \text{(A.28)}\end{aligned}$$

où $C_a > 0$, car comme $\widehat{v}^r_{\text{eff}}$ se comporte comme $1/k$ à l'infini, sa série diverge comme un logarithme à l'infini. On va maintenant établir quelques propriétés sur $\widehat{v}^r_{\text{eff}}$, de la même manière qu'au lemme 4.3.9, ce qui va nous permettre de finir la majoration de A.27.

Lemme A.3.2. *Il existe $L_0 > 0$ et deux constantes $C_2 > 0$, $C_3 > 0$ telles que pour tout $L > L_0$, $0 < \alpha < 1$, $m \neq 0$ et $|k - m| \leq \frac{2\pi}{L}$*

i) Si $1 \leq |m| \leq L^{1-\alpha}$:

$$\left|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right| \leq \frac{C_2}{|m|}.$$

ii) Si $L^{1-\alpha} < |m|$:

$$\left|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right| \leq \frac{C_3}{L^{1-\alpha}}.$$

Démonstration. Pour $i)$, on utilise l'hypothèse établissant que pour x assez petit, il existe une constante $C_1 > 0$ telle que $\widehat{v}^r_{\text{eff}}(x) = C_1 \ln|x| + \mathcal{O}(1)$. Ici, comme $1 \leq |m| \leq L^{1-\alpha}$, il existe $L_0 > 0$

tel que pour tout $L \geq L_0$ on a $2\pi m/L$ assez petit et avec $|k - \frac{2\pi}{L}m| < \frac{2\pi}{L}$, k est aussi assez petit pour écrire

$$\begin{aligned}\left|\left(\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right)\right| &= C_1\left|\left(\ln|k| - \ln|\frac{2\pi}{L}m|\right)\right| \\ = C_1\left|\ln|\frac{kL}{2\pi m}|\right| &= C_1\left|\ln|1 + \frac{k - \frac{2\pi}{L}m}{\frac{2\pi}{L}m}|\right|.\end{aligned}$$

Puisque $|k - \frac{2\pi}{L}m| < \frac{2\pi}{L}$, alors $|\frac{Lk-2\pi m}{2\pi m}| < 1$ et on peut écrire :

$$\left|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right| = C_1\left|\ln|1 + \frac{k - \frac{2\pi}{L}m}{\frac{2\pi}{L}m}|\right| \leq C_2\left|\frac{k - \frac{2\pi}{L}m}{\frac{2\pi}{L}m}\right| \leq C_2\frac{1}{|m|},$$

avec $C_2 > 0$.

Pour $ii)$, on utilise que $\widehat{v}^r_{\text{eff}} \in C^1$ en dehors de l'origine. Alors

$$\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) = \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m) + (k - \frac{2\pi}{L}m)(\widehat{v}^r_{\text{eff}})'(\tilde{k})$$

où $\tilde{k} \in \left(\frac{2\pi}{L}m, \frac{2\pi}{L}(m+1)\right)$. Avec l'aide de l'annexe A.1, il existe une constante C_3 telle que $|(\widehat{v}^r_{\text{eff}})'(x)| \leq \frac{C_3}{|x|}$ et

$$\begin{aligned}\left|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m)\right| &\leq \frac{2\pi}{L}\sup_{|k|\in(\frac{2\pi}{L^\alpha},\infty)}|(\widehat{v}^r_{\text{eff}})'(k)| \\ &\leq \frac{2\pi}{L}\frac{L^\alpha}{2\pi}C_3.\end{aligned}$$

□

On peut maintenant finir d'établir la majoration de (A.27). On écrit

$$\begin{aligned}\sum_{1\leq m\leq L^{1+\beta}}\int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}}|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m))|dk \leq &\sum_{1<m\leq L^{1-\alpha}}\int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}}|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m))|dk \\ &+ \sum_{L^{1-\alpha}<m\leq L^{1+\beta}}\int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}}|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m))|dk.\end{aligned}$$

Le premier terme est majoré en utilisant $i)$ du lemme précédent, le deuxième en utilisant $ii)$. Ce qui donne :

$$\begin{aligned}\sum_{1\leq m\leq L^{1+\beta}}\int_{\frac{2\pi m}{L}}^{\frac{2\pi(m+1)}{L}}|\widehat{v}^r_{\text{eff}}(k) - \widehat{v}^r_{\text{eff}}(\frac{2\pi}{L}m))|dk \leq &\frac{C_2}{L}\sum_{1<m\leq L^{1-\alpha}}\frac{1}{m} + \frac{C_3}{L^{1-\alpha}}|L^\beta - \frac{1}{L^\alpha}| \\ \leq &\frac{2\pi C_2}{L}\ln(L^{1-\alpha}) + \frac{C_3}{L}|L^{\beta+\alpha} - 1|.\end{aligned}$$

Pour que le dernier terme tende bien vers zéro quand L tend vers l'infini, on doit choisir $\alpha+\beta < 1$. On choisit $\alpha = 1/5$ et $\beta = 3/5$.

On a donc obtenu :

$$|\chi_{L^\beta}(x)(v^r_{\text{eff}}(x) - v_L(x))| \leq \mathcal{O}(L^{-1/5}). \tag{A.29}$$

Comme on sait que $\widehat{v}^r_{\text{eff}}$ et $\widehat{v}_L$ sont des fonctions $L^2(\mathbb{R})$, on peut majorer (A.29) par une fonction L^2. On utilise le théorème de convergence dominée qui nous donne que

$$\|\chi_{L^\beta}(v^r_{\text{eff}} - v_L(x))\| \overset{L\to\infty}{\to} 0.$$

□

Annexe B

Détail de certains calculs

B.1 Noyau et norme L^2

Ceci est l'adaptation du théorème XI.20 de [RS3] au cas du cercle. Soit $f, g \in L^2(T\mathcal{S}^1)$, alors l'opérateur

$$f(x)g(-i\nabla)$$

est un opérateur Hilbert-Schmidt et sa norme est majorée par :

$$\|f(x)g(-i\nabla)\|_{HS} \leq \frac{1}{T}\|f\|_{L^2}\|g\|_{\ell^2}.$$

On definit la transformée de Fourier de la fonction $f \in L^2(T\mathcal{S}^1)$ sur le cercle de période T par

$$\hat{f}(p) := \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} f(x)e^{-i\frac{2\pi}{T}px}dx$$

et la transformée de Fourier inverse par

$$(\mathcal{F}^{-1}f)(p) := \check{f}(p) := \sum_{p\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{T}px}f(x).$$

On a pour $\psi \in L^2(T\mathcal{S}^1)$

$$\begin{aligned}
(g(-i\nabla)\psi)(x) =& (\mathcal{F}^{-1}(g\hat{\psi}))(x) \\
=& \sum_{p\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{T}px}g(p)\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}\psi(y)e^{-i\frac{2\pi}{T}py}dy \\
=& \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}\sum_{p\in\mathbb{Z}} e^{i\frac{2\pi}{T}p(x-y)}g(p)\psi(y)dy \\
=& \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2}\check{g}(x-y)\psi(y)dy
\end{aligned}$$

et donc l'opérateur $f(x)g(-i\nabla)$ est un opérateur à noyau avec pour noyau $1/Tf(x)\check{g}(x-y)$. La norme Hilbert-schmidt donne

$$\begin{aligned}
\|f(x)g(-i\nabla)\|_{HS}^2 &\leq \frac{1}{T^2}\int_{-T/2}^{T/2}\int_{-T/2}^{T/2}|f(x)\check{g}(x-y)|^2dxdy \\
&\leq \frac{1}{T^2}\int_{-T/2}^{T/2}|f(x)|^2dx\int_{-T/2}^{T/2}|\check{g}(y)|^2dy.
\end{aligned}$$

B.2 Borne relative avec deux potentiels

On a Hilbert space $\mathcal{H}$ let us define the operator H_0 with domain $D(H_0)$ and two symmetric operators V and W, H_0-bounded with relative bound smaller than one. That is for $\psi \in D(H_0)$,

$$\begin{aligned}\|V\psi\| \leq & a_1\|H_0\psi\| + b_1\|\psi\| \\ \|W\psi\| \leq & a_2\|H_0\psi\| + b_2\|\psi\|\end{aligned}$$

with $a_1, a_2 < 1$. Then,

$$\begin{aligned}\|W\psi\| \leq & a_2\|(H_0 + V - V)\psi\| + b_2\|\psi\| \\ \leq & a_2\|(H_0 + V)\psi\| + a_2\|V\psi\| + b_2\|\psi\| \\ \leq & a_2\|(H_0 + V)\psi\| + a_2a_1\|H_0\psi\| + a_2b_1\|\psi\| + b_2\|\psi\| \\ \leq & a_2\sum_{n=0}^{\infty} a_1^n\|(H_0 + V)\psi\| + (a_2b_1\sum_{n=1}^{\infty} a_1^n + b_2)\|\psi\| \\ \leq & a_2\frac{1}{1-a_1}\|(H_0 + V)\psi\| + (a_2b_1\frac{a_1}{1-a_1} + b_2)\|\psi\|.\end{aligned}$$

So W is $(H_0 + V)$-bounded with relative bound smaller than one if

$$a_1 + a_2 < 1.$$

B.3 Résolvente compacte et perturbation bornée

Let H_0 be a self adjoint operator with domain $D(H_0)$ and with compact resolvent. Let V be a symmetric H_0-bounded operator with relative bound smaller than one. Define $H := H_0 + V$, notice that this operator is self adjoint on $D(H_0)$ from Kato-Rellich theorem. Then,

$$(H_0 + V + i)^{-1} = (H_0 + i)^{-1} - (H_0 + i)^{-1}V(H_0 + V + i)^{-1}. \tag{B.1}$$

Let us write :

$$V(H_0 + V + i)^{-1} = V(H_0 + i)^{-1}(H_0 + i)(H_0 + V + i)^{-1}.$$

The sequence $(H_0 + i)(H_0 + V + i)^{-1}$ has domain $\mathcal{H}^N$ and is closed since H_0 and $H_0 + V$ are. So by the closed graph theorem, this is bounded. Since V is H_0-bounded, for all $\phi \in D(H_0)$

$$\|V\phi\| \leq a\|H_0\phi\| + b\|\phi\|$$

If we define $\psi \in \mathcal{H}^N$ such that $\phi = (H_0 + i)^{-1}\psi \in D(H_0)$, then

$$\begin{aligned}\|V(H_0 + i)^{-1}\psi\| \leq & a\|(H_0 + i - i)(H_0 + i)^{-1}\psi\| + b\|(H_0 + i)^{-1}\psi\| \\ \leq & a\|\psi\| + (a + b)\|(H_0 + i)^{-1}\psi\|\end{aligned}$$

which is bounded. Now in equation (B.1), the first term of the rhs is compact and the second term is a compact times a bounded operator and therefore a compact operator.

B.4 Une estimation pour $\|(H - \mu)(H - z)^{-1}\|$

Assume that H is a selfadjoint operator. Introduice the parameters $z \in \rho(H) \cap \mathbb{R}$, $\mu < \inf \sigma(H)$ and define

$$f : \sigma(H) \rightarrow \mathbb{R} \tag{B.2}$$

$$f : x \mapsto f(x) = \frac{|x - \mu|}{|x - z|}. \tag{B.3}$$

With the spectral theorem :

$$\|(H-z)^{-1}(H-\mu)\| = \sup_{x\in\sigma(H)} \frac{x-\mu}{|x-z|}.$$

One has several cases to study :

- If $z \leq \mu$ then $x - z > 0$. $f(x) = \frac{x-\mu}{x-z}$, $f'(x) = \frac{\mu-z}{(x-z)^2} \geq 0$, then $\sup_x f(x) = \lim_{x\to\infty} f(x) = 1$.
- If $z \geq \mu$ and $z < \inf \sigma(H)$, then $x - z > 0$ and $\sup_x f(x) = \lim_{x\to-\infty} f(x) = 1$.
- If $z > \mu$, $z \in]z_-, z_+[$ where z_- is the closest value of the spectrum of H below z and z_+ is the closest value of the spectrum of H above z. If $x \leq z_-$, $f(x) = \frac{x-\mu}{z-x}$, $f'(x) = \frac{z-\mu}{(z-x)^2} > 0$. f is maximum for $x = z_-$, $\sup_x f(x) = f(z_-) = \frac{z_--\mu}{z-z_-}$. If $x \geq z_+$, $f(x) = \frac{x-\mu}{x-z}$, $f'(x) = \frac{\mu-z}{(x-z)^2} < 0$ then $\sup f = f(z_+) = \frac{z_+-\mu}{z_+-z}$. Then for this region,

$$\sup_{x\in\sigma(H)} f(x) = \max\left\{\frac{z_- - z}{z - z_-} + \frac{z-\mu}{z-z_-}, \frac{z_+ - z}{z_+ - z} + \frac{z-\mu}{z_+ - z}\right\},$$

which we can write

$$\sup_{x\in\sigma(H)} f(x) \leq \max\left\{1 + \frac{z-\mu}{z-z_-}, 1 + \frac{z-\mu}{z_+ - z}\right\} = 1 + \frac{z-\mu}{d(z,\sigma(H))}.$$

Finally,

$$\|(H-z)^{-1}(H-\mu)\| \leq \max\left\{1, 1 + \frac{z-\mu}{d(z,\sigma(H))}\right\}$$

B.5 Une estimation de matrice

Soit A et B deux opérateurs bornés agissant sur un espace de Hilbert, on va montrer que

$$\left\|\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^* & B \end{pmatrix}\right\| \leq \|A\| + \|B\|.$$

On peut écrire

$$\begin{aligned}\left\|\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^* & B \end{pmatrix}\right\| &= \sup_{\|(u,v)\|=1} |< \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^* & B \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} >| = \sup_{\|(u,v)\|=1} |(Au,u) + (A^*u,v) + (Bv,v)| \\ &\leq \sup_{\|(u,v)\|=1} 2\|A\|\|u\|\|v\| + \|B\|\|v\|^2 = \sup_{\|(u,v)\|=1} (\|u\|, \|v\|)\begin{pmatrix} 0 & \|A\| \\ \|A\| & \|B\| \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \|u\| \\ \|v\| \end{pmatrix} \\ &\leq \lambda_+\end{aligned}$$

où λ_+ est la plus grande valeur propre de la matrice :

$$\lambda_+ = \frac{\|B\| + \sqrt{\|B\|^2 + 4\|A\|^2}}{2} \leq \|A\| + \|B\|.$$

B.6 Relativement compact et relativement borné

Soit A un opérateur auto-adjoint et B un opérateur symétrique relativement compact à A i.e. : pour tout $z \in \rho(A)$ l'opérateur

$$B(A-z)^{-1}$$

est compact. On va montrer que B est relativement borné à A avec borne relative nulle. Comme $B(A-z)^{-1}$ est compact, il est aussi borné et il existe deux constantes a et b telles que pour $\phi \in D(A)$

$$\|B\phi\| \leq a\|A\phi\| + b\|\phi\|.$$

Nous allons d'abord établir le résultat suivant : si B est relativement borné à A avec borne relative a alors

$$\lim_{n\to\infty} \|B(A+in)^{-1}\| \leq a.$$

En effet, on peut écrire pour $\psi := (A+in)\phi$

$$\|B(A+in)^{-1}\psi\| \leq a\|A(A+in)^{-1}\psi\| + b\|(A+in)^{-1}\psi\|$$

et comme avec le théorème spectral on obtient que $\|A(A+in)^{-1}\| = 1$, ceci implique que

$$\|B(A+in)^{-1}\psi\| \leq a\|\psi\| + \frac{b}{n}\|\psi\|.$$

Si $n \to \infty$ on obtient bien le resultat. Prouvons maintenant que $a = 0$ dans notre cas. Soit $z \in \rho(A)$, on peut écrire :

$$B(A+in)^{-1} = B(A-z)^{-1}(A-z)^{-1}(A+in)^{-1}$$

où l'opérateur $(A-z)^{-1}(A+in)^{-1}$ converge fortement vers zéro quand n tend vers l'infini et comme $B(A-z)^{-1}$ est un opérateur compact, $B(A+in)^{-1}$ converge en norme vers zéro.

B.7 La formule de Krein

Let $\{A(z)\}_{z\in\mathbb{C}}$ be a bounded family of self-adjoint operators on a Hilbert space $\mathcal{H}$ and be such that $A^{-1}(z)$ is analytic for $z \in \rho(A) \subset \mathbb{C}$, since it is self-adjoint we have the property that

$$\lim_{\mathrm{Im}(z)\to\infty} \|A^{-1}(z)\| = 0. \tag{B.4}$$

In the polar decomposition of $A(z) = U(z)|A(z)|$ the operator $U(z)$ is unitary and commutes with $|A(z)|$ since A is self-adjoint. Let $\theta \in \mathcal{H}$ be a vector and define the rank one operator

$$\mathcal{H} \ni f \to V_\theta(f) := \frac{\lambda^2}{z}\theta\langle\theta, f\rangle.$$

We are interested in writing down a convenient formula for the inverse of $A(z) + V_\theta$. For that, note first that V_θ may be written as $V_\theta =: \mathrm{sgn}(z)B_\theta^* B_\theta$, where $B_\theta : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ is given by $B_\theta(f) = \langle\theta, f\rangle\lambda/\sqrt{|z|}$ and $B_\theta^* : \mathbb{C} \to \mathcal{H}$ is given by $B_\theta^*(t) = t\theta\lambda/\sqrt{|z|}$, with $\lambda > 0$, $z \in \mathbb{R}^*$. We can write

$$A(z) + \mathrm{sgn}(z)B_\theta^* B_\theta = U(z)\sqrt{|A(z)|}\left(1 + \mathrm{sgn}(z)U(z)^{-1}\frac{1}{\sqrt{|A(z)|}}B_\theta^* B_\theta\frac{1}{\sqrt{|A(z)|}}\right)\sqrt{|A(z)|}. \tag{B.5}$$

If $\mathrm{Im}(z)$ is large enough, then

$$\||A(z)|^{-1/2}B_\theta^* B_\theta|A(z)|^{-1/2}\| = \|B_\theta|A(z)|^{-1/2}\|^2 \leq \|B_\theta\| \cdot \|A(z)\| < 1$$

and then $A(z)+V_\theta$ is invertible and we can write the Neumann series :

$$\begin{aligned}
&\left(1+\mathrm{sgn}(z)U(z)^{-1}\frac{1}{\sqrt{|A(z)|}}B_\theta^*B_\theta\frac{1}{\sqrt{|A(z)|}}\right)^{-1}\\
&=1+\sum_{n\geq 1}(-\mathrm{sgn}(z))^n\left(U^{-1}(z)|A(z)|^{-1/2}B_\theta^*B_\theta|A(z)|^{-1/2}\right)^n\\
=&1-\mathrm{sgn}(z)U^{-1}(z)|A(z)|^{-1/2}B_\theta^*\sum_{n\geq 0}(-\mathrm{sgn}(z))^n\left(B_\theta A(z)^{-1}B_\theta^*\right)^n B_\theta|A(z)|^{-1/2}\\
=&1-\mathrm{sgn}(z)\frac{1}{1+\mathrm{sgn}(z)\frac{\lambda^2}{|z|}\langle A^{-1}(z)\theta,\theta\rangle}A^{-1}(z)U^{-1}(z)|A(z)|^{-1/2}B_\theta^*B_\theta|A(z)|^{-1/2}. \qquad \text{(B.6)}
\end{aligned}$$

We obtain

$$\begin{aligned}
(A(z)+V_\theta)^{-1}&=A^{-1}(z)-\mathrm{sgn}(z)\frac{1}{1+\mathrm{sgn}(z)\frac{\lambda^2}{|z|}\langle A^{-1}(z)\theta,\theta\rangle}A^{-1}(z)V_\theta A^{-1}(z)\\
&=A^{-1}(z)-\frac{\lambda^2}{z+\lambda^2\langle A^{-1}(z)\theta,\theta\rangle}A^{-1}(z)\theta\theta^*A^{-1}(z) \qquad \text{(B.7)}
\end{aligned}$$

From this formula and using analytic continuation, we see that $(A(z)+V_\theta)^{-1}$ exists for all z where $A(z)^{-1}$ exists and where $z+\langle\theta,A^{-1}(z)\theta\rangle\neq 0$.

Bibliographie

[CDR2] Cornean H., Duclos P., Ricaud B., Effective models for excitons in Carbon Nanotubes, Ann. H. Poincaré 8(2007), 135-163.

[CPR] Cornean H., Pedersen T. G., Ricaud B., Rigourous perturbation theory versus variational methods in the spectral study of carbon nanotubes, arXiv :math-ph/0605014v2, accepted in Contemporary Mathematics.

[CDR] Cornean H., Duclos P., Ricaud B., On Critical Stability of Three Quantum Charges Interacting Through Delta Potentials, Few-Body Systems 38, 125-131 (2006).

[Sc02] S. M. Bachilo, M. S. Strano, C. Kittrell, R. H. Hauge, R. E. Smalley, R. B. Weisman, Structure-Assigned Optical Spactra of Single-Walled Carbon Nanotubes, Science, 298 (2002).

[Sc05] F. Wang *et al.*, The optical Resonances in Carbon Nanotubes Arise from Excitons, Science, 308 (2005).

[PRB05] E. Chang, G. Bussi, A. Ruini, E. Molinari, First principles approach for the calculation of optical properties of one-dimensional systems with helical symmetry : the case of carbon nanotubes, Phys. Rev. B, 72, 195423 (2005).

[PRB05-2] J. Maultzsch, R. Pomraenke, S. Reich, E. Chang, D. Prezzi, A. Ruini, E. Molinari, M. S. Strano, C. Thomsen and C. Lienau, Exciton binding energies in carbon nanotubes from two-photon photoluminescence, Phys. Rev. B 72, 241402(R), (2005).

[Fr] J. Frenkel, Phys. Rev. 37, 17 (1931).

[SS] J. C. Slater, W. S. Shockley, Phys. Rev 50, 705 (1936).

[El] Elliot R. J., Intensity of Optical Absorption by Excitons, Phys. Rev., 108, 6, 1384-1389 (1957).

[P1] T. G. Pedersen, Variational approach to excitons in carbon nanotubes. Phys Rev B, 67, 073401 (2003).

[P2] T. G. Pedersen, Exciton effects in carbon nanotubes, Carbon, 42, 1007-1010 (2004).

[A97] T. Ando, Excitons in Carbon Nanotubes, J. Phys. Soc. Japan, 66, 4, 1066-1073 (1997).

[PRL01] Z.M. Li, Z.K. Tang, H.J. Liu, N. Wang, C.T. Chan, R. Saito, S. Okada, G.D. Li, J.S. Chen, N. Nagasawa, S. Tsuda, Polarized Absorption Spectra of Single-Walled 4 ÅCarbon Nanotubes Aligned in Channels of an $AlPO_4$-5 Single Crystal, Phys. rev. lett. 87, 127401 (2001).

[PRB91] T. Ogawa, T. Takagahara, Optical absorption and Sommerfeld factors of one-dimensional semiconductors : An exact treatment of excitonic effects, Phys. Rev. B, 44, 8138 (1991).

[SDD] R. Saito, G. Dresselhaus and M.S. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, 1998.

[AM] Ashcroft, N. W. and Mermin, N. D., Solid State Physics, Saunders, 1976.

[CDP] Cornean, H.D., Duclos, P., Pedersen, T.G. : One dimensional models of excitons in carbon nanotubes, Few-Body Systems **34** no. 1-3, 155-161 (2003).

[KCM] M.K. Kostov, M. W. Cole, G.D. Mahan, Variational approach to the Coulomb problem on a cylinder, Phys. Rev. B, 66, 075407 (2002).

[PRB95] L. X. Benedict, S. G. Louie, M. L. Cohen, Static polarizabilities of single-wall carbon nanotubes, Phys. Rev. B, 52, 8541 (1995).

[Wa] Wannier G. H., Phys. Rev., 52 (1937).

[Ku57] R. Kubo, Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems, J. Phys. Soc Jpn, 12, 570 (1957).

[AS] Abramowitz M., Stegun I. A., Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, Dover, New York, 1964.

[Ma] Mahan G. D., Many particles physics, second edition, Plenum Press, New York, 1990.

[K51] Tosio Kato, Fundamental Properties of Hamiltonian Operators of Schrodinger Type, Trans. Am. Math. Soc., 70, 2, pp. 195-211 (1951).

[BD] Brummelhuis R., Duclos P., Effective Hamiltonians for atoms in very strong magnetic fields, J. Math. Phys. 47, 032103 (2006).

[OBBG] N. Oelkers, M. T. Batchelor, M. Bortz, X.-W. Guan, Bethe ansatz study of one-dimensional Bose and Fermi gases with periodic and hard wall boundary conditions, J. Phys. A : Math. Gen. 39, 1073-1098 (2006).

[Gi] Girardeau M., Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension, J. Math. Phys. 1, 516 (1960).

[FST] J. Froehlich, U.M. Studer, E. Thiran, Quantum Theory of Large Systems of Non-Relativistic Matter, Part I of lectures presented by J. F. at the 1994 Les Houches Summer School, arxiv :cond-mat/9598962.

[AB] Y. Aharonov, D. Bohm, Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory, Phys. Rev. 115, 3, 485-491 (1959).

[RS2] M. Reed and B. Simon : Methods of modern mathematical physics. II : Fourier analysis, self adjointness, Academic press, 1975.

[RS3] M. Reed and B. Simon : Methods of modern mathematical physics. III : Scattering Theory, Academic press, 1979.

[RS4] M. Reed and B. Simon, Methods of modern mathematical physics IV : Analysis of Operators, Academic Press.

[K] Kato T. : Perturbation theory for linear operators, Springer-Verlag, 1966.

[BR2] Bratteli, O. and Robinson, D. W., Operator Algebras and Quantum Statistical Machanics II : Equilibrium States. Models in Quantum Statistical Mechanics, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York.

[LL3] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Course of Theoretical Physics, Vol. 3, Quantum Mechanics, Pergamon Press, 1977.

[LL5] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Course of Theoretical Physics, Vol. 5, Satistical Mechanics, part 1, Pergamon Press, 1980.

[Gr] T. H. Gronwall, Note on the derivative with respect to a parameter of the solutions of a system of differential equations, Ann. of Math. 20, 292-296 (1919).

[HK] H. Haug, S W. Koch, Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors, World Scientific, 1993.

[KM] C. L. Kane, E. J. Mele, Ratio Problem in Single Carbon Nanotubes Fluorescence Spectroscopy, Phys. Rev. Lett. 90, 20, 207401 (2003).