



Méthodes asymptotiques et numériques pour le transport quantique résonant

Ali Faraj

► To cite this version:

Ali Faraj. Méthodes asymptotiques et numériques pour le transport quantique résonant. Mathématiques [math]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2008. Français. NNT: . tel-00365647v1

HAL Id: tel-00365647

<https://theses.hal.science/tel-00365647v1>

Submitted on 4 Mar 2009 (v1), last revised 7 Apr 2011 (v5)

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 TOULOUSE III - PAUL SABATIER

U.F.R MATHÉMATIQUES INFORMATIQUE GESTION

THÈSE

présentée en vue d'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

délivré par l'Université Toulouse III - Paul Sabatier

Spécialité : Mathématiques Appliquées

par

Ali FARAJ

intitulée

MÉTHODES ASYMPTOTIQUES ET NUMÉRIQUES POUR LE TRANSPORT QUANTIQUE RÉSONANT

soutenue le 25 novembre 2008 devant le jury composé de :

Naoufel Ben Abdallah	<i>Directeur de thèse</i>	Université Toulouse III-Paul Sabatier
Christophe Besse	<i>Rapporteur</i>	Université de Lille 1
Florian Méhats	<i>Examineur</i>	Université de Rennes 1
Francis Nier	<i>Examineur</i>	Université de Rennes 1
Andrea Sacchetti	<i>Rapporteur</i>	Université de Modène et de Reggio d'Émilie
Pierre Raphaël	<i>Invité</i>	Université Toulouse III-Paul Sabatier

Institut de Mathématiques de Toulouse

Équipe Mathématiques pour l'Industrie et la Physique (MIP)

Unité Mixte de Recherche CNRS - UMR 5219

UFR MIG, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 118 route de Narbonne,

31062 TOULOUSE cedex 09, France

Remerciements

Je tiens avant tout à remercier Naoufel Ben Abdallah de m'avoir permis de réaliser cette thèse de doctorat. Je lui suis reconnaissant pour son encadrement au cours des trois années de thèse et de m'avoir fait profiter de ses idées et conseils concernant mon travail. D'autre part, il m'a donné les moyens logistiques suffisant pour participer à différentes conférences et travailler à Rennes.

Je tiens également à remercier les Professeurs Christophe Besse et Andrea Sacchetti pour l'attention qu'ils ont portée à mon mémoire de thèse et à l'évaluation de mon travail. Je les remercie également pour leur présence le jour de ma soutenance.

Je remercie Pierre Raphaël d'avoir accepté mon invitation à être membre du jury de ma thèse. Je le remercie pour l'attention qu'il a portée à mon travail.

Durant ma thèse, j'ai travaillé au sein de l'IRMAR (Institut de Mathématique de Rennes) et ce séjour m'a été profitable scientifiquement ainsi que humainement. Je tiens à remercier Florian Mehats d'avoir rendu possible ce séjour en m'invitant à l'IRMAR et pour son aide quant au travail réalisé. Je tiens à remercier Francis Nier pour son investissement dans les travaux que nous avons réalisé en collaboration. Il m'a fait profiter de ses conseils justes et de sa méthode de travail efficace. Ce fut un plaisir de travailler avec lui. Je remercie ces deux derniers d'avoir suivis mes travaux est d'être présents le jour de ma soutenance.

Je souhaite remercier Andrea Mantile avec qui j'ai effectué une partie du travail réalisé à Rennes. Nous avons interagi de façon intense et dynamique donnant lieu à une recherche stimulante et productive.

Je tiens à remercier Virginie Bonnaillie-Noël pour sa participation active à l'aboutissement de la seconde partie du travail réalisé à Rennes.

J'adresse ma gratitude à Mohamed Masmoudi pour l'aide qu'il m'a donnée pour le calcul numérique du mode résonant.

Je tiens à remercier les personnes avec qui j'ai eu la joie de discuter de mathématiques, ce qui a participé à mon épanouissement dans ce domaine. Sans prétendre que la liste soit exhaustive, je citerais : les étudiants et les enseignants de l'Université de Paul Sabatier avec qui j'ai eu le plaisir de réaliser mes activités d'enseignement ; Mesdames et Messieurs Elise Fouassier, Claudia Negulescu, Pierre-Alain Mazet, Hachem Ghias, Anton Arnold, Matthieu Hillairet, Pierre Raphaël, Jean-Pierre Dedieu, Eric Lombardi et Fabrice Deluzet enseignants chercheurs titulaires ; Mesdames et Messieurs Paola Boito, Tiphaine Jézéquel, Bennoune Mounir, Raymond El Hajj, Fuentes Marc, Sébastien Motsch, Omar Maj, François Loret, Belkacem Said Houari, Jean-Luc Volery et Amine Eltaief doctorants et non titulaires.

Je remercie grandement ma famille et mes amis pour leur soutien. En particulier, je tiens à remercier ma soeur Noura Faraj dont la relecture minutieuse de mon mémoire a permis de corriger de nombreuses erreurs de présentation.

Table des matières

Introduction	9
1 Présentation du problème et notions générales	19
1.1 Modélisation en mécanique quantique	19
1.1.1 Equation de Liouville-Von Neumann	19
1.1.2 Le cas stationnaire	21
1.2 Le problème	26
1.2.1 L'Hamiltonien	26
1.2.2 Le cas stationnaire	28
1.2.3 Le cas instationnaire	29
1.3 Spectre de l'Hamiltonien	30
1.4 A propos de la racine complexe	31
1.5 Scattering, notion de résonance	34
1.5.1 Prolongement de la résolvante	34
1.5.2 Définition des résonances et propriétés	41
1.5.3 Un peu de scattering	47
2 Méthodes de résolution pour la diode à effet tunnel résonant en régime stationnaire et en régime transitoire	53
2.1 La diode à effet tunnel résonant en régime stationnaire	53
2.1.1 Calcul de la densité : fonctions propres généralisées	53
2.1.2 Conditions aux limites transparentes	54
2.1.3 Résolution directe	55
2.1.4 Calcul numérique de la densité	56
2.1.5 Courant	59
2.1.6 Calcul du potentiel, couplage Schrödinger/Poisson	61

2.1.7	Calcul du niveau de Fermi	64
2.1.8	Résumé : algorithme de résolution	65
2.1.9	Résultats numériques	65
2.2	Régime stationnaire : décomposition sur l'état résonant	73
2.2.1	Description de la méthode	74
2.2.2	Résumé : algorithme de résolution	84
2.2.3	Résultats numériques	85
2.3	Le cas instationnaire	94
2.3.1	Conditions aux limites transparentes dépendant du temps . .	94
2.3.2	Algorithme de résolution directe du problème instationnaire .	102
2.3.3	Calcul de la densité du problème instationnaire à l'aide du mode résonant	103
2.3.4	Résultats numériques	111
Appendice 2.A : Quelques résultats sur les coefficients de transmission . . .		123
Appendice 2.B : Calcul des résonances, valeurs des matrices éléments finis.		126
Appendice 2.C : Régularité des fonctions propres généralisées autour la fréquence nulle		127
Bibliographie		133
 3 Simulation of resonant tunneling heterostructures : numerical com- parison of a complete Schrödinger-Poisson system and a reduced nonlinear model		
		137
3.1	Introduction	138
3.2	The model	138
3.3	Theory and applications	141
3.4	Steady states computations	143
3.5	Time dependent nonlinear dynamics	148
3.6	Conclusion	151
Bibliography		153
 4 A semi-classical Schrödinger-Poisson problem in dimension $d \leq 3$ and analysis of the case $d = 1$		
		155
4.1	Introduction	155
4.2	Some asymptotics for the linear operator	158

4.3	Mathematical tools	160
4.3.1	Agmon distance	160
4.3.2	Exponential decay of eigenfunctions	162
4.3.3	Spectral comparison between self-adjoint operators.	165
4.4	Proof of Lemma 4.2.1	166
4.5	Preliminary results for the Schrödinger-Poisson system in dimension $d \leq 3$	169
4.6	Semi-classical limit in the case $d = 1$	172
Bibliography		181
5	Semi-classical limit of the Schrödinger-Poisson system in dimension $d = 2$ and 3	183
5.1	Introduction	183
5.2	Asymptotic estimates in dimension $d = 2, 3$	186
5.3	The asymptotic problem in the 3-D case	192
5.3.1	Asymptotic behaviour of the Poisson potential and the limit Poisson problem	192
5.3.2	The limit equation	197
5.4	The asymptotic problem in the 2-D case	202
Appendix 5.A : Further technical tools		214
Appendix 5.B : More about the limit problem in dimension $d = 3$		215
Bibliography		221

Introduction

Cadre général

Le travail de cette thèse se place dans un contexte de modélisation et de simulation numérique de nano-composants, celui-ci est sujet à une forte demande de l'industrie électronique et suscite jusqu'à présent l'intérêt de nombreux mathématiciens. La petite taille de ces dispositifs, de l'ordre du nanomètre, est propice à l'apparition de phénomènes physiques donnant aux composants des propriétés particulières qui trouvent une application dans le domaine de l'électronique. Ces phénomènes sont bien décrits en modélisant le déplacement des électrons à l'intérieur du composant à l'aide de la mécanique quantique [26], en faisant intervenir des systèmes de Shrödinger-Poisson.

En particulier, nous proposons dans ce travail des méthodes numériques pour la simulation de diodes à effet tunnel résonant¹. Ces diodes sont des hétérostructures composées de fines tranches de semi-conducteur accolées les unes aux autres et comprises entre deux fils de taille considérée infinie [17]. Le cas qui nous intéressera le plus longuement est celui de la double barrière. Pour une telle diode, la différence de conductivité de chacun des matériaux mis en jeu est représentée par un potentiel électrostatique de la forme puits dans une île. Nous nous placerons dans le cadre hors équilibre, c'est à dire que le potentiel appliqué n'est pas le même de chaque côté du semi-conducteur. La composition d'un exemple de RTD et le potentiel correspondant, dans l'approximation monodimensionnelle, sont représentés dans la Figure 1.

Dans un circuit sous-tension, des électrons sont injectés par la gauche et par la droite et, une partie d'entre-eux traversant les barrières par effet tunnel, est captée par le puits. Du point de vue mathématique, cela se traduit par l'existence d'états quasi-bornés correspondant à des quantités spectrales appelées résonances quantiques. Une résonance quantique n'étant pas dans le spectre de l'opérateur mis en jeu, elle diffère de la notion de résonance généralement connue, comme étant la stimulation d'une fréquence propre du système, pouvant conduire à sa rupture. Cependant, le comportement du système est, de façon similaire, singulier à proximité d'une résonance quantique. En particulier, les états de scattering arrivant sur la diode avec une

¹Nous les appellerons par la notation RTD venant du nom anglais : Resonant Tunneling Diode.

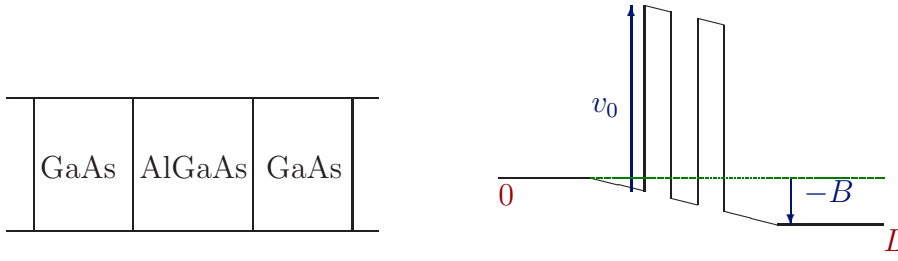


FIG. 1 – Composition d’une RTD GaAs/AlGaAs (gauche) et potentiel extérieur correspondant (droite).

énergie proche d’une résonance², ont un module important à la sortie de la diode. En d’autres termes, les électrons traversant la diode sont plus largement transmis lorsque leur énergie est résonante : c’est l’effet tunnel résonant.

Sur le premier graphique de la Figure 2, nous avons schématisé l’injection d’une onde plane par la gauche à la fréquence $k > 0$, sa réflexion et sa transmission. Sur le second graphique de la même figure, nous avons représenté le logarithme du coefficient de transmission correspondant en fonction de k .

Ce phénomène de pic de transmission a permis aux RTD de trouver leur utilité

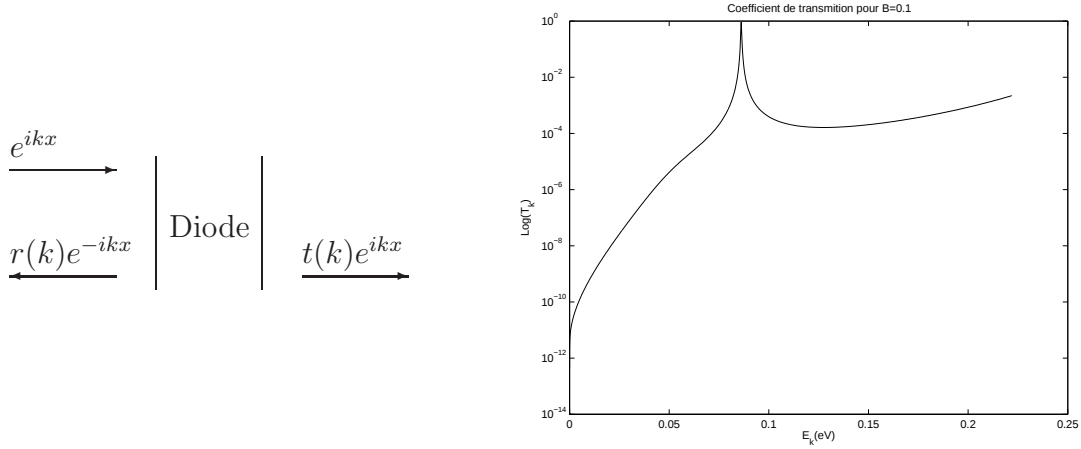


FIG. 2 – Schématisation de l’injection d’une onde plane e^{ikx} (gauche) et représentation du coefficient de transmission (droite).

dans la construction d’amplificateurs, d’interrupteurs et de circuits à mémoire. Une autre propriété importante des RTD est l’existence d’une partie décroissante de sa courbe caractéristique courant-tension [17]. Ce phénomène de résistance différentielle négative est le phénomène inverse de la perte par effet joule. Comme cela est expliqué dans [49], son utilisation dans un circuit de type RLC permet de conce-

²Comme dans ce travail nous travaillerons seulement avec des résonances quantiques, nous les qualifierons de résonances sans que cela ne soit sujet à confusion.

voir des oscillateurs. Le dernier phénomène physique propre aux RTD que nous évoquons, est le phénomène d'hystérésis. Il correspond à l'existence de branches multiples de la caractéristique courant-tension de la diode. Il est physiquement dû à la présence d'électrons dans le puits sur lesquels l'injection est génératrice de chaos [39]. Mathématiquement, ce phénomène s'explique par le fait que l'on n'a pas l'unicité de la solution du problème de Shrödinger-Poisson non-linéaire décrivant le système hors équilibre.

La résolution numérique intervient de façon prédictive : elle doit pouvoir donner la courbe caractéristique courant-tension d'une RTD étant donnés ses paramètres physiques tels que sa taille et la composition de ses barrières. Si la courbe obtenue est suffisamment fiable, elle permettra au constructeur de savoir si la diode a les propriétés souhaitées sans avoir à passer par sa construction, cette dernière étant difficile du à la petite taille de la diode. Notons d'abord que toute résolution numérique ne peut se faire que sur un domaine borné en raison des contraintes évidentes de limitation de mémoire des machines. La RTD étant considéré comme un système ouvert dans un domaine non borné [17], la première étape est d'utiliser des conditions aux limites transparentes pour l'équation de Schrödinger permettant de réduire le domaine de calcul en simulant l'espace libre [38], [4]. Notons ensuite que la singularité en fréquence évoquée ci-dessus nécessite un traitement numérique particulier autour de l'énergie résonante rendant le coût de calcul élevé [38]. Selon une idée de [39], il est possible d'y remédier en utilisant une approximation à un mode des solutions de l'équation de Schrödinger, ceci a pour effet de capter la résonance. Cela a permis à [9] d'écrire un algorithme stationnaire pour la simulation de RTD. Dans ce travail, nous nous intéressons à l'utilisation de l'approximation à un mode pour diminuer le coût de calcul en instationnaire. En réalisant une étude asymptotique $h \ll 1$, où h est un paramètre adimensionné dépendant des grandeurs physiques du système, [12] ont obtenu, en dimension 1, un modèle réduit donnant des caractéristiques courant-tension réalistes en un temps de calcul réduit. Nous nous intéressons à une telle étude asymptotique d'un système de Schrödinger-Poisson avec puits quantique en dimension $d \leq 3$, dans le cadre plus simple du domaine borné où les résonances sont remplacées par des valeurs propres.

Le cadre étant donné, rappelons quelques dates importantes concernant l'étude des RTD et des résonances en général. Bien que connue depuis les années 30 [32], la notion de résonance n'a été comprise que tardivement. Ce n'est que dans les années 70 que l'effet tunnel résonant et la résistance différentielle négative ont été observés pour la première fois expérimentalement sur des RTD [13]. La définition mathématique rigoureuse des résonances est tout aussi récente. Elle est donnée par le travail fondateur de [2] qui a inspiré de nombreux travaux sur ce sujet. En particulier, [23] utilise cette définition dans le cadre l'analyse microlocale pour étudier la limite semi-classique des résonances. Le dernier travail a été suivi de l'intérêt de la communauté semi-classique et de nombreuses publications sont parues sur le sujet des résonances.

Résumé

Dans le cadre monodimensionnel, l'Hamiltonien du système étant

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_e + V_{NL}$$

où V_e est donné par la Figure 1 et V_{NL} décrit les interactions de Coulomb, on s'intéresse au problème de Schrödinger-Poisson

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2} V_{NL} = \frac{q^2}{\epsilon} (n - n_D), & (0, L) \\ V_{NL}(0) = V_{NL}(L) = 0 \end{cases}$$

où en régime stationnaire

$$n(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Phi_k(x)|^2 dk \quad (1)$$

$$\begin{cases} [-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_e + V_{NL}] \Phi_k = E_k \Phi_k, & \mathbb{R} \\ + \text{ Conditions à l'infini} \end{cases} \quad (2)$$

et en régime transitoire

$$n(x, t) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Psi_k(x, t)|^2 dk \quad (3)$$

$$\begin{cases} i\hbar \partial_t \Psi_k = [-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V_e + V_{NL}] \Psi_k, & \mathbb{R} \\ \Psi_k|_{t=0} = \Phi_k \end{cases} \quad (4)$$

Dans le Chapitre 1, nous donnons des éléments de modélisation en mécanique quantique, en particulier, nous donnons des notions sur le lien entre l'équation de Schrödinger et l'équation Liouville-Von Neumann vérifiée par la matrice densité permettant ainsi de voir l'équation (2) comme l'équation stationnaire d'un problème d'évolution. Nous donnons également des éléments sur la décomposition sur les fonctions propres généralisées permettant d'expliquer l'intégrale (1) intervenant dans le calcul de la densité. Ensuite, on montre que le spectre de l'Hamiltonien H qui nous intéresse est :

$$\sigma(H) = \sigma_{ess}(H) = [-B, +\infty[$$

Les solutions de (2) sont des fonctions propres généralisées de H associée à E_k parcourant $\sigma(H)$. Elles ne sont pas dans l'Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ de travail mais leur définition est possible par le prolongement de la résolvante

$$R(z) := (H - z)^{-1}$$

à $[-B, +\infty[$ à l'aide du principe d'absorption limite [1]. Nous étudions ce prolongement et nous définissons les résonances comme les pôles du prolongement méromorphe de $R(z)$ au delà de $[-B, +\infty[$. Nous donnons ensuite des propriétés

importantes des résonances utiles dans les applications numériques : la première est que les résonances peuvent être vues comme des valeurs propres de H , ce qui donne un moyen de calculer numériquement leur valeur, la deuxième est que l'on observe un pic en amplitude pour le module de la fonction propre généralisée Φ_k lorsque E_k est proche de la partie réelle d'une résonance.

La dernière propriété joue un rôle important dans la résolution que nous proposons dans le Chapitre 2. Nous présentons dans ce chapitre les méthodes stationnaires et instationnaires proposées dans [38], elles joueront le rôle de référence pour nos calculs. En régime stationnaire, le pic de Φ_k par rapport à la fréquence k demande un maillage fin en fréquence autour des résonances pour le calcul de (1). Dans notre cas la fonction de répartition $g(k)$ décroît suffisamment vite pour que seule la première résonance intervienne dans le calcul. Ce raffinement en fréquence demande de résoudre un grand nombre d'équations de Schrödinger ce qui rend le coût de calcul élevé. D'autre part, en régime transitoire, le maillage en fréquence est fixe par rapport au temps alors que la résonance peut bouger. De ce fait, le raffinement autour de la résonance est impossible, il faut donc un maillage fin partout. En s'inspirant du travail de [39], nous proposons une approximation à un mode pour la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire et instationnaire : (2) et respectivement (4). Cette approximation consiste à décomposer Φ_k sous la forme :

$$\Phi_k = \Phi_k^e + \theta_k(0)u(0)$$

et Ψ_k sous la forme :

$$\Psi_k = \Psi_k^e + \theta_k(t)u(t)$$

La fonction Φ_k^e (resp. Ψ_k^e), vivant hors du puits, est la solution de l'équation de Schrödinger stationnaire (resp. instationnaire) associée à l'Hamiltonien $H_{fill}(0)$ (resp. $H_{fill}(t)$) avec puits bouché :

$$H_{fill}(t) = H(t) + v_0 \mathbf{1}_\omega$$

où v_0 est la hauteur des barrières et ω désigne le puits. La fonction $\theta_k(t)u(t)$, vivant à l'intérieur du puits, est proportionnelle au mode résonant $u(t)$ de plus basse énergie défini comme la solution dans un espace L^2 déformé du problème

$$H(t)u(t) = z(t)u(t)$$

minimisant la partie réelle de $z(t)$. Le coefficient de proportionnalité $\theta_k(t)$ est choisi tel que Φ_k (resp. Ψ_k) soit solution de (2) (resp. (4)). Cette méthode donne de bons résultats : en régime stationnaire, elle permet de prendre 20 fois moins de points en fréquence et en régime transitoire elle permet de gagner jusqu'à 54.49% en temps de calcul par rapport à la méthode de référence.

Dans le chapitre 3, nous avons comparé la résolution de référence avec une résolution à l'aide d'un modèle asymptotique proposée dans [12]. En régime stationnaire, la comparaison a permis de valider l'existence des branches de solutions, obtenues par [12], et apparaissant dans la courbe courant-tension de RTD avec différents paramètres. On peut obtenir ces branches avec la résolution directe en initialisant

l'algorithme à la solution obtenue par le modèle de [12] ou en augmentant et diminuant successivement le bias, la branche suivie à l'aller étant différente de celle suivie au retour. Le modèle asymptotique intervient alors comme un pré-traitement permettant de localiser les branches avant résolution. Dans le cas de deux puits, la courbe de l'énergie résonante associée au premier puits en fonction du bias peut croiser celle de l'énergie résonante associée au deuxième puits. Pour une diode où un tel croisement a lieu, nous avons réalisé un test instationnaire au bias de croisement et on a remarqué qu'un phénomène de battement de la charge d'un puits à l'autre se produit.

Les chapitres 4 et 5 sont consacrés à la limite semi-classique $h \rightarrow 0$, en dimension $d \leq 3$, d'un système de Schrödinger-Poisson stationnaire, sur un ouvert borné régulier Ω de $\mathbb{R}^d$. Le problème est considéré avec un potentiel extérieur

$$U^h(x) = U\left(\frac{x - x_0}{h}\right), \quad \text{où } U \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d) \text{ t.q. } U \leq 0$$

qui est un puits se concentrant vers son centre $x_0 \in \Omega$ et une répartition en énergie décrit par une fonction f décroissante, régulière, de seuil $\varepsilon_S < 0$, telle que $f(x) = 0$ pour $x \geq \varepsilon_S$ et $f(x) > 0$ pour $x < \varepsilon_S$. Pour une constante $h \in (0, h_0]$, le problème s'écrit de la façon suivante : trouver V^h solution de

$$\begin{cases} -\Delta V^h = n[V^h], & \Omega \\ V^h|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

où

$$n[V^h] = \sum_{i \in \mathbb{N}} f(\varepsilon_i^h) |\Psi_i^h|^2,$$

et $\{\varepsilon_i^h\}_{i \in \mathbb{N}}$ sont les valeurs propres de l'Hamiltonien

$$H^h = -h^2 \Delta + U^h + V^h$$

vérifiant :

$$\begin{cases} [-h^2 \Delta + U^h + V^h] \Psi_i^h = \varepsilon_i^h \Psi_i^h, & \Omega \\ \Psi_i^h|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (6)$$

pour les vecteurs propres correspondant $\{\Psi_i^h\}_{i \in \mathbb{N}}$. La limite semi-classique, $h \rightarrow 0$, de (5), (6) est différente selon la dimension.

Dans le chapitre 4, on donne des estimations à priori sur le problème et des résultats mathématiques tels que la décroissance exponentielle des fonctions propres hors du puits à l'aide des distances de Agmon et la comparaison du spectre de deux opérateurs auto-adjoints. Ensuite, on réalise la limite en dimension $d = 1$ où $\Omega = (0, L)$. Le résultat obtenu est le suivant :

Théorème 1. *Le potentiel $(V^h)_{h \in (0, h_0]}$ est borné dans $W^{1, \infty}(0, L)$ et tend, fortement*

dans $C^{0,\alpha}(0, L)$, $\forall \alpha \in (0, 1)$, vers le potentiel V_0 défini par

$$V_0(x) = \begin{cases} \left(\sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) \right) \left(1 - \frac{x_0}{L}\right)x, & 0 < x \leq x_0 \\ \left(\sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) \right) \frac{x_0}{L}(L - x), & x_0 < x < L \end{cases}$$

où $\{e_i\}_{1 \leq i \leq N}$ est le spectre discret de $-\frac{d^2}{dx^2} + U$, $e_{i \geq N+1} = 0$ et θ est l'unique solution de l'équation non linéaire $\theta = x_0(1 - \frac{x_0}{L}) \sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta)$.

La densité $(n[V^h])_{h \in (0, h_0]}$ tend vers la mesure

$$\mu = \sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) \delta_{x_0}.$$

au sens de la topologie faible-* sur $\mathcal{M}_b(0, L)$.

On étudie les cas $d = 2$ et $d = 3$ dans le chapitre 5. En utilisant les estimations à priori, on obtient que le potentiel et la charge tendent vers 0 presque partout. Sous l'hypothèse

$$e_1 < \varepsilon_S$$

la limite du spectre n'est pas celle du potentiel nul : asymptotiquement, le potentiel, bien que tendant vers 0, a un effet sur le spectre et la limite est à comprendre d'un point de vue spectral. Une bonne description de ce phénomène passe par le changement d'échelle correspondant à la dilatation :

$$x \mapsto \eta = \frac{x - x_0}{h}$$

Le cas de la dimension 3 est particulièrement intéressant puisque la limite conduit à un problème de Schrödinger-Poisson dont l'étude donne des informations sur la convergence dans le domaine de la variable en η . L'étude du problème limite fait intervenir des outils d'analyse convexe aux travers de sa formulation variationnelle comme cela est fait dans [7] et [10].

Les résultats obtenus dans les cas $d = 2$ et 3 sont réunis dans les deux théorèmes suivants :

Théorème 2. Soit $d = 3$ et V^h solution de (5), (6)

1. Le potentiel V^h converge fortement vers 0 dans $H_0^1(\Omega)$:

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O}(h^{1/2}).$$

2. Pour un seuil ε_S fixé il existe un unique couple $(A, W) \in (0, +\infty) \times \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ tel que $\varepsilon_S = \inf \sigma(-\Delta + U + W)$ et

$$\begin{cases} [-\Delta + U + W] \chi = \varepsilon_S \chi, & \text{avec } \chi \in H^2(\mathbb{R}^3), \|\chi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1, \\ -\Delta W = A |\chi|^2. \end{cases} \quad (7)$$

3. Avec les notations ci-dessus, le potentiel $\tilde{V}^h$ défini par

$$\tilde{V}^h(\eta) = V^h(h\eta + x_0)$$

vérifie

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - W \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} = 0.$$

où $\Omega^h = \frac{1}{h}(\Omega - x_0)$.

4. Il existe $h_1 > 0$ telle que $\varepsilon_i^h > \varepsilon_S$ et $f(\varepsilon_i^h) = 0$ pour tout $i \geq 2$ et tout $h \leq h_1$.
Si l'on pose

$$\tilde{\Psi}_i^h(\eta) = h^{\frac{d}{2}} \Psi_i^h(h\eta + x_0)$$

la densité à l'échelle quantique $h^{-1} \sum_{i \in \mathbb{N}} f(\varepsilon_i^h) |\tilde{\Psi}_i^h|^2 = h^{-1} f(\varepsilon_1^h) \left| \tilde{\Psi}_1^h \right|^2$ pour

$h \leq h_1$, vérifie

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\| 1_{\Omega^h} h^{-1} f(\varepsilon_1^h) |\tilde{\Psi}_1^h|^2 - A |\chi|^2 \right\|_{L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)} = 0.$$

Théorème 3. Soit $d = 2$ et V^h solution de (5), (6)

1. Le potentiel V^h tend fortement vers 0 dans $H_0^1(\Omega)$

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{|\ln h|}\right).$$

2. Etant donné le seuil ε_S associé à f et $e_1 = \inf \sigma(-\Delta + U)$, on pose $\theta = \varepsilon_S - e_1$.
Alors, le potentiel $\tilde{V}^h$ à l'échelle quantique vérifie

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\| \tilde{V}^h - \theta \right\|_{L^\infty(\{|x| \leq -\kappa \ln h\})} = 0$$

pour toute constante $\kappa > 0$ fixée.

3. Il existe $h_1 > 0$ telle que $\varepsilon_i^h > \varepsilon_S$ et $f(\varepsilon_i^h) = 0$ pour tout $i \geq 2$ et tout $h \leq h_1$.
La densité de répartition à l'échelle quantique $\sum_{i \in \mathbb{N}} f(\varepsilon_i^h) |\tilde{\Psi}_i^h|^2 = f(\varepsilon_1^h) \left| \tilde{\Psi}_1^h \right|^2$
pour $h \leq h_1$, vérifie

$$\left\| 1_{\Omega^h} f(\varepsilon_1^h) \left| \tilde{\Psi}_1^h \right|^2 \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \mathcal{O}(|\ln h|^{-1}),$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} |\ln h| \left\| 1_{\Omega^h} f(\varepsilon_1^h) \left| \tilde{\Psi}_1^h \right|^2 \right\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} = \lim_{h \rightarrow 0} |\ln h| f(\varepsilon_1^h) = 2\pi\theta.$$

Perspectives

En ce qui concerne l'algorithme instationnaire utilisant une approximation à un mode que nous avons proposé dans le Chapitre 2 pour la simulation numérique de

RTD, on peut essayer de réduire le nombre de points en fréquence dans le calcul de la densité en utilisant l'ansatz que le coefficient θ_k devant le mode résonant est de la forme

$$\frac{C}{(E_k - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}.$$

où $z = E_R - i\frac{\Gamma}{2}$ est la résonance intervenant dans le calcul. En régime stationnaire, cela permet de réduire de 20 fois environ le nombre de points en fréquence par rapport à la résolution de référence. On s'attend à une réduction du nombre de points en fréquence du même ordre en régime transitoire.

L'étude du problème (7), réalisée dans le Chapitre 5, revient à l'étude de l'équation de Hartree stationnaire :

$$[-\Delta + U + a(\int \frac{1}{4\pi|x-y|} |\psi_a|^2)]\psi_a = \varepsilon_a \psi_a \quad (8)$$

pour $a \geq 0$. Lorsque $U = 0$, ce problème n'a de solution que si $a < 0$ [27] et la limite $a \rightarrow -\infty$ a été étudiée par [44]. Pour $U \neq 0$, il est possible d'étudier la limite de (8) lorsque $a \rightarrow +\infty$ et de compléter ainsi le travail commencé dans l'Appendice 5.B.

Un autre développement possible à partir du Chapitre 5 est l'étude semi-classique du système de Schrödinger-Poisson instationnaire correspondant à (5), (6). En effet, en utilisant des résultats de stabilité sur les systèmes de Schrödinger-Poisson, on peut imaginer utiliser la limite réalisée en régime stationnaire pour effectuer la limite en régime transitoire.

Enfin, l'étude asymptotique réalisée dans le Chapitre 5 peut s'avérer utile pour simplifier la résolution de problèmes physiques réels. Cela permettra d'autre part de valider les résultats obtenus dans ce chapitre.

Chapitre 1

Présentation du problème et notions générales

1.1 Modélisation en mécanique quantique

Bien que le problème qui nous intéresse par la suite soit plus complexe, nous donnons ici quelques éléments de modélisation en mécanique quantique dans le cas général.

1.1.1 Equation de Liouville-Von Neumann

Les notions de mécaniques quantiques présentées ici peuvent également être trouvées dans [14].

Selon les postulats de la mécanique quantique, le système physique étudié correspond à un espace de Hilbert séparable $\mathcal{H}$. La plupart du temps, c'est un espace de fonctions de carré intégrable. Les grandeurs physiques du système, ou observables, correspondent à des opérateurs auto-adjoints sur $\mathcal{H}$. L'état du système au temps t est décrit par la matrice densité $\rho(t)$ qui est un opérateur à trace, auto-adjoint et positif sur $\mathcal{H}$. L'évolution par rapport au temps du système est donnée par :

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \rho_I e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (1.1)$$

où $\hbar$ est une constante physique, ρ_I est l'état initial du système et l'opérateur H est l'Hamiltonien qui correspond à l'observable énergie. L'opérateur H est en général non borné, on notera $D(H)$ son domaine. On supposera dans ce paragraphe que H ne dépend pas du temps.

Remarque 1.1.1. L'énergie au sens classique $p(x, \xi)$ est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle :

$$p(x, \xi) = \frac{\xi^2}{2} + V(x)$$

pour une particule soumise à un potentiel V . La dynamique de la particule est alors décrite par

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}x = \xi \\ \frac{d}{dt}\xi = -\nabla V(x) \end{cases}$$

Par un procédé de quantification, voir [30], on obtient, à partir de p , l'Hamiltonien quantique H défini par

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x)$$

En dérivant (1.1) par rapport au temps, on obtient l'équation de Liouville-Von Neumann :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt}\rho = [H, \rho] \\ \rho(0) = \rho_I \end{cases} \quad (1.2)$$

où $[A, B] = AB - BA$ est le commutateur des opérateurs A et B .

L'opération qui à ρ_I fait correspondre $\rho(t)$ définit un groupe C^0 d'opérateurs sur l'ensemble des opérateurs à trace. D'autre part, elle préserve la positivité et l'auto-adjointeté.

On se place dans la cas $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, $d \geq 1$. Alors, on montre qu'un opérateur ρ est Hilbert-Schmidt, auto-adjoint, positif si et seulement si il existe $(\Phi_i)_{i \in \mathcal{I}}$ famille orthonormée de $\mathcal{H}$ et $(\lambda_i)_{i \in \mathcal{I}} \subset \mathbb{R}$ tels que

$$\rho = \sum \lambda_i(\cdot, \Phi_i)\Phi_i \quad \sum \lambda_i^2 < +\infty \quad \lambda_i > 0$$

où $\mathcal{I}$ est au plus dénombrable. De plus un tel ρ est à trace si et seulement si

$$\sum \lambda_i < +\infty$$

Pour plus de renseignements, nous renvoyons le lecteur à [29].

En particulier, si l'état initial ρ_I est un opérateur à trace, auto-adjoint, positif, on a

$$\rho_I = \sum \lambda_i(\cdot, \Phi_i)\Phi_i \quad (1.3)$$

et l'état du système d'Hamiltonien H au temps t est donné par :

$$\rho(t) = \sum \lambda_i(\cdot, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Phi_i)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Phi_i \quad (1.4)$$

En effet, $\forall u \in \mathcal{H}$

$$\begin{aligned} \rho(t)u &= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\rho_I e^{\frac{i}{\hbar}Ht}u \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \left(\sum \lambda_i(e^{\frac{i}{\hbar}Ht}u, \Phi_i)\Phi_i \right) \\ &= \sum \lambda_i(u, e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Phi_i)e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Phi_i \end{aligned} \quad (1.5)$$

où la permutation de la somme et de l'action de $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ est justifiée par la fait que $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ est borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et que la somme (1.3) converge au sens de la norme

uniforme d'opérateur.

On remarque que $\rho(t)$ est décomposée sur les $\Psi_i(t) := e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Phi_i$, solutions de l'équation de Schrödinger :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt}\Psi_i(t) = H\Psi_i(t) \\ \Psi_i(0) = \Phi_i \end{cases}$$

Remarque 1.1.2. La somme (1.3) converge au sens des opérateurs Hilbert-Schmidt sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. Par la cyclicité de la trace et l'unitarité de l'opérateur $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$, il en est de même de la somme (1.4).

D'autre part, si l'on note $\rho(x, y, t)$ le noyau de $\rho(t)$, on a

$$\|\rho(t)\|_{HS}^2 = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |\rho(x, y, t)|^2 dx dy$$

où

$$\|A\|_{HS} = (Tr(A^*A))^{\frac{1}{2}}$$

est la norme Hilbert-Schmidt sur $L^2(\mathbb{R}^d)$.

On en déduit que le noyau de la somme est la somme des noyaux :

$$\rho(x, y, t) = \sum \lambda_i \Psi_i(x, t) \overline{\Psi_i(y, t)} \quad (1.6)$$

En d'autres termes, on peut intervertir somme et intégrale dans (1.5).

1.1.2 Le cas stationnaire

Le cas stationnaire est le cas où le système ne varie pas par rapport au temps :

$$\rho(t) = \rho_I, \quad \forall t \geq 0 \quad (1.7)$$

Regardons d'abord ce que l'on peut dire dans le cas des états purs. Ces derniers sont les $\rho(t)$ tels que

$$\rho_I = (., \Phi)\Phi$$

avec $\Phi \in \mathcal{H}$ donné, en d'autres termes ce sont les $\rho(t)$ donnés par

$$\rho(t) = (., \Psi(t))\Psi(t) \quad \text{où} \quad \Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Phi$$

Pour un état pur la matrice densité est indépendante du temps si et seulement si Φ est un vecteur propre de H [14] et dans ce cas

$$\Psi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\Phi$$

où E est la valeur propre à laquelle est associée Φ . Alors trouver les états purs stationnaires revient à résoudre le problème :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \Phi \in D(H) \subset \mathcal{H} \text{ et } E \in \mathbb{R} \text{ tels que} \\ H\Phi = E\Phi \end{cases}$$

On appellera ce dernier problème équation de Schrödinger stationnaire. On voit que dans le cas présent le spectre de l'Hamiltonien joue un rôle important. Mais de façon plus générale, une matrice densité vérifiant (1.7) a une dérivée en temps nulle. Alors l'équation de Liouville-Von Neumann (1.2) implique :

$$[H, \rho] = 0 \quad (1.8)$$

Pour toute fonction borélienne bornée sur $\sigma(H)$, le calcul fonctionnel permet de définir la fonction d'un opérateur auto-adjoint :

$$f(H) = \int_{\sigma(H)} f(\lambda) d\mu(\lambda)$$

où μ est la mesure spectrale associée à H , voir [40] et [15]. La mesure μ est définie sur $\sigma(H)$ à valeur opérateur et $f(H)$ commute avec H . La matrice densité

$$\rho = f(H)$$

est alors solution de (1.8).

Le cas suivant nous intéressera dans les Chapitres 5 et 4 dans un cadre plus compliqué car non linéaire. Etant donné un domaine borné Ω régulier de $\mathbb{R}^d$ et l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\Omega)$, l'Hamiltonien :

$$H = -h^2 \Delta + V \quad D(H) = H_0^1 \cap H^2(\Omega),$$

où le potentiel V est continu borné inférieurement, vérifie :

$$\sigma(H) = \{\varepsilon_i, \quad i \geq 1\}$$

La séquence $(\varepsilon_i)_{i \geq 1}$ est une suite de valeurs propres de H de multiplicité finie, numérotées par ordre croissant, et telle que

$$\lim_{i \rightarrow +\infty} \varepsilon_i = +\infty$$

Alors, la mesure spectrale associée à H est discrète et, pour f régulière, $\rho = f(H)$ peut s'écrire $\rho = \sum_{i \geq 1} f(\varepsilon_i) P_{\{\varepsilon_i\}}$, où $P_{\{\varepsilon_i\}}$ désigne le projecteur spectral associé à la valeur propre ε_i . On notera Ψ_i les vecteurs propres correspondant aux ε_i en tenant compte de la multiplicité. Ce sont des solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\begin{cases} H\Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i, & \Omega \\ \Psi_i = 0, & \partial\Omega \end{cases}$$

La séquence $(\Psi_i)_{i \geq 1}$ forme une base de $L^2(\Omega)$, que l'on peut supposer orthonormée, et

$$\rho = \sum_{i \geq 1} f(\varepsilon_i) (\cdot, \Psi_i) \Psi_i \quad (1.9)$$

Si $f(e) \geq 0$ décroît suffisamment vite vers zéro quand e croît vers l'infini, ρ est un opérateur à trace, auto-adjoint, positif (comme nous l'avons remarqué dans la section (1.1.1)) solution de $[H, \rho] = 0$. Dans ce cas également, on voit que le spectre de H joue un rôle important pour la détermination des états stationnaires.

Remarque 1.1.3. Etant donnée une matrice densité ρ , la densité de probabilité n est alors la fonction qui représente la mesure suivante :

$$\varphi \in C(\overline{\Omega}) \mapsto \text{Tr}(\rho\varphi) \in \mathbb{C}.$$

En confondant un opérateur K et son noyau $K(x, y)$, on a $\rho\varphi = \rho(x, y)\varphi(y)$ et donc

$$\text{Tr}(\rho\varphi) = \int_{\Omega} \rho(x, x)\varphi(x)dx.$$

Ce qui donne $n(x) = \rho(x, x)$ et dans le cas (1.9), on a

$$n(x) = \sum_{i \geq 1} f(\varepsilon_i) |\Psi_i(x)|^2$$

En particulier, la probabilité de présence d'un électron dans un volume $\omega \subset \Omega$ est donnée par :

$$\text{Tr}(\rho \mathbf{1}_{\omega}) = \int_{\omega} n(x)dx.$$

Fonctions de l'Hamiltonien : décomposition sur les fonctions propres généralisées

Cette sous-section a pour objectif de donner une idée sur la décomposition sur les fonctions propres généralisées, décomposition qui joue un rôle important dans la résolution de (1.8) et dans les applications numériques. Nous parlerons plus en détail des fonctions propres généralisées dans la section 1.5.3.

Comme cela se produit dans la littérature physique, les calculs présentés ci-dessous sont plus ou moins formels, voir [35] par exemple. Ils peuvent être justifiés par les travaux [1] et [33]. Nous référons également à [46] pour plus d'informations à ce sujet.

En vue du problème qui nous intéresse par la suite, nous nous plaçons dans le cadre de la dimension 1 et sur tout l'espace. En effet, les semi-conducteurs peuvent être modélisés par un fil, donc de façon mono-dimensionnel, de taille infini car beaucoup plus grand que la taille du composant étudié. L'espace de Hilbert de travail est alors $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$. Soit l'opérateur moment

$$D_x = \frac{1}{i} \frac{d}{dx}$$

le quantifié de la variable moment au sens classique, et soit l'opérateur de référence :

$$H_0 = h^2 D_x^2$$

h étant une constante physique. Nous nous placerons dans le cas

$$H = H_0 + V$$

où V a la régularité nécessaire pour être dans le cadre de [1] et [33]. Il est demandé à V de tendre suffisamment vite vers 0 en $+\infty$.

Pour toute fonction f borélienne bornée, si l'on définit $\rho_0 = f(hD_x)$ alors

$$[H_0, \rho_0] = 0$$

H_0 et ρ_0 étant deux fonctions de hD_x . Soit U_0 la transformée de Fourier semi-classique

$$U_0 u(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} u(x) \overline{\Phi_0}(x, k) dx$$

où $\Phi_0(x, k) = e^{ix\frac{k}{h}}$ est une fonction propre généralisées associée à H_0 et à l'énergie k^2 :

$$H_0 \Phi_0 = k^2 \Phi_0$$

La transformation U_0 est une transformation unitaire sur $L^2(\mathbb{R})$ telle que

$$hD_x = U_0^{-1} k U_0$$

ce qui permet d'écrire

$$f(hD_x) = U_0^{-1} f(k) U_0$$

Alors, pour tout u, v régulières, on a

$$\begin{aligned} (f(hD_x)u, v) &= (U_0 f(hD_x) U_0^{-1} U_0 u, U_0 v) \\ &= (f(k) U_0 u, U_0 v) \\ &= \int_{\mathbb{R}} f(k) U_0 u(k) \overline{U_0 v(k)} dk \\ &= \int_{\mathbb{R}} f(k) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} u(y) \overline{\Phi_0}(y, k) dy \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} \overline{v(x)} \Phi_0(x, k) dx \right) dk \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}} f(k) \Phi_0(x, k) \overline{\Phi_0}(y, k) dk \right) u(y) dy \overline{v(x)} dx \end{aligned}$$

On en déduit que

$$\rho_0(x, y) = f(hD_x)(x, y) = \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}} f(k) \Phi_0(x, k) \overline{\Phi_0}(y, k) dk$$

où $K(x, y)$ désigne le noyau de l'opérateur K . La précédente égalité correspond à la décomposition de la matrice densité ρ_0 sur les fonctions propres généralisées.

Considérons l'opérateur perturbé $H = H_0 + V$.

L'opérateur d'onde

$$W := \lim_{t \rightarrow \infty} e^{i\frac{t}{h}H} e^{-i\frac{t}{h}H_0}$$

est un opérateur unitaire vérifiant

$$WH_0 = HW \tag{1.10}$$

En effet

$$\begin{aligned} W &= \lim_{t \rightarrow \infty} e^{i\frac{t}{h}H} e^{-i\frac{t}{h}H_0} = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{i\frac{(t+s)}{h}H} e^{-i\frac{(t+s)}{h}H_0} \\ &= e^{i\frac{s}{h}H} \left(\lim_{t \rightarrow \infty} e^{i\frac{t}{h}H} e^{-i\frac{t}{h}H_0} \right) e^{-i\frac{s}{h}H_0} = e^{i\frac{s}{h}H} W e^{-i\frac{s}{h}H_0} \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} ih \frac{d}{ds} W &= 0 \\ &= ih \frac{d}{ds} (e^{i\frac{s}{h}H} W e^{-i\frac{s}{h}H_0}) = ih \left(\frac{i}{h} H e^{i\frac{s}{h}H} W e^{-i\frac{s}{h}H_0} - \frac{i}{h} e^{i\frac{s}{h}H} W e^{-i\frac{s}{h}H_0} H_0 \right) = WH_0 - HW \end{aligned}$$

ce qui donne (1.10).

De plus, si l'on pose $\rho = W\rho_0 W^*$, avec $\rho_0 = f(hD_x)$ introduit plus haut, on a

$$\begin{aligned} [H, \rho] &= WH_0 W^* W \rho_0 W^* - W \rho_0 W^* W H_0 W^* \\ &= W[H_0, \rho_0] W^* = 0 \end{aligned}$$

où l'on a utilisé le fait que $H = WH_0 W^*$ et $[H_0, \rho_0] = 0$. On a donc ρ solution de l'équation de Liouville-Von Neumann stationnaire $[H, \rho] = 0$.

La question est à présent de savoir si ρ s'écrit comme une fonction d'un opérateur et si l'on a une décomposition de ρ sur les fonctions propres généralisées de H .

Pour tout $k \in \mathbb{R}$, on définit

$$\Phi(., k) = W\Phi_0(., k)$$

qui est une fonction propre généralisée associée à l'opérateur H et à l'énergie k^2 :

$$H\Phi = HW\Phi_0 = WH_0\Phi_0 = k^2 W\Phi_0 = k^2 \Phi$$

où l'on a utilisé (1.10). Cela nous permet d'introduire la transformée de Fourier généralisée associée à l'opérateur H

$$Uu(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} u(x) \overline{\Phi}(x, k) dx$$

C'est une transformation unitaire sur $L^2(\mathbb{R})$ d'inverse

$$U^{-1}u(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} u(k) \Phi(x, k) dk$$

(voir [1]). D'autre part, on a $\forall u \in L^2(\mathbb{R})$

$$\begin{aligned} WU_0^{-1}u(x) &= W \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} u(k) \Phi_0(x, k) dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} u(k) W\Phi_0(x, k) dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} u(k) \Phi(x, k) dk \\ &= U^{-1}u(x) \end{aligned}$$

ce qui donne

$$W = U^{-1}U_0$$

On en déduit que

$$\begin{aligned}\rho &= W\rho_0W^* \\ &= U^{-1}U_0(U_0^{-1}f(k)U_0)U_0^{-1}U \\ &= U^{-1}f(k)U \\ &= f(K)\end{aligned}$$

où l'opérateur

$$K := U^{-1}kU$$

est le moment asymptotique. Donc ρ est bien une fonction d'un opérateur.

On trouve la décomposition sur les fonctions propres généralisées en reprenant les calculs fait pour H_0 :

$$(f(K)u, v) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}} f(k) \Phi(x, k) \overline{\Phi}(y, k) dk \right) u(y) dy \overline{v}(x) dx$$

et donc :

$$\rho(x, y) = f(K)(x, y) = \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}} f(k) \Phi(x, k) \overline{\Phi}(y, k) dk$$

On peut faire une remarque similaire à la Remarque 1.9, c'est à dire que la densité définie par

$$\varphi \in C(\overline{\Omega}) \mapsto Tr(\rho\varphi) \in \mathbb{C}.$$

est représentée par la fonction

$$n(x) = \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}} f(k) |\Phi(x, k)|^2 dk$$

1.2 Le problème

1.2.1 L'Hamiltonien

Dans ce travail, nous modélisons une diode de petite taille, présentant un potentiel à double barrière et comprise entre deux semi-conducteurs.

Le transport des électrons dans un semi-conducteur est modélisé par un système monodimensionnel de variable d'espace $x \in \mathbb{R}$. L'espace de Hilbert intervenant dans la mécanique quantique est donc $L^2(\mathbb{R})$. On travaille donc en domaine non borné. Ce choix de modélisation influe significativement sur les mathématiques du problème. Dans notre cas, nous nous intéressons à un composant électronique compris dans l'intervalle $[0, L]$, $L > 0$. En utilisant des conditions aux limites adaptées, nous verrons qu'il est possible de limiter l'étude à l'intervalle $[0, L]$.

La modélisation du transport des électrons dans le semi-conducteur se fait à l'aide de l'Hamiltonien :

$$H := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V, \quad V := V_0 + \mathcal{B} + V_{NL}, \quad (1.11)$$

où $\hbar$ est la constante de Planck et m est la masse effective de l'électron. Le potentiel extérieur donné par la somme $V_e = V_0 + \mathcal{B}$ est considéré fixé, représentant une contrainte physique imposée au système. Il fait intervenir la double barrière :

$$V_0 = v_0 \mathbf{1}_{[a_2, b_2]} + W,$$

où W est le puits :

$$W = -v_0 \mathbf{1}_{[a_3, b_3]},$$

et la différence de potentiel (bias) :

$$\mathcal{B} = -B \left(\frac{x - a_1}{b_1 - a_1} \mathbf{1}_{[a_1, b_1[} + \mathbf{1}_{[b_1, +\infty[} \right) \quad (1.12)$$

où les scalaires $v_0 \geq 0$ et $B \geq 0$, représentant respectivement l'amplitude de la différence de potentiel et l'amplitude de la barrière, sont exprimées en eV , et on a :

$$0 < a_1 < a_2 < a_3 < b_3 < b_2 < b_1 < L.$$

Les constantes a_1 et b_1 sont les deux extrémités de la diode.

Un exemple de potentiel V_e est représenté sur la figure Fig 1.1.

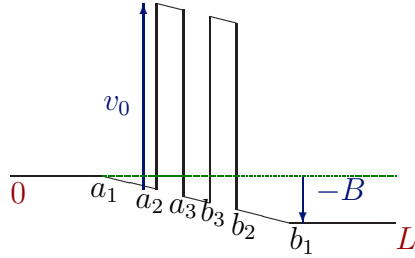


FIG. 1.1 – Exemple de potentiel extérieur V_e .

Pour le problème instationnaire, nous nous restreindrons au cas V_0 est constant et la partie $\mathcal{B}$ du potentiel donnée par (1.12) est telle que seulement le bias $B = B(t)$ dépend du temps.

La partie non linéaire du potentiel V_{NL} est due aux interactions de Coulomb. Elle est supportée sur $(0, L)$ et fait intervenir la densité de répartition des électrons.

1.2.2 Le cas stationnaire

Soit le problème non linéaire suivant :

$$\begin{cases} [H, \rho] = 0 \\ H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 + \mathcal{B} + V_{NL} & D(H) = H^2(\mathbb{R}) \\ -\frac{d^2}{dx^2} V_{NL} = \frac{q^2}{\varepsilon} (n(\rho) - n_D), & (0, L) \\ V_{NL}(0) = V_{NL}(L) = 0 \\ n(\rho)\varphi = \text{Tr}(\mathbf{1}_{[0,L]}\rho\mathbf{1}_{[0,L]}\varphi), & \forall \varphi \in C([0, L]) \end{cases} \quad (1.13)$$

où q est la charge élémentaire de l'électron, ε est la constante du diélectrique et n_D est la densité de dopage.

Dans notre cas, on prendra la densité de dopage suivante :

$$n_D = n_D^1(\mathbf{1}_{[0,a_1[} + \mathbf{1}_{]b_1,L]}) + n_D^2\mathbf{1}_{[a_1,b_1]},$$

où n_D^1 et n_D^2 sont des réels vérifiant $n_D^1 > n_D^2$ de telle sorte que le dopage du semi-conducteur soit plus important à l'extérieur de la diode qu'à l'intérieur. La densité de dopage est constante même dans le cas instationnaire.

La dernière égalité de (1.13) signifie que la mesure $n(\rho)$ est définie par le membre de droite. Voir également la Remarque 1.1.3 dans le cas d'un domaine borné.

Le problème qui nous intéresse est de trouver les solutions de (1.13) de la forme

$$\rho = f(K) \quad (1.14)$$

où K est le moment asymptotique, f est la fonction donnée par $f = 2\pi g$, g est la statistique de Fermi-Dirac définie par

$$g(k) = \frac{mk_B T}{2\pi^2 \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{k_B T} \right) \right), \quad (1.15)$$

k_B est la constante de Boltzmann, T est la température du semi-conducteur et E_F est le niveau de Fermi. La fonction g décrit la répartition des électrons selon la fréquence et son choix fait parti du modèle physique.

Le système considéré est hors équilibre (à ce sujet, voir [12] et les références qui s'y trouvent), c'est-à-dire que

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = 0 \neq \lim_{x \rightarrow +\infty} V(x) = -B \quad (1.16)$$

En tenant compte de ce fait et de ce qui a été dit dans la section 1.1.2, le problème (1.13)-(1.15) est équivalent au problème suivant : trouver $(\Phi_k)_{k \in \mathbb{R}}$ et V_{NL} tels que

$$\begin{cases} (-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 + \mathcal{B} + V_{NL})\Phi_k = E_k \Phi_k, & \mathbb{R} \\ -\frac{d^2}{dx^2} V_{NL} = \frac{q^2}{\varepsilon} (n - n_D), & (0, L) \\ V_{NL}(0) = V_{NL}(L) = 0 \\ n(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Phi_k(x)|^2 dk \end{cases} \quad (1.17)$$

où l'énergie E_k est définie par la relation de dispersion

$$E_k = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, & k \geq 0 \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - B, & k < 0 \end{cases} \quad (1.18)$$

les fonctions propres généralisées Φ_k vérifient

$$\text{pour } k \geq 0, \quad \begin{cases} \Phi_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, & x < 0 \\ \Phi_k(x) = t(k)e^{i\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}x}, & x > L \end{cases} \quad (1.19)$$

$$\text{pour } k < 0, \quad \begin{cases} \Phi_k(x) = t(k)e^{-i\sqrt{k^2 - 2mB/\hbar^2}x}, & x < 0 \\ \Phi_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, & x > L \end{cases} \quad (1.20)$$

et g est donnée par (1.15). Lorsque la quantité $k^2 - 2mB/\hbar^2$ est négative, on définira la racine apparaissant dans (1.20) à l'aide de la formule (1.26) que nous donnerons plus loin.

Pour la partie stationnaire de ce chapitre, on travaillera avec le problème (1.17).

Remarque 1.2.1. Plus il y a d'électrons dans le dispositif $[0, L]$, plus la densité n est élevée dans cet intervalle, donc plus le potentiel V_{NL} est élevé et plus les électrons sont repoussés hors de l'intervalle, V_{NL} étant positif.

C'est en ce sens que V_{NL} modélise l'interaction entre les électrons.

L'existence de solutions du problème (1.17)-(1.20) est démontrée dans [6]. Dans le cas hors équilibre, c'est-à-dire $B \neq 0$, on n'a pas l'unicité de la solution. On l'observe numériquement à l'aide de diagrammes d'hystérésis dans le Chapitre 3. Cependant, dans le cas $B = 0$, l'existence et l'unicité de la solution est donnée par [34].

1.2.3 Le cas instationnaire

Le problème instationnaire correspondant à (1.13) est

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\rho = [H, \rho] & (0, +\infty) \\ \rho(0) = \rho_I \\ H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_0 + \mathcal{B} + V_{NL} & D(H) = H^2(\mathbb{R}) \\ -\partial_x^2 V_{NL} = \frac{q^2}{\varepsilon}(n(\rho) - n_D), & (0, L) \times (0, +\infty) \\ V_{NL}|_{x=0} = V_{NL}|_{x=L} = 0 \\ n(\rho)\varphi = \text{Tr}(\mathbf{1}_{[0,L]}\rho\mathbf{1}_{[0,L]}\varphi), & \forall \varphi \in C([0, L]) \end{cases} \quad (1.21)$$

où q , ε et n_D sont comme dans la section 1.2.2.

Dans ce travail, nous considérerons le cas où ρ_I est solution du problème (1.13)-(1.15) en faisant la substitution $V_0 = V_0|_{t=0}$ et $\mathcal{B} = \mathcal{B}|_{t=0}$. Alors, ρ_I se décompose de la façon suivante :

$$\rho_I(x, y) = \int_{\mathbb{R}} g(k) \Phi_k(x) \overline{\Phi_k}(y) dk$$

où les fonctions propres généralisées Φ_k , $k \in \mathbb{R}$ sont définies par (1.17)-(1.20).
Si l'on note $U(t)u_0$ la solution du problème :

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t u = Hu \\ u_{t=0} = u_0 \end{cases}$$

la formule (1.1) décrivant l'évolution de la matrice densité est remplacée par

$$\rho(t) = U(t)\rho_I U(t)^*$$

et l'équation (1.6) donnant son noyau est remplacée par :

$$\rho(x, y, t) = \int_{\mathbb{R}} g(k) \Psi_k(x, t) \overline{\Psi_k(y, t)} dk$$

où

$$\Psi_k(., t) = U(t)\Phi_k$$

On en déduit que pour ρ_I solution de (1.13)-(1.15), le problème (1.21) est équivalent à trouver $(\Psi_k)_{k \in \mathbb{R}}$ et V_{NL} tels que

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t \Psi_k = (-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_0 + \mathcal{B} + V_{NL})\Psi_k, & \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ \Psi_k(., 0) = \Phi_k \\ -\partial_x^2 V_{NL} = \frac{q^2}{\varepsilon}(n - n_D), & (0, L) \times (0, +\infty) \\ V_{NL}|_{x=0} = V_{NL}|_{x=L} = 0 \\ n(x, t) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Psi_k(x, t)|^2 dk \end{cases} \quad (1.22)$$

où les Φ_k , $k \in \mathbb{R}$ sont définies par (1.17)-(1.20).

1.3 Spectre de l'Hamiltonien

L'Hamiltonien apparaissant dans le problème (1.13) peut s'écrire :

$$H = H_1 + V_1 \quad (1.23)$$

où

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - B\mathbf{1}_{[b_1, +\infty[} \quad \text{et} \quad V_1 = V + B\mathbf{1}_{[b_1, +\infty[} \quad (1.24)$$

avec V_1 borné à support compact.

Le potentiel $-B\mathbf{1}_{[b_1, +\infty[}$ étant une perturbation symétrique bornée de $H_0 := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$, l'opérateur H_1 de domaine $H^2(\mathbb{R})$ est auto-adjoint. D'autre part, $H_1 \geq -B$ implique

$$\sigma(H_1) \subset [-B, +\infty[$$

On montre $[-B, +\infty[\subset \sigma_{ess}(H_1)$. En effet, $\forall \lambda > -B$ la suite $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie par

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{u}_n(\xi) e^{i\xi x} d\xi, \quad \hat{u}_n(\xi) = \left(n\sqrt{\frac{2}{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-n^2(\xi - \xi_0)^2}$$

où $\frac{\hbar^2}{2m}\xi_0^2 = \lambda + B$ est une suite telle que $u_n \in D(H_0)$, $\|u_n\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1$, u_n tend faiblement vers 0 dans $L^2(\mathbb{R})$ et $\|(H_0 - (\lambda + B))u_n\|_{L^2(\mathbb{R})} \rightarrow 0$ lorsque $n \rightarrow +\infty$. C'est-à-dire que $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de Weyl pour H_0 et $\lambda + B$, [25]. Alors, la suite $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie par

$$v_n(x) = u_n(x - \alpha_n), \quad \alpha_n = n^\gamma, \gamma > 1$$

est une suite de Weyl pour H_1 et λ . Le critère de Weyl, [25], implique que $\lambda \in \sigma_{ess}(H_1)$ et le spectre essentiel étant fermé :

$$[-B, +\infty[\subset \sigma_{ess}(H_1)$$

On en déduit $\sigma(H_1) = \sigma_{ess}(H_1) = [-B, +\infty[$.

Remarque 1.3.1. On peut voir que $(v_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de Weyl pour H_1 et λ en remarquant que la masse de v_n part en l'infini, où le potentiel $-B\mathbf{1}_{[b_1, +\infty[}$ vaut $-B$. Cela rejoint l'idée que le spectre essentiel est décrit par le comportement du potentiel à l'infini. Cette même idée permet de caractériser le spectre essentiel d'opérateurs localement compacts tels que H_1 , en utilisant des suites de Zhislin, qui sont des suites de Weyl dont le support sort de toute boule, [25].

Le potentiel V_1 étant borné à support compact, l'opérateur $V_1(H_1 - z)^{-1}$ est compact pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$ (c'est une conséquence du Corollaire 1.5.2 et de la relation (1.30) que nous donnerons dans la section 1.5.1). On en déduit que l'opérateur symétrique V_1 est H_1 -relativement compact, H est auto-adjoint de domaine $D(H_1)$ et par le théorème de Weyl $\sigma_{ess}(H) = \sigma_{ess}(H_1) = [-B, +\infty[$. L'auto-adjointeté impliquant que le spectre est réel, on a :

$$\sigma_{ess}(H) \subset \sigma(H) \subset \mathbb{R}$$

et

$$\sigma(H) = [-B, +\infty[\cup \{\varepsilon_i, i \geq 1\}$$

où les $(\varepsilon_i)_{i \geq 1}$ sont les éventuelles valeurs propres $\leq -B$ de H . Comme $H \geq -B$, on a

$$\sigma(H) = \sigma_{ess}(H) = [-B, +\infty[$$

1.4 A propos de la racine complexe

Pour α réel, la définition de x^α ne pose pas de problème lorsque $x \in \mathbb{R}_+^*$. Cependant, la fonction importante pour l'étude des quantités spectrales décrivant notre problème est la résolvante

$$(H - z)^{-1}$$

Comme nous le verrons dans la section suivante, en dimension 1, celle-ci fait intervenir la racine du paramètre spectral $z \in \mathbb{C}$.

Pour cela, nous allons donner quelques éléments sur la définition de la fonction

$z \mapsto z^{1/2}$ pour z complexe.

La détermination principale de la racine complexe est l'unique solution holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-$ de l'équation différentielle avec condition initiale

$$\begin{cases} z f'(z) = \frac{1}{2} f(z) \\ f(1) = 1 \end{cases}$$

On remarquera que l'on peut définir z^α , pour $\alpha \in \mathbb{C}$, de la même manière en remplaçant le coefficient $\frac{1}{2}$ par α dans l'équation différentielle ci-dessus, voir [42].

La racine obtenue peut s'exprimer comme suit : $\forall z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-$

$$z = \rho e^{i\theta}, \rho > 0, \theta \in (-\pi, \pi) \quad \text{et} \quad z^{1/2} = \sqrt{\rho} e^{i\frac{\theta}{2}} \quad (1.25)$$

Si l'on considère le chemin

$$\begin{aligned} \gamma : [0, 1] &\rightarrow \mathbb{C} \\ t &\mapsto e^{i\pi(2t-1)} \end{aligned}$$

Alors, on remarque que

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \gamma(t)^{1/2} = -i \neq \lim_{t \rightarrow 2\pi^-} \gamma(t)^{1/2} = i$$

Donc, la racine ne peut pas être prolongée en une fonction uniforme holomorphe sur tout $\mathbb{C}$. La donnée de l'ensemble des prolongements analytiques directs de $z^{1/2}$, et des prolongements de ces prolongements, définit une fonction multiforme sur $\mathbb{C}^*$ déterminée par l'équation (1.25) et l'ouvert $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-$.

L'appellation multiforme vient du fait que $\forall z \in \mathbb{C}^*$, si l'on prolonge la racine le long du lacet $ze^{2i\pi t}$, on arrive au même point de $\mathbb{C}^*$ mais la fonction a une valeur différente.

C'est une fonction régulière à condition de considérer qu'un point, après avoir fait un tour, n'est plus le même point autorisant ainsi la fonction à prendre une valeur différente. Pour cela, on considère que la fonction est définie sur des feuillets de Riemann qui sont des reproductions de $\mathbb{C}^*$ superposées les unes sur les autres et recollées au niveau de la coupure $\mathbb{R}_-$ de la racine. Une reproduction est associée à chaque valeur possible de la racine. La racine est alors considérée comme une fonction uniforme et holomorphe sur la surface de Riemann ainsi constituée.

Toute fonction holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-$, qui est un prolongement analytique de la racine $z^{1/2}$ donnée par (1.25), vaut $z^{1/2}$ ou bien $-z^{1/2}$. On dit que la racine a deux déterminations possibles. On peut donc associer deux feuillets à la racine complexe. Tourner le long d'un chemin entourant 0 permet de changer de feuillet et en effectuant deux tours, on revient au feuillet de départ.

Dans ce travail, nous nous intéresserons à la racine à partie imaginaire positive que nous noterons $\sqrt{z}$. Elle correspond à l'unique solution holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$ du problème

$$\begin{cases} z f'(z) = \frac{1}{2} f(z) \\ f(-1) = i \end{cases}$$

Elle peut s'expliciter comme suit : $\forall z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$

$$z = \rho e^{i\theta}, \rho > 0, \theta \in (0, 2\pi) \quad \text{et} \quad \sqrt{z} = \sqrt{\rho} e^{i\frac{\theta}{2}} \quad (1.26)$$

Comme pour la détermination principale, on obtient une fonction multiforme sur $\mathbb{C}^*$ à laquelle on peut associer deux feuillets. La coupure de $\sqrt{z}$ est la droite $\mathbb{R}_+$. Le spectre de l'opérateur $-\Delta$ sur $\mathbb{R}^d$, $d \geq 1$, est $\sigma(-\Delta) = \mathbb{R}_+$. Alors la résolvante $(-\Delta - z)^{-1}$ est analytique sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$ à valeur opérateur et singulière sur la droite $\mathbb{R}_+$. Pour toute fonction cut-off $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, la fonction $\chi(-\Delta - z)^{-1}\chi$ est prolongeable analytiquement à partir de son domaine de définition. Dans le cas des dimensions d'espace impaires, on obtient une fonction multiforme avec deux feuillets. Ce comportement est similaire à celui décrit ci-dessus pour $\sqrt{z}$ défini par (1.26). Cela paraît naturel pour $d = 1$ et $d = 3$, vu que les formules de la résolvante font intervenir la racine :

$$(-\Delta - z)^{-1}u(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{ie^{i\sqrt{z}|x-y|}}{2\sqrt{z}} u(y) dy, \quad d = 1 \quad (1.27)$$

$$(-\Delta - z)^{-1}u(x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\sqrt{z}|x-y|}}{4\pi|x-y|} u(y) dy, \quad d = 3$$

Pour $d = 2$, on a

$$(-\Delta - z)^{-1}u(x) = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{i}{4} H_0^{(1)}(z|x-y|) u(y) dy$$

où $H_0^{(1)}$ est une fonction de Hankel. Le comportement de la fonction obtenue est donné par celui du logarithme qui est une fonction multiforme vérifiant l'équation suivante :

$$\ln(\rho e^{i\theta}) = \ln(\rho) + i\theta$$

On voit qu'à chaque fois que l'on fait un tour, la fonction a une détermination différente et donc le logarithme a une infinité de feuillets. Il en est de même de la résolvante en dimension 2. De façon plus générale, dans le cas des dimensions d'espace paires, la fonction $\chi(-\Delta - z)^{-1}\chi$ est une fonction multiforme avec une infinité de feuillets.

Comme cela est observé dans [24], pour $H = -\Delta + V$, V à support compact régulier, le comportement de la résolvante du Laplacien, décrit ci-dessus, est toujours valide pour

$$\chi(H - z)^{-1}\chi$$

où χ est telle que $V\chi = \chi$. L'opérateur de référence donne bien le comportement de l'opérateur complet, nous décrirons cela plus en détail dans la section suivante pour notre problème en utilisant la décomposition (1.23).

1.5 Scattering, notion de résonance

1.5.1 Prolongement de la résolvante

Dans cette section nous allons étudier la possibilité de définir la résolvante

$$R(z) = (H - z)^{-1} \quad (1.28)$$

de l'opérateur H , donné par (1.11), sur la demi-droite $[-B, +\infty[$ où elle est singulière. Nous allons d'abord effectuer ce prolongement pour la résolvante

$$(H_1 - z)^{-1}$$

de l'opérateur H_1 donné par (1.24). Ensuite, l'équation (1.23) permet de déduire le prolongement de $R(z)$ par perturbation.

Résolvante de l'opérateur linéaire

On note que l'opérateur H_1 est unitairement équivalent à l'opérateur $(-\frac{d^2}{dx^2} + V_-)$ où

$$V_- = -B\mathbf{1}_{[0, +\infty[}$$

par la transformation

$$U\psi(x) = \frac{1}{h^{1/2}}\psi\left(\frac{x - b_1}{h}\right) \quad \text{où} \quad h^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (1.29)$$

D'autre part, on a :

$$R_1(z) := \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_- - z\right)^{-1} = U^{-1}(H_1 - z)^{-1}U \quad (1.30)$$

et donc les résultats obtenus pour $R_1(z)$ seront applicables à $(H_1 - z)^{-1}$.

Pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$ et pour tout $y \in \mathbb{R}$, la résolution du problème :

$$-\frac{d^2}{dx^2}u + V_-u - zu = \delta(x - y) \quad (1.31)$$

avec la condition en l'infini

$$\lim_{|x| \rightarrow +\infty} u(x) = 0 \quad (1.32)$$

permet d'expliciter le noyau $G_1(z; x, y)$ de R_1 comme cela est fait dans [36] pour le cas de notre problème et dans [16] pour le cas général. Or, le problème (1.31) est équivalent au problème de transmission :

$$-\frac{d^2}{dx^2}u + V_-u - zu = 0 \quad \text{sur} \quad \mathbb{R} \setminus \{y\} \quad (1.33)$$

avec les conditions de saut :

$$\begin{cases} u(y^+) = u(y^-) \\ u'(y^+) - u'(y^-) = -1 \end{cases} \quad (1.34)$$

On introduit alors les fonctions u_- et u_+ définies par :

$$u_-(x) = \begin{cases} e^{i\sqrt{z}x} + r_-(z)e^{-i\sqrt{z}x}, & x \leq 0 \\ t_-(z)e^{i\sqrt{z+B}x}, & x > 0 \end{cases} \quad (1.35)$$

et

$$u_+(x) = \begin{cases} t_+(z)e^{-i\sqrt{z}x}, & x \leq 0 \\ e^{-i\sqrt{z+B}x} + r_+(z)e^{i\sqrt{z+B}x}, & x > 0 \end{cases}$$

où les coefficients $r_{\pm}(z)$ et $t_{\pm}(z)$ sont choisis pour que u_- et u_+ soient C^1 en 0, $\sqrt{z}$ étant la racine définie par (1.26). La famille $\{u_-, u_+\}$ forme une base de l'ensemble des solutions de l'équation sans second membre. En effet, on vérifie aisément qu'elles sont solutions et que leur Wronskien est différent de 0 : $\forall x \in \mathbb{R}$

$$W(u_-, u_+)(x) = W(u_-, u_+)(0) = \begin{vmatrix} u_-(0) & u_+(0) \\ u'_-(0) & u'_+(0) \end{vmatrix} = -it_-(z)t_+(z)(\sqrt{z} + \sqrt{z+B}) \neq 0$$

On en déduit qu'une solution de (1.33) s'écrit à l'aide de $\{u_-, u_+\}$ sur $(-\infty, y)$ et sur $(y, +\infty)$. Les conditions (1.32) et (1.34) donnent alors que la solution du problème (1.31)(1.32) est

$$G_1(x, y; z) = \frac{1}{W(u_-, u_+)}(u_-(y)u_+(x)\mathbf{1}_{x \leq y} + u_+(x)u_-(y)\mathbf{1}_{x > y}) \quad (1.36)$$

La proposition ci-dessous montre en quoi la fonction (1.36) permet de définir la résolvante $R_1(z)$.

Proposition 1.5.1. *Soit $z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$ et G_1 la fonction définie par (1.36), alors l'application linéaire*

$$u \mapsto \int_{\mathbb{R}} G_1(x, y; z)u(y)dy \quad (1.37)$$

est continue de $L^2(\mathbb{R})$ dans $L^2(\mathbb{R})$ et $\forall u \in L^2(\mathbb{R})$, on a

$$R_1(z)u(x) = \int_{\mathbb{R}} G_1(x, y; z)u(y)dy$$

Preuve. Notons A l'application définie par (1.37), à partir de la formule explicite de G_1 , on obtient :

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |G_1(x, y; z)|dy \leq C, \quad \text{et} \quad \sup_{y \in \mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |G_1(x, y; z)|dx \leq C$$

pour une constante $C > 0$. Le Lemme de Schur, voir [30], donne alors

$$\|A\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))} \leq \left(\sup_{x \in \mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |G_1(x, y; z)| dy \right)^{1/2} \left(\sup_{y \in \mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |G_1(x, y; z)| dx \right)^{1/2} \leq C$$

où $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ désigne l'espace des applications linéaires et continues de $L^2(\mathbb{R})$ dans $L^2(\mathbb{R})$. Ce qui donne le premier résultat annoncé.

D'autre part, en utilisant le théorème de Fubini, on a $\forall u, v \in \mathcal{D}(\mathbb{R})$:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{d^2}{dx^2} Au, v \right)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x} &= \left(Au, -\frac{d^2}{dx^2} v \right)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} G_1(x, y; z) u(y) dy \right) \left(-\frac{d^2}{dx^2} v(x) \right) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} G_1(x, y; z) \left(-\frac{d^2}{dx^2} v(x) \right) dx \right) u(y) dy \\ &= \left((G_1(\cdot, z), -\frac{d^2}{dx^2} v)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x}, u \right)_{\mathcal{D}'_y, \mathcal{D}_y} \\ &= \left(\left(-\frac{d^2}{dx^2} G_1(\cdot, z), v \right)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x}, u \right)_{\mathcal{D}'_y, \mathcal{D}_y} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} ((V_- - z)Au, v)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x} &= \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} (V_-(x) - z) G_1(x, y; z) v(x) u(y) dx dy \\ &= \left(((V_- - z)G_1(\cdot, z), v)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x}, u \right)_{\mathcal{D}'_y, \mathcal{D}_y} \end{aligned}$$

En utilisant, le fait que G_1 défini par (1.36) est solution de (1.31), on en déduit :

$$\begin{aligned} \left(\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_- - z \right) Au, v \right)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x} &= \left(\left(\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_- - z \right) G_1(\cdot, z), v \right)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x}, u \right)_{\mathcal{D}'_y, \mathcal{D}_y} \\ &= \left(((\delta(x - y), v)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x}, u)_{\mathcal{D}'_y, \mathcal{D}_y} \right) \\ &= (u, v)_{\mathcal{D}'_x, \mathcal{D}_x} \end{aligned}$$

Par conséquent, on a $\forall u \in \mathcal{D}(\mathbb{R})$

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_- - z \right) Au = u, \quad \mathcal{D}'(\mathbb{R}) \quad (1.38)$$

Par densité de $\mathcal{D}(\mathbb{R})$ dans $L^2(\mathbb{R})$, l'équation (1.38) est également valable $\forall u \in L^2(\mathbb{R})$ et donc $A = R_1(z)$. ■

Pour $z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$, on vérifie que $G_1(x, y; z) \notin L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R})$ et donc $R_1(z)$ n'est pas Hilbert-Schmidt. On a même que $R_1(z)$ n'est pas compact. C'est un comportement similaire à la résolvante du Laplacien qui est compacte en domaine borné mais non compacte sur un domaine non borné. Cependant, on a le résultat utile suivant :

Corollaire 1.5.2. *Soit $z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$ et $W \in L^\infty$ à support compact, alors l'opérateur $WR_1(z)$ est compact.*

Preuve. On déduit de la Proposition 1.5.1 que le noyau de l'opérateur $WR_1(z)$ est :

$$W(x)G_1(x, y; z)$$

Or W étant L^∞ à support compact, on montre à partir de la formule (1.36) que

$$\|W(x)G_1(x, y; z)\|_{L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R})} < +\infty$$

Par conséquent, $WR_1(z)$ est Hilbert-Schmidt et donc compact. ■

Vers le principe d'absorbtion limite

On va rendre l'opérateur $R_1(z)$ plus régulier par rapport à z en restreignant son domaine de définition à des fonctions de $L^2(\mathbb{R})$ décroissant polynomialement et en l'autorisant à prendre ses valeurs dans un ensemble de fonctions $L^2(\mathbb{R})$ croissant polynomialement. Plus concrètement, si pour $\gamma > 0$, on définit

$$L_\gamma^2(\mathbb{R}) = \{f; \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \langle x \rangle^\gamma dx < +\infty\}$$

où

$$\langle x \rangle = (1 + x^2)^{1/2}$$

pour tout $s > 1/2$, on a

$$L_{2s}^2 \subset L^2(\mathbb{R}) \subset L_{-2s}^2$$

avec injection continue. Alors, pour $z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$, $R_1(z)$ étant un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R})$, il peut être considéré comme un élément de $\mathcal{L}(L_{2s}^2, L_{-2s}^2)$. Nous souhaitons travailler avec le noyau (1.36) de $R_1(z)$, pour cela nous allons introduire la notion d'opérateur Hilbert-Schmidt entre deux espaces de Hilbert comme cela est fait dans [43].

Définition 1.5.3. Soient $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}_2$ deux espaces de Hilbert séparables. On définit l'espace $S(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ des opérateurs Hilbert-Schmidt de $\mathcal{H}_1$ dans $\mathcal{H}_2$ par :

$$S(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2) = \{A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2); \sum_{n \geq 1} \|A\phi_n\|^2 < +\infty\}$$

où $(\phi_n)_{n \geq 1}$ est une base orthonormée de $\mathcal{H}_1$.

On a alors le théorème suivant qui va nous permettre de travailler avec les noyaux :

Théorème 1.5.4. Si $\mathcal{H}_i = L^2(M_i, \mu_i)$ où (M_i, μ_i) est un espace mesuré, alors $A \in S(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ si et seulement si il existe un noyau $K \in L^2(M_2 \times M_1, \mu_2 \otimes \mu_1)$ tel que :

$$\forall u \in \mathcal{H}_1, \quad Au(x) = \int_{M_1} K(x, y)u(y)d\mu_1(y)$$

D'autre part, si on pose

$$\|A\|_{S(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)}^2 = \sum_{n \geq 1} \|A\phi_n\|^2 \quad (1.39)$$

on a :

$$\|A\|_{S(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)} = \|K\|_{L^2(M_2 \times M_1, \mu_2 \otimes \mu_1)}$$

Dans notre cas, on a remarqué que, pour $z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$, $R_1(z) \in \mathcal{L}(L_{2s}^2, L_{-2s}^2)$ où $L_\gamma^2 = L^2(\mathbb{R}, \langle x \rangle^\gamma dx)$ et donc on peut se demander si il existe $K \in L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}, \langle x \rangle^{-2s} dx \otimes \langle y \rangle^{2s} dy)$ tel que

$$R_1(z)u(x) = \int_{\mathbb{R}} K(x, y)u(y)\langle y \rangle^{2s} dy$$

Or d'après la Proposition 1.5.1, on a

$$\begin{aligned} R_1(z)u(x) &= \int_{\mathbb{R}} G_1(x, y; z)u(y)dy \\ &= \int_{\mathbb{R}} (G_1(x, y; z)\langle y \rangle^{-2s})u(y)\langle y \rangle^{2s}dy \end{aligned}$$

D'autre part, on a

$$\begin{aligned} \|G_1(x, y; z)\langle y \rangle^{-2s}\|_{L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}, \langle x \rangle^{-2s} dx \otimes \langle y \rangle^{2s} dy)}^2 &= \int_{\mathbb{R}^2} |G_1(x, y; z)\langle y \rangle^{-2s}|^2 \langle x \rangle^{-2s} \langle y \rangle^{2s} dx dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} |G_1(x, y; z)|^2 \langle x \rangle^{-2s} \langle y \rangle^{-2s} dx dy \end{aligned} \quad (1.40)$$

On vérifie à partir de (1.36) que $G_1(\cdot; z) \in L^\infty(\mathbb{R}^2)$ et donc que la quantité (1.40) est finie. On en déduit que $R_1(z)$, en tant qu'opérateur de L_{2s}^2 dans L_{-2s}^2 , admet pour noyau la fonction $G_1(x, y; z)\langle y \rangle^{-2s}$ qui appartient à $L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}, \langle x \rangle^{-2s} dx \otimes \langle y \rangle^{2s} dy)$. Alors le Théorème 1.5.4 donne

$$R_1(z) \in S(L_{2s}^2, L_{-2s}^2), \quad \forall z \in \mathbb{C} \setminus [-B, +\infty[$$

La relation (1.40) joue un rôle important puisque les poids polynomiaux vont nous permettre de définir la résolvante sur l'axe $[-B, +\infty[$. Pour alléger les notations, nous poserons :

$$S = S(L_{2s}^2, L_{-2s}^2)$$

et

$$L_{-2s, 2s}^2(\mathbb{R}^2) = L^2(\mathbb{R} \times \mathbb{R}, \langle x \rangle^{-2s} dx \otimes \langle y \rangle^{2s} dy)$$

Présentons le résultat suivant tiré de [36].

Proposition 1.5.5. *Si l'on pose*

$$\mathbb{C}^+ := \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Im} z > 0\} \quad \text{et} \quad \mathbb{C}^- := \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Im} z < 0\}$$

alors l'application

$$z \mapsto R_1(z)$$

définie sur $\mathbb{C}^+$ (resp. sur $\mathbb{C}^-$) à image dans S se prolonge en une application continue sur $\overline{\mathbb{C}^+} \setminus \{-B, 0\}$ (resp. sur $\overline{\mathbb{C}^-} \setminus \{-B, 0\}$) à image dans S .

Pour simplifier les calculs, nous ferons la preuve avec la résolvante

$$R_0(z) := \left(-\frac{d^2}{dx^2} - z\right)^{-1}$$

Cependant, le même procédé permet de montrer le résultat pour $R_1(z)$.

Preuve. Comme nous l'avons donné en (1.27), on a $\forall z \in \mathbb{C} \setminus [0, +\infty[$:

$$R_0(z)u(x) = \int_{\mathbb{R}} G_0(x, y; z)u(y)dy$$

où

$$G_0(x, y; z) = -\frac{e^{i\sqrt{z}|x-y|}}{2i\sqrt{z}}$$

et $\sqrt{z}$ est la racine définie par (1.26). On pose

$$\Omega = \overline{\mathbb{C}^+} \setminus \{0\}$$

et pour tout $z \in \Omega$, on définit la fonction

$$\tilde{G}_0(x, y; z) = \begin{cases} G_0(x, y; z), & z \in \Omega \setminus (0, +\infty) \\ -\frac{e^{i\sqrt{z}|x-y|}}{2i\sqrt{z}}, & z \in (0, +\infty) \end{cases} \quad (1.41)$$

où $\sqrt{z}$ désigne la racine usuelle lorsque $z \in (0, +\infty)$. La relation (1.40) implique que le noyau $\tilde{G}_0(x, y; z)\langle y \rangle^{-2s}$ permet de définir un élément de S à l'aide du Théorème 1.5.4. On notera $\tilde{R}_0(z)$ cet élément. Soit $z_0 \in \Omega$, on a $\forall z \in \Omega$

$$\begin{aligned} \|\tilde{R}_0(z_0) - \tilde{R}_0(z)\|_S^2 &= \|\tilde{G}_0(x, y; z_0)\langle y \rangle^{-2s} - \tilde{G}_0(x, y; z)\langle y \rangle^{-2s}\|_{L^2_{-2s, 2s}(\mathbb{R}^2)}^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} |\tilde{G}_0(x, y; z_0) - \tilde{G}_0(x, y; z)|^2 \langle x \rangle^{-2s} \langle y \rangle^{-2s} dx dy \end{aligned}$$

Pour montrer la continuité, on va regarder la limite $z \rightarrow z_0$, on peut donc supposer que $z \in B(z_0, \frac{|z_0|}{2})$. Cela implique que $|z| \geq \frac{|z_0|}{2}$ et donc $\forall (x, y) \in \mathbb{R}^2$

$$\begin{aligned} |\tilde{G}_0(x, y; z_0) - \tilde{G}_0(x, y; z)|^2 \langle x \rangle^{-2s} \langle y \rangle^{-2s} &\leq C \left(\frac{e^{-2\operatorname{Im} \sqrt{z_0}|x-y|}}{|z_0|} + \frac{e^{-2\operatorname{Im} \sqrt{z}|x-y|}}{|z|} \right) \langle x \rangle^{-2s} \langle y \rangle^{-2s} \\ &\leq C \left(\frac{1}{|z_0|} + \frac{2}{|z_0|} \right) \langle x \rangle^{-2s} \langle y \rangle^{-2s} \end{aligned}$$

Le membre de droite de la dernière inégalité appartient à $L^1(\mathbb{R}^2)$ et ne dépend pas de z . A l'aide du théorème de la convergence dominée et de la continuité de $z \rightarrow \tilde{G}_0(x, y; z)$ sur Ω , on obtient alors que $\forall z_0 \in \Omega$

$$\lim_{\substack{z \rightarrow z_0 \\ z \in \Omega}} \|\tilde{R}_0(z_0) - \tilde{R}_0(z)\|_S = 0$$

D'autre part, $\forall z \in \Omega \setminus (0, +\infty)$, on a

$$\begin{aligned}\tilde{R}_0(z)u(x) &= \int_{\mathbb{R}} \tilde{G}_0(x, y; z) \langle y \rangle^{-2s} u(y) \langle y \rangle^{2s} dy = \int_{\mathbb{R}} \tilde{G}_0(x, y; z) u(y) dy \\ &= \int_{\mathbb{R}} G_0(x, y; z) u(y) dy = R_0(z)u(x)\end{aligned}$$

Alors, $\tilde{R}_0(z)$ est continue à valeur dans S sur Ω et coïncide avec $R_0(z)$ sur $\Omega \setminus (0, +\infty)$. C'est le prolongement que l'on cherchait.

De la même façon, on obtient le prolongement pour les complexes à partie imaginaire négative à l'aide de la fonction :

$$\tilde{G}_0(x, y; z) = \begin{cases} G_0(x, y; z), & z \in \overline{\mathbb{C}^-} \setminus [0, +\infty) \\ \frac{e^{-i\sqrt{z}|x-y|}}{2i\sqrt{z}}, & z \in (0, +\infty) \end{cases} \quad (1.42)$$

■

Remarque 1.5.6. En comparant (1.41) et (1.42), on voit que le prolongement à $(0, +\infty)$ n'est pas le même si l'on part du demi-plan supérieur ou du demi-plan inférieur. On ne peut donc pas espérer avoir un prolongement continu à tout $\mathbb{C} \setminus \{0\}$. Pour remédier à cela on fera intervenir la notion de feuillet de Riemann pour la résolvante.

Corollaire 1.5.7. *Le résultat de la Proposition 1.5.5 est valable en remplaçant $R_1(z)$ par la résolvante $R(z)$ définie par (1.28).*

Preuve. Nous donnons seulement les idées directrices de la preuve.

D'abord, on note que l'égalité (1.30) permet de prolonger la résolvante

$$(H_1 - z)^{-1}$$

Ensuite, l'opérateur H vérifiant (1.23), la deuxième identité de la résolvante donne :

$$(H - z)^{-1} = (H_1 - z)^{-1}(I + V_1(H_1 - z)^{-1})^{-1}$$

et il est possible de déduire la régularité de $(H - z)^{-1}$ à partir de celle de $(H_1 - z)^{-1}$.

■

Remarque 1.5.8. Le prolongement de $R(z)$ donné par le Corollaire 1.5.7 est défini sur $(-B, +\infty) \setminus \{0\}$, mais rien n'assure que l'opérateur conserve la propriété de résolvante. C'est la principe d'absorption limite qui donne le résultat, c'est-à-dire que l'on a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V - z\right) R(z)u = u, \quad \forall z \in (-B, +\infty) \setminus \{0\}$$

dans des espaces fonctionnels bien choisis. Nous nous en référons à [1] sur ce sujet.

Comme nous allons le voir dans la section suivante, on peut pousser le prolongement de la résolvante et traverser l'axe des abscisses. C'est là où l'on va trouver les résonances.

1.5.2 Définition des résonances et propriétés

Sur le plan complexe usuel, dit feuillet "physique", la résolvante est holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$. Alors que les résonances sont des complexes à partie imaginaire négative et proche de l'axe $\mathbb{R}_+$. Elles n'apparaissent donc pas dans le spectre de l'opérateur mais on pourra tout de même les voir comme des valeurs propres.

Il est possible de donner un sens au prolongement analytique de la résolvante en dehors de son domaine de définition. Lorsque l'on prolonge la résolvante de la partie supérieure du plan complexe à la partie inférieure du plan complexe à travers l'axe des réels positifs, on traverse la coupure de la résolvante en tant que fonction multiforme et on change de feuillet de Riemann pour atteindre le second feuillet dit "feuillet non physique". La fonction ainsi prolongée est méromorphe et a des pôles qui sont les résonances.

Définition dans le cas régulier

L'article de Aguilar et Combes [2] est un document fondateur sur la théorie des résonances. Il a permis de définir les résonances et de les voir comme des valeurs propres. Bien que le potentiel V de notre problème n'ai pas la régularité suffisante, nous nous placerons dans le cadre de cet article pour définir les résonances. Nous en déduirons une définition dans le cadre de notre problème.

Soit $H_0 = -\frac{d^2}{dx^2}$, $D(H_0) = H^2(\mathbb{R})$ et V un potentiel H_0 -compact, on cherche à définir les résonances de l'opérateur

$$H = H_0 + V$$

Soit le groupe de dilatation analytique sur $L^2(\mathbb{R})$ défini par

$$U_\theta f(x) = e^{\frac{\theta}{2}} f(e^\theta x), \quad \theta \in \mathbb{R}, f \in L^2(\mathbb{R})$$

Alors on suppose que V est suffisamment régulier pour que le potentiel

$$V_\theta := U_\theta V U_\theta^{-1}, \quad \theta \in \mathbb{R}$$

admette un prolongement analytique à un ouvert connexe $\mathcal{O} \subset \mathbb{C}$ avec image H_0 -relativement compact. On peut toujours supposer que

$$\mathcal{O} \subset \{|\operatorname{Im} \theta| \leq a\}$$

avec $a < \frac{\pi}{4}$.

On peut à présent introduire la notion de résonance :

Définition 1.5.9. Soit $\mathcal{A}$ l'ensemble dense des vecteurs $f \in L^2(\mathbb{R})$ tels que $U_\theta f$ peut être prolongé analytiquement à $\mathbb{C}$. Alors, les résonances de H sont les pôles du prolongement méromorphe de toutes les fonctions

$$z \mapsto ((H - z)^{-1} f, g), \quad f, g \in \mathcal{A}$$

de

$$\mathbb{C}^{++} = \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Re} z > 0, \operatorname{Im} z > 0\}$$

à

$$\mathbb{C}^{+-} = \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Re} z > 0, \operatorname{Im} z < 0\} \quad (1.43)$$

Nous donnons ci-dessous la démonstration de l'existence du prolongement méromorphe clarifiant ainsi la notion de pôle du prologement. Fixons $z \in \mathbb{C}^{++}$. Si l'on note

$$H_\theta := U_\theta H U_\theta^{-1}$$

on a pour $\theta \in \mathbb{R}$

$$(H_\theta - z)^{-1} = U_\theta (H - z)^{-1} U_\theta^{-1}$$

ce qui permet d'écrire

$$((H - z)^{-1} f, g) = ((H_\theta - z)^{-1} U_\theta f, U_\theta g)$$

D'autre part, si l'on pose $H_{0,\theta} := U_\theta H_0 U_\theta^{-1}$, on remarque que

$$H_{0,\theta} = e^{-2\theta} H_0 \quad (1.44)$$

et donc

$$H_\theta = e^{-2\theta} H_0 + V_\theta$$

La deuxième formule de la résolvante donne alors

$$(H_\theta - z)^{-1} = e^{2\theta} R_0(e^{2\theta} z) (1 + e^{2\theta} V_\theta R_0(e^{2\theta} z))^{-1}, \quad \theta \in \mathbb{R}$$

où $R_0(z) := (-\Delta - z)^{-1}$. Posons

$$F(\theta, z) := ((e^{2\theta} R_0(e^{2\theta} z) (1 + e^{2\theta} V_\theta R_0(e^{2\theta} z))^{-1} U_\theta f, U_\theta g)$$

et considérons l'ensemble

$$\tilde{\mathcal{O}} = \{\theta \in \mathcal{O}; \operatorname{Im} \theta > -\frac{1}{2} \arg z\}$$

Comme $\tilde{\mathcal{O}} \subset \mathcal{O}$ et $f, g \in \mathcal{A}$, les fonctions V_θ , $U_\theta f$ et $U_\theta g$ sont analytiques sur $\tilde{\mathcal{O}}$. Pour tout $\theta \in \tilde{\mathcal{O}}$, on a $e^{2\theta} z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$ et donc $\theta \mapsto R_0(e^{2\theta} z)$ est analytique. Par hypothèse, V_θ est H_0 -relativement compact sur $\mathcal{O}$, on en déduit que $e^{2\theta} V_\theta R_0(e^{2\theta} z)$ est analytique compact sur $\tilde{\mathcal{O}}$. Le théorème de Fredholm analytique (voir [40]) donne alors $\theta \mapsto (1 + e^{2\theta} V_\theta R_0(e^{2\theta} z))^{-1}$ est méromorphe sur $\tilde{\mathcal{O}}$ et donc $\theta \mapsto F(\theta, z)$ est méromorphe sur $\tilde{\mathcal{O}}$.

On a également

$$F(\theta, z) = ((H - z)^{-1} f, g), \quad \theta \in \tilde{\mathcal{O}} \cap \mathbb{R}$$

ce qui implique que $\theta \mapsto F(\theta, z)$ est constante et vaut $((H - z)^{-1} f, g)$ sur $\tilde{\mathcal{O}}$.

Maintenant, on peut étudier le prologement en z de $F(\theta, z)$. Fixons $\theta \in \mathcal{O}$ tq $\operatorname{Im} \theta > 0$, et notons

$$\mathbb{C}_\theta^{++} = \{z \in \mathbb{C}; e^{2\theta} z \in \mathbb{C}^{++}\}$$

Alors pour tout $z \in \mathbb{C}_\theta^{++}$, on a $e^{2\theta}z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$ et donc, comme nous l'avons remarqué pour θ , l'application $z \mapsto (1 + e^{2\theta}V_\theta R_0(e^{2\theta}z))^{-1}$ est méromorphe. On en déduit que $z \mapsto F(\theta, z)$ est méromorphe sur $\mathbb{C}_\theta^{++}$.

Par conséquent, $\forall \theta \in \mathcal{O}$ tq $\text{Im } \theta > 0$, $z \mapsto F(\theta, z)$ est une application vérifiant $F(\theta, z) = ((H - z)^{-1}f, g)$ sur

$$\mathbb{C}_\theta^{++} \cap \mathbb{C}^{++} = \{z \in \mathbb{C}; 0 < \arg z < \frac{\pi}{2} - 2\text{Im } \theta\}$$

qui est méromorphe sur

$$\mathbb{C}_\theta^{++} \cap \mathbb{C}^{+-} = \{z \in \mathbb{C}; -2\text{Im } \theta < \arg z < 0\}$$

Ce qui donne un sens au prologement évoqué dans la Définition 1.5.9 : la fonction $z \mapsto F(\theta, z)$ prolonge de façon méromorphe la fonction $((H - z)^{-1}f, g)$ du demi-plan supérieur au demi-plan inférieur jusqu'à la demi-droite $\arg z = -2\text{Im } \theta$ en traversant $\mathbb{R}^+$.

Remarque 1.5.10. L'équation (1.44) implique

$$\sigma_{ess}(H_{0,\theta}) = e^{-2i\text{Im } \theta}[0, +\infty[$$

D'autre part, $H_\theta = e^{-2\theta}H_0 + V_\theta$ et le théorème de Weyl donne

$$\sigma_{ess}(H_\theta) = \sigma_{ess}(H_{0,\theta}) = e^{-2i\text{Im } \theta}[0, +\infty[$$

On peut alors comprendre ce qui précède comme suit : la déformation de H fait tourner le spectre essentiel et rend la zone $\arg z > -2\text{Im } \theta$ sans spectre essentiel pour l'opérateur H_θ . Cela permet de définir de façon méromorphe la fonction $z \mapsto ((H_\theta - z)^{-1}U_\theta f, U_\theta g)$, et donc $((H - z)^{-1}f, g)$, dans cette zone.

Maintenant, on peut définir une résonance de façon plus claire. C'est un complexe $z \in \mathbb{C}^{+-}$ tel qu'il existe une valeur θ vérifiant $\arg z > -2\text{Im } \theta$ et telle que les fonctions prolongées $F(\theta, z) = ((H_\theta - z)^{-1}U_\theta f, U_\theta g)$ ont un pôle pour tout $f, g \in \mathcal{A}$. Donc si l'on fait l'hypothèse que $U_\theta f, f \in \mathcal{A}$ est dense, alors l'opérateur $(H_\theta - z)^{-1}$ a un pôle en z et la résonance peut-être vue comme une valeur propre de H_θ . C'est ce qui est énoncé dans la Proposition 1.5.11 ci-dessous tirée de [25].

On montre également que si z tq $\arg z > -2\text{Im } \theta$ est un pôle du prolongement de $F(\theta, z)$, alors il en est de même de tout θ' tq $\text{Im } \theta < \text{Im } \theta' < \frac{\pi}{4}$.

Proposition 1.5.11. *Soit z un pôle du prolongement de $((H - z)^{-1}f, g)$, alors z est une valeur propre de H_θ pour tout $\theta \in \mathcal{O}$ tq $-2\text{Im } \theta < \arg z$*

Remarque 1.5.12. Si z est une résonance de l'opérateur H , alors la Proposition 1.5.11 implique qu'il existe $u \in L^2(\mathbb{R})$ tel que

$$H_\theta u = zu$$

où θ est tq $-2\text{Im } \theta < \arg z$. Cela donne en utilisant $H_\theta = U_\theta H U_\theta^{-1}$:

$$Hv = zv \tag{1.45}$$

où $U_\theta v = u$. Bien sûr, $v \notin L^2(\mathbb{R})$ sinon z serait une valeur propre et Hv n'est pas défini dans $L^2(\mathbb{R})$, cependant l'équation (1.45) peut-être définie au sens des distributions. Si $\theta = it$, avec $0 < t < \frac{\pi}{4}$, le fait que $U_{it}v = u \in L^2(\mathbb{R})$ implique $v \in L^2(e^{it}\mathbb{R})$ et une résonance z peut être définie comme une valeur propre de H en tant qu'opérateur sur $L^2(e^{it}\mathbb{R})$ avec $-2t < \arg z$.

D'autres techniques sont également utilisées pour prolonger la résolvante :
 - comme nous l'avons évoqué dans la section 1.4, on peut la couper avec des fonctions cut-off χ travaillant ainsi avec

$$\chi(H - z)^{-1}\chi$$

voir [45].

- on peut travailler de $L^2_{comp}(\mathbb{R})$ dans $H^2_{loc}(\mathbb{R})$, voir [22].

Les deux techniques ci-dessus rendent la résolvante plus régulière permettant ainsi de la prolonger à travers l'axe des abscisses.

On peut imaginer également de travailler dans des espaces L^2 à poids dans l'idée de la section 1.5.1 où les poids polynomiaux sont remplacés par des poids exponentiels.

Application à notre problème : caractérisation des résonances et propriétés

En vue de simplifier les notations, nous poserons pour cette partie

$$h = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}, \quad V = V_e + V_{NL}$$

C'est-à-dire que l'on travaille avec l'Hamiltonien :

$$H = -h^2 \frac{d^2}{dx^2} + V, \quad D(H) = H^2(\mathbb{R})$$

On pourra observer numériquement, section 2.1.9, que le paramètre h est petit ce qui permet de réaliser des approximations dans l'idée de la Proposition 1.5.16.

Le potentiel V défini par (1.5.13) n'a pas la régularité nécessaire pour appliquer la théorie de Aguilar et Combes présentée ci-dessus. Nous définirons donc les résonances au sens de la Remarque 1.5.12 comme cela est fait dans [18], [3] et [36].

Si l'on pose

$$\Pi_\theta = \left\{ z \in \mathbb{C}; \frac{|\operatorname{Im} z|}{|\operatorname{Re} z|} < \tan(2\theta) \right\}$$

on obtient alors la définition suivante :

Définition 1.5.13. *Le complexe z est une résonance de l'opérateur (1.11) si et seulement si il existe :*

- une constante $\theta \in (0, \frac{\pi}{4})$ telle que z et $z + B \in \Pi_\theta$,
- une fonction $u \in L^2(\gamma)$ telle que $u'' \in L^2(\gamma)$ et $(H - z)u = 0$,
 où $L^2(\gamma)$ est l'espace des fonctions de carré intégrable le long du chemin $\gamma =]-\infty, 0[e^{i\theta} \cup [0, L] \cup (L+, +\infty[e^{i\theta}$.

Le choix du chemin γ au lieu du chemin $e^{i\theta}\mathbb{R}$ de la Remarque 1.5.12 permet d'éviter d'avoir à considérer $V(e^{i\theta}x)$ pour $x \in (0, L)$. L'utilisation de l'ensemble Π_θ au lieu de $-2\theta < \arg z < 0$ est imposée par la difficulté (1.16) due à la différence de potentiel.

Pour $-B < \operatorname{Re} z < 0$, les deux déterminations de la racine introduites précédemment ne permettent pas de rendre continues simultanément $\sqrt{z}$ et $\sqrt{z+B}$ à la traversée de l'axe $[-B, +\infty)$. En plus des problèmes que cela engendre quant à l'écriture d'un problème sur $(0, L)$ vérifié par la résonance, une racine ne vérifiant pas cette propriété est instable autour de l'axe des abscisses lorsque l'on vient à calculer la résonance (nous le verrons dans la section 2.2.3). On introduit alors la détermination de la racine que l'on notera $s(z)$ avec coupure en $i\mathbb{R}_-$: $\forall z \in \mathbb{C} \setminus i\mathbb{R}_-$

$$z = \rho e^{i\theta}, \quad \rho > 0, \quad \theta \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right) \quad \text{et} \quad s(z) = \sqrt{\rho} e^{i\frac{\theta}{2}} \quad (1.46)$$

Dans notre cas le potentiel est constant à l'extérieur de $[0, L]$, par conséquent on peut déduire des conditions aux limites transparentes homogènes pour le mode résonant (voir [36]).

Proposition 1.5.14. *Tout complexe z t.q. $\operatorname{Re} z \notin \{-B, 0\}$ est une résonance au sens de la Définition 1.5.13 si et seulement si il existe une fonction $u \in L^2(0, L)$ telle que $u'' \in L^2(0, L)$ et*

$$\begin{cases} (H - z)u = 0, & (0, L), \\ hu'(0) + is(z)u(0) = 0, \\ hu'(L) - is(z+B)u(L) = 0. \end{cases} \quad (1.47)$$

Preuve. Si l'on considère une résonance $z \in \Pi_\theta$ avec $z+B \in \Pi_\theta$ où $\theta \in (0, \frac{\pi}{4})$. Et si l'on considère $u \in L^2(\gamma)$ tel que $u'' \in L^2(\gamma)$ et $Hu = zu$. Alors, on a :

$$u(x) = \alpha_- e^{i\frac{s(z)}{h}x} + \beta_- e^{-i\frac{s(z)}{h}x}, \quad x < 0$$

$$u(x) = \alpha_+ e^{i\frac{s(z+B)}{h}x} + \beta_+ e^{-i\frac{s(z+B)}{h}x}, \quad x > L$$

La condition $u \in L^2(\gamma)$ implique les conditions $u(xe^{i\theta}) \in L^2(\mathbb{R}_-)$ et $u(L + xe^{i\theta}) \in L^2(\mathbb{R}_+)$. En utilisant que z et $z+B \in \Pi_\theta$, on remarque :

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} e^{i\frac{s(z)}{h}xe^{i\theta}} = +\infty, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} e^{-i\frac{s(z)}{h}xe^{i\theta}} = 0$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} e^{i\frac{s(z+B)}{h}xe^{i\theta}} = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} e^{-i\frac{s(z+B)}{h}xe^{i\theta}} = +\infty$$

On a donc forcément $\alpha_- = \beta_+ = 0$ et

$$u(x) = \beta_- e^{-i\frac{s(z)}{h}x}, \quad x < 0 \quad (1.48)$$

$$u(x) = \alpha_+ e^{i\frac{s(z+B)}{h}x}, \quad x > L \quad (1.49)$$

Alors, on obtient la condition aux limites en 0 à partir de (1.48) et la condition aux limites en L à partir de (1.49). L'équation $(H - z)u = 0$ sur $(0, L)$, apparaissant dans (1.47), est une conséquence de $Hu = zu$ dans $L^2(\gamma)$.

Réciproquement, soient z et u solutions de (1.47) alors u se raccorde avec les ondes libres (1.48) et (1.49) en une fonction $\tilde{u} \in L^2(\gamma)$, où θ est un réel tel que z et $z + B \in \Pi_\theta$, vérifiant $H\tilde{u} = z\tilde{u}$ dans $L^2(\gamma)$. Plus précisément, le raccord se fait en posant :

$$\tilde{u}(x) = \begin{cases} u(0)e^{-i\frac{s(z)}{h}x}, & x < 0 \\ u(x), & 0 \leq x \leq L \\ u(L)e^{i\frac{s(z+B)}{h}(x-L)}, & x > L \end{cases}$$

■

Remarque 1.5.15. On remarque que l'on a trois alternatives pour voir une résonance comme une valeur propre : déformer l'opérateur dont on cherche les résonances, ou bien déformer l'espace sur lequel il agit, ou enfin de le considérer avec des conditions aux limites transparentes. Dans chacun des cas, l'opérateur n'est plus auto-adjoint, cela peut poser des problèmes pour l'étude de la dynamique mais c'est une condition nécessaire pour avoir des valeurs propres à partie imaginaire non nulle.

La Proposition 1.5.14 nous donne que les résonances sont les solutions du problème (1.47). Si l'on arrive à trouver les solutions du problème (1.47), on aura d'une part la valeur des résonances (détection des résonances) et d'autre part la valeur du mode résonant associé qui nous sera utile dans la suite.

On sait à présent le problème que l'on doit résoudre pour calculer une résonance, mais la résolution directe de ce problème est difficile. On a donc besoin d'avoir des informations supplémentaires sur les solutions pour savoir dans quelle zone chercher la solution. On sait par exemple qu'elles sont la mémoire des valeurs propres d'un Hamiltonien perturbé (voir [36]). C'est le cas dans [22] où les résonances des vibrations de l'air dans l'espace libre, générées par une membrane en vibrations, sont des perturbations des valeurs propres de la membrane fixée au bord. Dans notre cas, ce sont des souvenirs de valeurs propres de l'Hamiltonien H_D , avec conditions aux limites de type Dirichlet au bord de la diode, défini par

$$D(H_D) = H_0^1 \cap H^2(0, L), \quad \forall u \in D(H_D), H_D u = H u \quad (1.50)$$

L'Hamiltonien H que nous considérons est défini sur toute la droite réelle, il est une perturbation de H_D . Ce dernier constitue le modèle sur lequel est basé le travail des Chapitres 4 et 5, son spectre est constitué d'une suite de valeurs propres tendant vers $+\infty$:

$$\sigma(H_D) = \{\varepsilon_i, i \geq 1\} \quad (1.51)$$

Alors, [36] donne un résultat de perturbation dans le cas où l'île recouvre toute la diode, c'est-à-dire dans le cas où les constantes a_i, b_i introduites dans la section 1.2.1 sont telles $a_2 = 0$ et $b_2 = L$. Ce résultat est reformulé dans la proposition ci-dessous.

Proposition 1.5.16. *Pour une constante $\delta > 0$ petite, il existe une unique résonance z de l'opérateur H vérifiant $\operatorname{Re} z < \varepsilon_2 - \delta$. D'autre part, on a*

$$z = \varepsilon_1 + \mathcal{O}(e^{-\frac{S_0}{2h}})$$

où ε_i , $i = 1, 2$, sont données par (1.50), (1.51) et S_0 est l'épaisseur de Agmon de la barrière associée au potentiel $V_e - \varepsilon$:

$$S_0 = \inf_{x \in \{a_2, b_2\}, y \in (a_3, b_3)} d(x, y), \quad d(x, y) = \int_x^y \sqrt{(V_e(s) - \varepsilon)_+} ds$$

pour une constante $\varepsilon > \varepsilon_1$ suffisamment petite.

Nous montrerons dans le Chapitre 4, Lemme 4.6.1, que les premières valeurs propres ε_i convergent lorsque $h \rightarrow 0$. Ce résultat et la Proposition 1.5.16 permettent de localiser la première résonance dans une petite zone indépendante de h . Un résultat similaire est énoncé par [47] dans le cadre général.

Proposition 1.5.17. *Les résonances données par la Définition 1.5.13 ont une partie imaginaire strictement négative.*

Remarque 1.5.18. Si u , z définissent une résonance, la condition $u \in L^2(\gamma)$ impose de garder les ondes sortantes (1.48) et (1.49). D'après la Proposition 1.5.17, on a $\operatorname{Im} z < 0$ et donc ces fonctions sont exponentiellement croissantes. Les conditions aux limites transparentes permettant de trouver u et z , on dit que les conditions aux limites sélectionnent les modes sortants et exponentiellement croissants. C'est un principe similaire à celui des conditions aux limites de type P.M.L., avec la différence que ces dernières permettent de sélectionner les modes exponentiellement décroissants. Nous renvoyons à [11] et aux références s'y trouvant pour une discussion sur ce point et pour une utilisation de conditions aux limites transparentes pour le calcul des résonances.

1.5.3 Un peu de scattering

Fonctions propres généralisées

Dans cette section, nous allons donner quelques précisions sur les fonctions propres généralisées données par (1.17)-(1.20).

Ce sont des solutions de l'équation

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right) \Phi_k = E_k \Phi_k, \quad \mathbb{R} \quad (1.52)$$

où E_k vérifie la relation de dispersion

$$E_k = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, & k \geq 0 \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - B, & k < 0 \end{cases}$$

L'opérateur $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V$ de domaine $H^2(\mathbb{R})$ n'ayant pas de valeurs propres dans $[-B, +\infty[$, les Φ_k ne sont pas dans $H^2(\mathbb{R})$.

Soit $k \geq 0$, en utilisant l'équation (1.52) et la forme du potentiel V , on voit que Φ_k est une combinaison linéaire des fonctions e^{ikx} , e^{-ikx} pour $x < 0$ et $e^{i\sqrt{k^2+2mB/\hbar^2}x}$, $e^{-i\sqrt{k^2+2mB/\hbar^2}x}$ pour $x > L$. L'ensemble des solutions de (1.52) sur $(0, L)$ est un espace vectoriel de dimension 2 et la fonction Φ_k est déterminée par une famille à six paramètres.

La régularité elliptique implique $\Phi_k \in H_{loc}^2(\mathbb{R})$ et l'injection continue $H^1 \subset C^0$ en dimension 1, donnent un raccord C^1 en 0 et en L pour Φ_k . On en déduit que l'ensemble des solutions de (1.52) est une famille à deux paramètres et que Φ_k est déterminée de façon unique en imposant $\Phi_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}$, pour $x < 0$, et $\Phi_k(x) = t(k)e^{i\sqrt{k^2+2mB/\hbar^2}x}$ pour $x > L$. Cela correspond à regarder ce qui est réfléchi et transmis pour une onde incidente e^{ikx} arrivant de la gauche.

De la même manière, pour $k < 0$, on définira les Φ_k comme étant la solution de (1.52) telle que $\Phi_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}$, pour $x \geq L$, et $\Phi_k(x) = t(k)e^{-i\sqrt{k^2-2mB/\hbar^2}x}$, pour $x \leq 0$. Lorsque la quantité $k^2 - 2mB/\hbar^2$ est négative, on définira la racine apparaissant dans la formule précédente à l'aide de (1.26).

Remarque 1.5.19. Etant donnée une énergie $E \geq -B$, les Φ_k forment une base de l'ensemble des solutions de $H\Phi = E\Phi$. Plus précisément, pour toute fonction Φ vérifiant $H\Phi = E\Phi$, il va exister a, b déterminées de façon unique telles que :

$$\Phi = a\Phi_{k^+} + b\Phi_{k^-}$$

où $k^+ \geq 0$ et $k^- \leq 0$ vérifient $E_{k^+} = E_{k^-} = E$.

Matrice de scattering et résonances

Nous présentons ici un résultat s'inspirant de [18] permettant de voir une résonance comme un pic d'amplitude des coefficients $r(k)$ et $t(k)$ introduits ci-dessus. Pour simplifier la présentation, nous supposons que $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ et $B = 0$ mais les résultats obtenus sont valables pour notre problème.

Soit $z \in \mathbb{C}$, on considère le problème :

$$-\frac{d^2}{dx^2}u + Vu = zu, \quad \mathbb{R} \tag{1.53}$$

où V est un potentiel régulier tel que $\text{supp } V \subset (0, L)$.

Remarque 1.5.20. Dans cette sous-section, nous sommes dans le cadre régulier et les résonances peuvent être définies au sens de la Remarque 1.5.12 (comme nous l'avons fait dans la Définition 1.5.13) : on dira que le complexe z est une résonance de l'opérateur $-\frac{d^2}{dx^2}u + V$ si et seulement si il existe :

- une constante $\theta \in (0, \frac{\pi}{4})$ telle que $-2\theta < \arg z < 0$,
- une fonction $u \in L^2(e^{i\theta}\mathbb{R})$ telle que $u'' \in L^2(e^{i\theta}\mathbb{R})$ et $(H - z)u = 0$.

Le problème de la différence de potentiel ne se posant pas, on travaillera avec la détermination principale de la racine complexe $z^{1/2}$ donnée par (1.25). On définit les fonctions de Jost $f_g^+(z)$, $f_g^-(z)$ (resp. $f_d^+(z)$, $f_d^-(z)$) comme étant la base de solutions de (1.53) vérifiant

$$f_g^+(z) = e^{i(z)^{1/2}x}, \quad x < 0, \quad f_g^-(z) = e^{-i(z)^{1/2}x}, \quad x < 0$$

$$(\text{resp. } f_d^+(z) = e^{i(z)^{1/2}x}, \quad x > L, \quad f_d^-(z) = e^{-i(z)^{1/2}x}, \quad x > L)$$

Alors, on notera $\mathcal{T}(z)$ la matrice de transmission vérifiant :

$$\begin{pmatrix} f_g^+(z) \\ f_g^-(z) \end{pmatrix} = \mathcal{T}(z) \begin{pmatrix} f_d^+(z) \\ f_d^-(z) \end{pmatrix}$$

qui correspond avec la matrice de passage d'une base à l'autre.

Si l'on note $(\alpha(z), \beta(z))$ la première ligne de $\mathcal{T}(z)$ alors la deuxième ligne est $(\beta^*(z), \alpha^*(z))$ où par définition $u^*(x, z) = \overline{u(x, \bar{z})}$.

En effet, on a

$$(f_g^+(z))^* = (e^{i(z)^{1/2}x})^* = e^{-i(z)^{1/2}x}, \quad x < 0$$

et

$$(-\frac{d^2}{dx^2} + V - z)(f_g^+(z))^* = 0, \quad \mathbb{R}$$

La fonction $f_g^-(z)$ étant la seule à vérifier ces propriétés, on obtient $(f_g^+(z))^* = f_g^-(z)$. De même, $(f_d^+(z))^* = f_d^-(z)$ et $(f_d^-(z))^* = f_d^+(z)$. On en déduit :

$$f_g^-(z) = (f_g^+(z))^* = (\alpha(z)f_d^+(z) + \beta(z)f_d^-(z))^* = \alpha^*(z)f_d^-(z) + \beta^*(z)f_d^+(z) \quad (1.54)$$

Cela permet de conclure :

$$\mathcal{T}(z) = \begin{pmatrix} \alpha(z) & \beta(z) \\ \beta^*(z) & \alpha^*(z) \end{pmatrix}$$

Si l'on note

$$W(u_1, u_2)(x) = \det \begin{pmatrix} u_1(x) & u_2(x) \\ u_1'(x) & u_2'(x) \end{pmatrix}$$

le Wronskien de deux fonctions u_1 et u_2 , on a $\forall x \in \mathbb{R}$:

$$W(f_g^+, f_g^-)(x) = W(f_g^+, f_g^-)(0) = -2i(z)^{1/2}, \quad W(f_d^+, f_d^-)(x) = W(f_d^+, f_d^-)(1) = -2i(z)^{1/2}$$

où l'on a utilisé le fait que le Wronskien de deux solutions de (1.53) est constant (car (1.53) est une équation différentielle d'ordre 2 sans dérivée d'ordre 1).

D'autre part, on a :

$$\begin{pmatrix} f_g^+ & f_g^- \\ (f_g^+)' & (f_g^-)' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_d^+ & f_d^- \\ (f_d^+)' & (f_d^-)' \end{pmatrix} (\mathcal{T}(z))^T$$

et donc

$$\det \mathcal{T}(z) = 1, \quad \forall z \in \mathbb{C} \quad (1.55)$$

Le coefficient $\alpha^*(z)$ joue un rôle important dans l'étude des résonances comme le montre le Lemme ci-dessous.

Lemme 1.5.21. *Soit $\mathbb{C}^{+-}$ l'ensemble défini par (1.43). Une valeur $z \in \mathbb{C}^{+-}$ est une résonance si et seulement si $\alpha^*(z) = 0$*

Preuve. D'après la définition donnée dans la Remarque 1.5.20, z est une résonance de l'opérateur $-\frac{d^2}{dx^2} + V$ si et seulement si $\exists u \in L^2(e^{i\theta}\mathbb{R})$, $u \neq 0$, solution de (1.53) pour une constante $\theta \in (0, \frac{\pi}{4})$ donnée telle que $-2\theta < \arg z < 0$.

Une telle fonction u peut être exprimée à l'aide des fonctions de Jost. Or, avec des calculs similaires à ceux de la preuve de la Proposition 1.5.14, on montre que $f_g^+(z)$, $f_d^-(z) \notin L^2(e^{i\theta}\mathbb{R})$. On en déduit qu'il va exister des constantes $c, d \neq 0$ telles que

$$u = cf_g^-(z) = df_d^+(z)$$

En utilisant l'écriture (1.54) de $f_g^-(z)$, on obtient

$$c\alpha^*(z)f_d^-(z) + (c\beta^*(z) - d)f_d^+(z) = 0$$

et l'indépendance linéaire de $f_d^-(z)$, $f_d^+(z)$ donne $\alpha^*(z) = 0$.

Réciproquement, soit $z \in \mathbb{C}^{+-}$ telle que $\alpha^*(z) = 0$. Alors, l'équation (1.54) implique

$$f_g^-(z) = \beta^*(z)f_d^+(z)$$

et $f_g^-(z)$ est une solution non nulle de (1.53) appartenant à $L^2(e^{i\theta}\mathbb{R})$ pour toute valeur $\theta \in (0, \frac{\pi}{4})$ telle que $-2\theta < \arg z < 0$. ■

Pour tout $z \in \mathbb{C}^{+-}$ t.q. $\alpha^*(z) \neq 0$, c'est-à-dire en dehors des résonances de $-\frac{d^2}{dx^2} + V$, les familles des ondes entrantes $\{f_g^+, f_d^-\}$ et des ondes sortantes $\{f_d^+, f_g^-\}$ forment, chacune, une base de l'ensemble des solutions de (1.53). Introduisons à présent la matrice de scattering $\mathcal{S}(z)$ étant la matrice, définie pour tout $z \in \mathbb{C}^{+-}$ t.q. $\alpha^*(z) \neq 0$, permettant de passer d'une base à l'autre :

$$\begin{pmatrix} f_g^+(z) \\ f_d^-(z) \end{pmatrix} = (\mathcal{S}(z))^T \begin{pmatrix} f_d^+(z) \\ f_g^-(z) \end{pmatrix}$$

Proposition 1.5.22. *La matrice de scattering $\mathcal{S}(z)$ est une fonction méromorphe sur $\mathbb{C}^{+-}$ dont l'ensemble des pôles coïncide avec l'ensemble des résonances de l'opérateur $-\frac{d^2}{dx^2} + V$.*

Preuve. Soit $z \in \mathbb{C}^{+-}$ qui n'est pas une résonance, alors le Lemme 1.5.21 implique $\alpha^*(z) \neq 0$. L'équation (1.54) donne donc

$$f_d^-(z) = -\frac{\beta^*(z)}{\alpha^*(z)}f_d^+(z) + \frac{1}{\alpha^*(z)}f_g^-(z) \quad (1.56)$$

D'autre part,

$$f_g^+(z) = \alpha(z)f_d^+(z) + \beta(z)f_d^-(z)$$

donc en utilisant (1.55) et (1.56), on obtient :

$$\begin{aligned} f_g^+(z) &= \alpha(z)f_d^+(z) + \beta(z)\left(-\frac{\beta^*(z)}{\alpha^*(z)}f_d^+(z) + \frac{1}{\alpha^*(z)}f_g^-(z)\right) \\ &= \frac{1}{\alpha^*(z)}((\alpha(z)\alpha^*(z) - \beta(z)\beta^*(z))f_d^+(z) + \beta(z)f_g^-(z)) \\ &= \frac{1}{\alpha^*(z)}f_d^+(z) + \frac{\beta(z)}{\alpha^*(z)}f_g^-(z) \end{aligned}$$

Ce qui donne

$$\mathcal{S}(z) = \frac{1}{\alpha^*(z)} \begin{pmatrix} 1 & -\beta^*(z) \\ \beta(z) & 1 \end{pmatrix}$$

Les coefficients α^* , β^* et β étant holomorphes, voir [18], la matrice $\mathcal{S}$ considérée sur $z \in \mathbb{C}^{+-}$ est une fonction méromorphe dont les pôles sont les zéros de la fonction $\alpha^*(z)$. Le Lemme 1.5.21 permet alors de conclure. ■

Lorsque $E \geq 0$, on a

$$\det \mathcal{T}(E) = |\alpha(E)|^2 - |\beta(E)|^2 = 1$$

et donc $\alpha(E) \neq 0$. Alors, on montre facilement que $\{f_g^+, f_d^-\}$, $\{f_d^+, f_g^-\}$ sont deux bases de l'ensemble des solutions de (1.53). Comme on l'a fait dans la preuve de la Proposition 1.5.22, on peut écrire :

$$f_g^+(E) = \frac{1}{\alpha^*(E)} f_d^+(E) + \frac{\beta(E)}{\alpha^*(E)} f_g^-(E)$$

ce qui donne :

$$f_g^+(E) + r(\sqrt{E}) f_g^-(E) = t(\sqrt{E}) f_d^+(E)$$

où $r(\sqrt{E}) = -\frac{\beta(E)}{\alpha^*(E)}$ et $t(\sqrt{E}) = \frac{1}{\alpha^*(E)}$ sont les coefficients définis dans la section précédente. La fonction $f_g^+(E) + r(\sqrt{E}) f_g^-(E)$, ou de façon équivalente $t(\sqrt{E}) f_d^+(E)$, correspond à la fonction propre généralisée $\Phi_{\sqrt{E}}$.

Remarque 1.5.23. On peut comprendre les résonances ainsi : elles sont de la forme $E_R - i\frac{\Gamma}{2}$ avec $E_R > 0$ et Γ petit. Alors, pour $E = E_R$, E est proche d'être une résonance donc $\alpha^*(E)$ est proche de 0, d'après le Lemme 1.5.21, et le coefficient $t(\sqrt{E})$ est proche de sa valeur maximale. Si l'on injecte une onde de module 1 et d'énergie égale à l'énergie résonante, l'onde transmise a un module proche de 1.

De même, la fonction propre généralisée $\Phi_{-\sqrt{E}}$ s'écrit

$$f_d^-(E) + r(-\sqrt{E}) f_d^+(E) = t(-\sqrt{E}) f_g^-(E)$$

où $r(-\sqrt{E}) = \frac{\beta^*(E)}{\alpha^*(E)}$ et $t(-\sqrt{E}) = \frac{1}{\alpha^*(E)}$.

Chapitre 2

Méthodes de résolution pour la diode à effet tunnel résonant en régime stationnaire et en régime transitoire

2.1 La diode à effet tunnel résonant en régime stationnaire

2.1.1 Calcul de la densité : fonctions propres généralisées

Le calcul de la densité se fait à l'aide des fonctions propres généralisées de l'Hamiltonien stationnaire. Elles peuvent être exprimées à l'aide de fonctions propres généralisées arrivant de la gauche qui sont les $\Phi_k(x)$, $k > 0$ et à l'aide de fonctions propres généralisées arrivant de la droite qui sont les $\Phi_k(x)$, $k < 0$ introduites dans la section (1.5.3).

La densité est alors donnée par :

$$n(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Phi_k(x)|^2 dk, \quad x \in \mathbb{R},$$

où la fonction g donne le profil d'injection des électrons. En effet, $g(k)$, $k > 0$ donne la contribution des électrons arrivant de gauche, c'est-à-dire le profil d'injection en $x = 0$, et $g(k)$, $k < 0$ donne la contribution des électrons arrivant de droite, soit le profil d'injection en $x = L$.

On utilise dans notre cas la statistique de Fermi-Dirac en dimension 1 donnée par (1.15) et que l'on rappelle ci-dessous :

$$g(k) = \frac{mk_B T}{2\pi^2 \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{k_B T} \right) \right)$$

2.1.2 Conditions aux limites transparentes

Il est numériquement impossible de réaliser des calculs sur $\mathbb{R}$ tout entier, d'autre part, les phénomènes qui nous intéressent sont concentrés autour de la diode. De ce fait, nous calculons la densité, et donc les $\Phi_k(x)$ sur l'intervalle $[0, L]$ seulement. Pour calculer $\Phi_k(x)$ sur $[0, L]$, on doit résoudre une équation de Schrödinger stationnaire à laquelle on ajoute des conditions aux limites rendant le problème bien posé.

Pour $k > 0$, on obtient la conditions aux limites en 0 en remarquant que $\Phi_k(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}$ pour $x \leq 0$ implique que $\Phi'_k(x) + ik\Phi_k(x) = 2ik$, $x < 0$. La solution $\Phi_k(x)$ étant C^1 en 0, on a la condition aux limites :

$$\Phi'_k(0) + ik\Phi_k(0) = 2ik.$$

En utilisant le fait que $\Phi_k(x) = t(k)e^{i\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}x}$ pour $x \geq L$, on obtient la condition aux limites en L :

$$\Phi'_k(L) - i\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}\Phi_k(L) = 0.$$

On obtient alors le problème avec conditions aux limites suivant pour $k > 0$:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi_k(x) + V(x)\Phi_k(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Phi_k(x), & x \in (0, L), \\ \Phi'_k(0) + ik\Phi_k(0) = 2ik, \\ \Phi'_k(L) - i\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}\Phi_k(L) = 0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Ces conditions aux limites sont dites transparentes car la solution du problème (2.1) correspond à la restriction à l'intervalle $[0, L]$ de la solution sur tout $\mathbb{R}$ qui est une onde plane venant de la gauche avec une partie transmise et une partie réfléchie.

En effet, comme cela est montré dans [6], le problème (2.1) admet une solution unique. Alors, le fait que la restriction à l'intervalle $[0, L]$ de la solution sur tout $\mathbb{R}$ vérifie ce problème nous permet de conclure.

En procédant de la même manière pour $k < 0$, on obtient des conditions aux limites transparentes en 0 et en L . Ce qui donne le problème avec conditions aux limites suivant pour $k < 0$:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi_k(x) + V(x)\Phi_k(x) = (\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - B)\Phi_k(x), & x \in (0, L), \\ \Phi'_k(0) + i\sqrt{k^2 - 2mB/\hbar^2}\Phi_k(0) = 0, \\ \Phi'_k(L) + ik\Phi_k(L) = 2ik. \end{cases} \quad (2.2)$$

Lorsque la quantité $k^2 - 2mB/\hbar^2$ est négative, on définira la racine apparaissant dans (2.2) à l'aide de la formule (1.26)

Remarque 2.1.1. La quantité $2ik$ apparaissant dans les conditions aux limites des problèmes (2.1) et (2.2) est un terme source qui peut être compris comme la représentation en $x = 0$ pour (2.1), et en $x = L$ pour (2.2), de l'onde incidente injectée e^{ikx} . Dans cette optique, les conditions aux limites aux transparentes homogènes, apparaissant dans le problème (1.47) qui donne le mode résonant, signifient que l'on injecte rien. La particularité de la résonance est que rien n'est injecté rien mais on obtient tout de même quelque chose.

2.1.3 Résolution directe

On opère d'abord un changement de variable permettant d'écrire l'équation sur l'intervalle $[0, 1]$.

Fixons $\underline{k} > 0$.

On pose $u(x) = \Phi_{\underline{k}}(xL)$ où $\Phi_{\underline{k}}$ est solution du problème (2.1) et $x \in [0, 1]$.

Si l'on pose $k = \underline{k}L$, alors u est solution du problème suivant :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(xL)u(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2mL^2} u(x), & x \in (0, 1), \\ u'(0) + iku(0) = 2ik, \\ u'(1) - i\sqrt{k^2 + 2mBL^2/\hbar^2} u(1) = 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Pour pouvoir résoudre ce problème à l'aide d'une méthode de Runge-Kutta, nous définissons un nouveau problème :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{d^2}{dx^2} v(x) + V((1-x)L)v(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2mL^2} v(x), & x \in (0, 1), \\ v(0) = 1, \\ v'(0) = -i\sqrt{k^2 + 2mBL^2/\hbar^2} \end{cases} \quad (2.4)$$

On vérifie que $\frac{2ik}{-v'(1)+ikv(1)}v(1-x)$ est solution de (2.3). Or (2.3) admet une solution unique, donc

$$u(x) = \frac{2ik}{-v'(1)+ikv(1)}v(1-x)$$

Remarque 2.1.2. Pour $k \neq 0$, on a $-v'(1) + ikv(1) \neq 0$, sinon on aurait $v(1) = v'(1) = 0$. Alors, l'équation différentielle vérifiée par v –la première équation de (2.4)– implique $v = 0$, ce qui est en contradiction avec $v(0) = 1$.

Si l'on pose $Y = \begin{pmatrix} v \\ v' \end{pmatrix}$, alors le problème (2.4) se réécrit de façon matricielle

$$\begin{cases} Y'(x) = M(x)Y(x), & x \in (0, 1), \\ Y(0) = Y_0, \end{cases} \quad (2.5)$$

où $M(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{2mL^2}{\hbar^2} V((1-x)L) - k^2 & 0 \end{pmatrix}$ et $Y_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ -i\sqrt{k^2 + 2mBL^2/\hbar^2} \end{pmatrix}$.

Le problème (2.5) est d'ordre 1, on le résout à l'aide d'une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.

Soit une discrétisation $x_j = j\Delta x$, $j = 0, \dots, J$ à pas constant $\Delta x = \frac{1}{J}$ de l'intervalle $[0, 1]$, alors les Y_j , $j = 0, \dots, J$ approximant les $Y(x_j)$, $j = 0, \dots, J$ sont donnés par la relation de récurrence suivante :

$$Y_{j+1} = Y_j + K_1/6 + K_2/3 + K_3/3 + K_4/6,$$

où :

$$\begin{aligned} K1 &= \Delta x M(x_j) Y_j, \\ K2 &= \Delta x M(x_{j+1/2}) (Y_j + K1/2), \\ K3 &= \Delta x M(x_{j+1/2}) (Y_j + K2/2), \\ K4 &= \Delta x M(x_{j+1}) (Y_j + K3). \end{aligned}$$

On procède de façon similaire pour $\underline{k} < 0$.

On pose $u(x) = \Phi_{\underline{k}}(xL)$, alors u est solution du problème suivant :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(xL)u(x) = (\frac{\hbar^2 k^2}{2mL^2} - B)u(x), & x \in (0, 1), \\ u'(0) + i\sqrt{k^2 - 2mBL^2/\hbar^2} u(0) = 0, \\ u'(1) + ik u(1) = 2ik. \end{cases} \quad (2.6)$$

Nous définissons un nouveau problème :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{d^2}{dx^2} v(x) + V(xL)v(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2mL^2} v(x), & x \in (0, 1), \\ v(0) = 1, \\ v'(0) = -i\sqrt{k^2 - 2mBL^2/\hbar^2} \end{cases} \quad (2.7)$$

L'unique solution de (2.6) est donnée par :

$$u(x) = \frac{2ik}{v'(1) + ikv(1)} v(x).$$

De la même façon que pour $\underline{k} > 0$, le problème (2.7) se réécrit sous la forme d'un système d'ordre 1 que l'on résout à l'aide d'une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.

2.1.4 Calcul numérique de la densité

On dispose à présent de l'approximation des $\Phi_k(x_jL)$, $j = 0, \dots, J$ à la fréquence k que l'on veut.

Pour calculer les n_j , $j = 0, \dots, J$ approximant la densité aux points x_jL , on évalue l'intégrale :

$$n(x_jL) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Phi_k(x_jL)|^2 dk,$$

à l'aide de la méthode des trapèzes. Pour cela, on considère que la contribution à l'intégrale est négligeable en dehors de l'intervalle $[-k_{max}, k_{max}]$. Ce qui est vrai pour $k_{max} > 0$ suffisamment grand puisque la fonction poids g tend vers 0 lorsque k^2 tend vers $+\infty$.

On peut alors discrétiser l'intervalle $[-k_{max}, k_{max}]$ en des fréquences $k_p = -k_{max} + p\Delta k$, $p = 0, \dots, P$ où $\Delta k = \frac{2k_{max}}{P}$.

On utilise la formule des trapèzes pour réaliser l'intégration numérique sur $[-k_{max}, k_{max}]$, ce qui donne l'approximation suivante pour la densité :

$$n_j = \sum_{p=0}^{P-1} (g(k_p)|\Phi_{p,j}|^2 + g(k_{p+1})|\Phi_{p+1,j}|^2) \frac{\Delta k}{2},$$

où les $\Phi_{p,j}$ sont les approximations des $\Phi_{k_p}(x_j L)$, $j = 0, \dots, J$.
Pour réaliser les calculs numériques, nous avons choisi

$$k_{max} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_F + 7k_B T)}.$$

Résonance : maillage en fréquence adaptatif

Les Propositions 1.5.16 et 1.5.17 impliquent que la résonance de plus basse énergie z peut s'écrire :

$$z = E_R - i\frac{\Gamma}{2}, \quad \text{où } \Gamma > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\Gamma}{|E_R|} \ll 1$$

La notation ci-dessus sera couramment utilisée par la suite. D'autre part, comme nous l'avons signalé dans la Remarque 1.5.23, pour une énergie E_k proche de z , c'est-à-dire proche de E_R , la norme infini de la fonction propre généralisée associée à l'énergie E_k observe un pic. Dans [48], ce pic est détecté avec la phase de scattering qui a un comportement donné par la formule de Briet-Wigner :

$$\frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{(E_k - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (2.8)$$

Le pic d'amplitude est très fin, sa largeur (celle de l'intervalle centré sur E_R pour lequel l'amplitude est au-dessus de la moitié de sa valeur maximum) vaut Γ .

Ce fait est à prendre en compte lors du calcul de la densité. En effet, les fonctions d'onde correspondant aux énergies proches des énergies résonantes vont avoir une contribution plus importante que celle des fonctions d'onde correspondant à des fréquences éloignées ($\rightarrow$ idée de concentration spectrale, voir [25]). C'est-à-dire que c'est la bande de largeur Γ autour du pic qui contient le plus d'informations. Cette bande étant très fine, si l'on réalise un maillage en fréquence de pas constant Δk trop large on va rater beaucoup d'informations. La solution serait de prendre une valeur de Δk suffisamment petite, cependant cela demanderait un nombre de points de maillage, et donc un nombre d'équations de Schrödinger à résoudre beaucoup trop élevé rendant le calcul numérique très coûteux.

L'idée est de raffiner le maillage en fréquence seulement autour de la zone du proche de la résonance. Pour repérer cette zone, on regarde l'évolution des coefficients de transmission que nous définissons ci-dessous :

$$T(k) = \frac{\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}}{k} |\Phi_k(L)|^2, \quad k > 0, \quad (2.9)$$

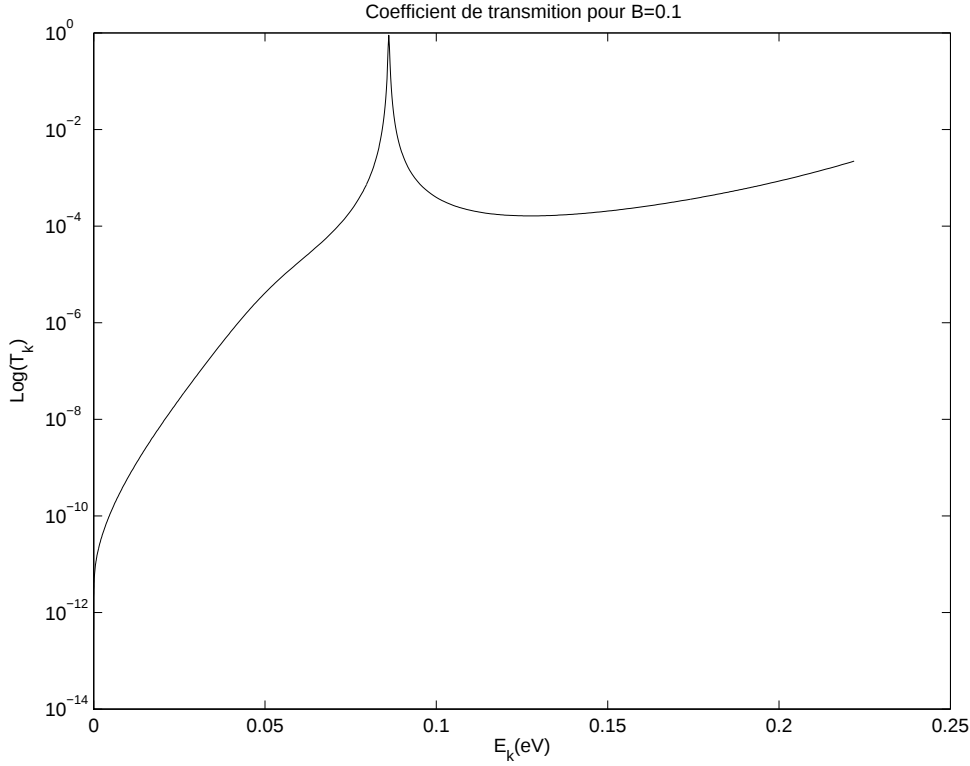


FIG. 2.1 – Représentation du coefficient de transmission pour $B = 0.1$: pic de résonance.

$$T(k) = \frac{\sqrt{(k^2 - 2mB/\hbar^2)^+}}{|k|} |\Phi_k(0)|^2, \quad k < 0, \quad (2.10)$$

où pour tout x réel on a noté $(x)^+ = \max\{0, x\}$.

En effet, ces coefficients permettent de caractériser la résonance, car, comme nous l'avons expliqué ci-dessus, pour les énergies proches de l'énergie résonante, le coefficient de transmission observera un pic en amplitude.

Le coefficient varie brutalement à proximité de la résonance, la quantité permettant d'observer le pic est donc $\log T(k)$. Cela est illustré par le graphique de la Figure 2.1 représentant $\log T(k)$, pour k positif et $B = 0.1$, en fonction de l'énergie de l'onde incidente. Le coefficient de transmission est calculé grâce à la formule (2.9) où $|\Phi_k(L)|^2$ est donnée par la résolution de l'équation de Schrödinger (2.1) correspondant au vecteur d'onde k . Les valeurs des paramètres numériques et physiques utilisés pour la résolution du problème sont ceux de la section 2.1.9 pour deux barrières de même taille que le puits.

L'évolution des coefficients de transmission sera évaluée à l'aide de la dérivée de leur logarithme par rapport à la fréquence : $\frac{d}{dk} \log T(k)$, donnée par les formules (2.72) et (2.73) de l'Appendice 2.A.

On peut alors décrire comment est réalisé le maillage adaptatif du point de vue numérique. Comme nous l'avons dit précédemment, nous prendrons une discrétisation à pas variable $k_0 = -k_{max}$, $k_p = k_{p-1} + \Delta k_p$, $p = 1, \dots, P$ de l'intervalle $[-k_{max}, k_{max}]$.

A chaque itération p , étant donné Δk_p , le pas Δk_{p+1} est choisi de la façon suivante. On se donne un pas très fin δ et un pas plus grand Δ et on calcule l'approximation de $\frac{d}{dk} \log T(k_p)$. Si elle est élevée, on considère que l'on est proche d'une résonance et on raffine le maillage en posant $\Delta k_{p+1} = \delta$ sinon on garde un pas relativement large en posant $\Delta k_{p+1} = \Delta$.

Pour approcher $\frac{d}{dk} \log T(k_p)$, avec $k_p > 0$ par exemple, on doit approcher $\frac{d}{dk} \Phi_{k_p}(L)$, ce que l'on fait à l'aide d'une différence finie décentrée à gauche :

$$\frac{d}{dk} \Phi_{k_p}(L) \approx \frac{\Phi_{p,J} - \Phi_{p-1,J}}{\Delta k_p},$$

la différence finie décentrée à droite n'étant pas utilisable puisque l'on ne connaît pas la valeur de $\Phi_{p+1,J}$ à l'étape p du calcul.

Ce procédé est initialisé en posant $\Delta k_1 = \delta$.

2.1.5 Courant

Comme la fonction densité, la fonction courant est définie à partir des fonctions propres généralisées comme suit :

$$\mathcal{J}(x) = \frac{q\hbar}{m} \int_{\mathbb{R}} g(k) \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} \right) dk, \quad x \in [0, L], \quad (2.11)$$

où les $\Phi_k(x)$ sont les fonctions propres généralisées définies précédemment.

Dans le cas stationnaire $\partial_t n = 0$, l'équation de conservation $\partial_t n + \partial_x \mathcal{J} = 0$ implique que le courant est constant sur toute la diode. On a donc $\mathcal{J}(x) = \mathcal{J}$ où $\mathcal{J}$ est une constante.

Utilisons ce fait pour déterminer une nouvelle formule du courant.

Une autre formule du courant

A partir des résultats obtenus dans la Proposition 2.3.13 de l'Appendice 2.A, nous pouvons déduire la nouvelle formule du courant. En régime stationnaire, $\mathcal{J}$ est constant et donc :

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}(L) = \frac{q\hbar}{m} \int_{\mathbb{R}} g(k) \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \Phi_k(L) \overline{\Phi_k(L)} \right) dk.$$

En effectuant un changement de variable et en utilisant les conditions aux limites pour les fonctions propres généralisées, on obtient :

$$\mathcal{J} = \frac{q\hbar}{m} \left(\int_{-\infty}^0 g(k) k (2\operatorname{Re}(\Phi_k(L)) - |\Phi_k(L)|^2) dk + \int_0^{+\infty} g(k) \sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2} |\Phi_k(L)|^2 dk \right).$$

Or on a :

$$2\operatorname{Re}(\Phi_k(L)) - |\Phi_k(L)|^2 = 1 - |\Phi_k(L) - 1|^2 = 1 - R(k),$$

et donc en utilisant la conservation de l'énergie (2.74) démontrée au point 1. de la Proposition 2.3.13, on déduit :

$$2\operatorname{Re}(\Phi_k(L)) - |\Phi_k(L)|^2 = T(k),$$

ce qui donne :

$$\mathcal{J} = \frac{q\hbar}{m} \left(\int_{-\infty}^0 g(k)T(k)kdk + \int_0^{+\infty} g(k)T(k)kdk \right).$$

Pour $k < 0$, $T(k) = \frac{\sqrt{(k^2 - 2mB/\hbar^2)^+}}{|k|} |\Phi_k(0)|^2$ et donc $T(k) = 0$ pour $-\sqrt{2mB}/\hbar < k < 0$. Alors :

$$\int_{-\infty}^0 g(k)T(k)kdk = \int_{-\infty}^{-\sqrt{2mB}/\hbar} g(k)T(k)kdk.$$

On réalise le changement de variable $\hat{k} = \sqrt{k^2 - 2mB/\hbar^2}$ qui vérifie $kdk = \hat{k}d\hat{k}$ et $T(k) = T(\hat{k})$ d'après le point 2. de la Proposition 2.3.13 (car k et $\hat{k}$ vérifient (2.75)). Ce qui donne :

$$\int_{-\infty}^0 g(k)T(k)kdk = - \int_0^{+\infty} g(\sqrt{\hat{k}^2 + 2mB/\hbar^2})T(\hat{k})\hat{k}d\hat{k}.$$

On obtient donc la formule suivante pour le courant :

$$\mathcal{J} = \frac{q\hbar}{m} \int_0^{+\infty} (g(k) - g(\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}))T(k)kdk. \quad (2.12)$$

Calcul numérique du courant

Comme pour le calcul de la densité, on considère la discrétisation : $k_0 = -k_{max}$, $k_p = k_{p-1} + \Delta k_p$, $p = 1, \dots, P$ de l'intervalle $[-k_{max}, k_{max}]$. Alors l'approximation du courant $\mathcal{J}_j$, $j = 0, \dots, J$ en tout point de la discrétisation spatiale $x_j L$ est donnée à partir de la formule (2.11) par :

$$\mathcal{J}_j = \frac{q\hbar}{m} \sum_{p=0}^{P-1} \left(g(k_p) \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \Phi_{p,j} \overline{\Phi_{p,j}} \right) + g(k_{p+1}) \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \Phi_{p+1,j} \overline{\Phi_{p+1,j}} \right) \right) \frac{\Delta k_{p+1}}{2}$$

où les dérivées des fonctions propres généralisées ont été calculées lors de la résolution de l'équation de Schrödinger.

A cause des erreurs numériques, les $\mathcal{J}_j$ ne sont pas tous égaux, mais ils diffèrent peu les uns des autres. On prendra comme courant constant sur tout le domaine la moyenne des $\mathcal{J}_j$, soit $\mathcal{J} = \frac{\sum_{j=0}^J \mathcal{J}_j}{J+1}$.

Un autre moyen de calculer le courant est d'utiliser la formule (2.12) qui à l'avantage de donner directement un courant constant.

2.1.6 Calcul du potentiel, couplage Schrödinger/Poisson

Le potentiel non linéaire V_{NL} est donné à partir de la densité à l'aide de l'équation de poisson avec conditions de Dirichlet homogènes :

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}V_{NL}(x) = \frac{q^2}{\varepsilon}(n(x) - n_D(x)), & (0, L), \\ V_{NL}(0) = V_{NL}(L) = 0. \end{cases}$$

Comme pour l'équation de Schrödinger, on ramène l'équation à l'intervalle $[0, 1]$ en posant $w(x) = V_{NL}(xL)$ pour $x \in [0, 1]$. On obtient le problème :

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}w(x) = \frac{q^2L^2}{\varepsilon}(n(xL) - n_D(xL)), & (0, 1), \\ w(0) = w(1) = 0. \end{cases} \quad (2.13)$$

Si l'on se donne la même discrétisation de $[0, 1]$ que celle définie dans la section précédente, on peut résoudre directement le problème (2.13) à l'aide d'une méthode de différences finies, c'est-à-dire en remplaçant la dérivée seconde de la façon suivante :

$$-\frac{d^2}{dx^2}w(x_j) \approx -\frac{w_{j-1} - 2w_j + w_{j+1}}{\Delta x^2},$$

où les w_j , $j = 0, \dots, J$ sont les approximations des $w(x_j)$, $j = 0, \dots, J$.

Alors, le vecteur $W = (w_j)_{j=1, J-1}$ est obtenu en résolvant le système linéaire de taille $J - 1$ suivant :

$$-D_{xx}W = N,$$

où

$$-D_{xx} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad N = \frac{q^2\Delta x^2L^2}{\varepsilon}(n_j - n_D(x_jL))_{j=1, J-1}$$

où les n_j sont les approximations des $n(x_jL)$.

L'inversion est réalisée en effectuant une décomposition LU de la matrice $-D_{xx}$, décomposition facile à effectuer car la matrice est tridiagonale.

Etant donné un potentiel initial V_{NL}^0 , on peut, en utilisant la méthode décrite dans la section précédente, calculer la densité correspondante $n^0 = n(V_{NL}^0)$. La densité obtenue permet avec la méthode que l'on vient de décrire de calculer un nouveau potentiel, que l'on appellera V_{NL}^1 , à partir de n^0 . Ce procédé, nous donne une relation de récurrence qui, à un potentiel V_{NL}^n , fait correspondre un potentiel V_{NL}^{n+1} . C'est-à-dire que le couplage est réalisé en déterminant V_{NL}^{n+1} solution de :

$$-\frac{d^2}{dx^2}V_{NL}^{n+1} = \frac{q^2}{\varepsilon}(n(V_{NL}^n) - n_D). \quad (2.14)$$

Si ce procédé converge, on aura trouvé le potentiel et la densité qui vérifient le problème Schrödinger/Poisson.

Le problème est que la récurrence directe ainsi définie ne converge pas.

Méthode de relaxation

Pour remédier à cela, on utilise la méthode dite de relaxation décrite ci-dessous :

$$V_{NL}^{n+1} = \alpha V_{NL}^{*,n+1} + (1 - \alpha) V_{NL}^n,$$

où $V_{NL}^{*,n+1}$ est le potentiel obtenu en résolvant, par la méthode décrite plus haut, l'équation de poisson avec la densité $n^n = n(V_{NL}^n)$.

Typiquement, on choisira $\alpha < 0.05$.

Cette méthode converge mais demande beaucoup d'itérations, celle présentée ci-dessous à l'avantage de remédier à cela.

Itération de Gummel

L'idée est que la densité dépend exponentiellement de V , c'est-à-dire qu'elle peut s'écrire de la façon suivante :

$$n[V_{NL}] = \exp\left(-\frac{V}{V_{ref}}\right) \quad (2.15)$$

où $V = V_e + V_{NL}$ et la constante V_{ref} est un potentiel de référence fixé.

On cherche une solution du problème couplé. Il paraît donc légitime de demander que V_{NL}^{n+1} vérifie l'équation de poisson, ce que nous faisons ci-dessous en tenant compte de la forme (2.15) de $n[V_{NL}^{n+1}]$:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2}{dx^2} V_{NL}^{n+1} &= \frac{q^2}{\varepsilon} (\exp(-(V_{NL}^{n+1} + V_e)/V_{ref}) - n_D), \\ &= \frac{q^2}{\varepsilon} (\exp((V_{NL}^n - V_{NL}^{n+1})/V_{ref}) \exp(-(V_{NL}^n + V_e)/V_{ref}) - n_D). \end{aligned}$$

On en déduit la nouvelle équation, permettant de calculer V_{NL}^{n+1} à partir de V_{NL}^n , ci-dessous :

$$-\frac{d^2}{dx^2} V_{NL}^{n+1} = \frac{q^2}{\varepsilon} (n[V_{NL}^n] \exp((V_{NL}^n - V_{NL}^{n+1})/V_{ref}) - n_D). \quad (2.16)$$

Pour réaliser le couplage Schrödinger/Poisson, on utilisera l'itération (2.16) au lieu de l'itération (2.14). C'est la méthode de Gummel.

On considère que la méthode de Gummel a convergé lorsque les deux potentiels successifs V_{NL}^n et V_{NL}^{n+1} sont suffisamment proche, c'est-à-dire :

$$\|V_{NL}^{n+1} - V_{NL}^n\|_2 < \varepsilon,$$

où ε est la tolérance que l'on se donne.

On remarque qu'à la convergence, la densité et le potentiel obtenus vérifient bien

le problème couplé. En effet, considérons qu'à la convergence $V_{NL}^{n+1} = V_{NL}^n = V_{NL}$. Alors la densité est donnée par $n[V_{NL}^n] = n[V_{NL}]$ et ne dépend plus de n .

En utilisant ceci dans l'itération (2.16), on obtient :

$$-\frac{d^2}{dx^2}V_{NL} = \frac{q^2}{\varepsilon}(n[V_{NL}] \exp((V_{NL} - V_{NL})/V_{ref}) - n_D) = \frac{q^2}{\varepsilon}(n[V_{NL}] - n_D),$$

c'est-à-dire que V_{NL} vérifie, à la convergence, l'équation de poisson pour la densité donnée les fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger pour le même potentiel. On a donc bien la solution du problème couplé.

Pour utiliser la méthode de Gummel, on va donc être amené à résoudre l'équation (2.16).

Comme nous l'avons fait précédemment, on ramène l'équation à l'intervalle $[0, 1]$ pour obtenir :

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}w^{n+1}(x) = \frac{q^2L^2}{\varepsilon}(n^n(xL) \exp((w^n(x) - w^{n+1}(x))/V_{ref}) - n_D(xL)), & x \in (0, 1), \\ w^{n+1}(0) = w^{n+1}(1) = 0, \end{cases}$$

où l'on a posé $w^n(x) = V_{NL}^n(xL)$, $x \in [0, 1]$, et $n^n = n[V_{NL}^n]$.

On discrétise cette équation en utilisant une méthode de différences finies ce qui nous donne une équation non linéaire sur les w_j^{n+1} , $j = 1, \dots, J-1$ approximant les $w^{n+1}(x_j)$, $j = 1, \dots, J-1$ en fonctions des w_j^n , $j = 1, \dots, J-1$:

$$-D_{xx}W^{n+1} = F(W^n, W^{n+1}), \quad (2.17)$$

où $W^n = (w_j^n)_{j=1, J-1}$ et

$$F(W^n, W^{n+1}) = \frac{q^2\Delta x^2L^2}{\varepsilon}(n_j^n \exp((w_j^n - w_j^{n+1})/V_{ref}) - n_D(x_jL))_{j=1, J-1},$$

et les n_j^n sont les approximations des $n^n(x_jL)$.

On résout l'équation (2.17) à l'aide d'une méthode Newton. On cherche le vecteur $W \in \mathbb{R}^{J-1}$ annulant la fonction

$$G(W) = -D_{xx}W - F(V, W),$$

pour un vecteur $V \in \mathbb{R}^{J-1}$.

La méthode de Newton s'écrit alors :

$$W^{k+1} = W^k - (DG(W^k))^{-1}G(W^k),$$

où

$$DG(W) = -D_{xx} - D_W F(V, W), \text{ et } D_W F(V, W) = -\text{diag} \left[\left(\frac{n_j^n q^2 \Delta x^2 L^2}{\varepsilon V_{ref}} \exp \left(\frac{v_j - w_j}{V_{ref}} \right) \right) \right]_{j=1, J-1}.$$

où $\text{diag}[(\lambda_j)_{j=1, J-1}]$ est la matrice diagonale ayant pour termes diagonaux les λ_j , $j = 1, \dots, J-1$.

Comme $-D_{xx}$, la matrice DG est tridiagonale, on l'inversera également à l'aide d'une décomposition LU .

Méthode Gummel linéarisée

Cette méthode est obtenue en linéarisant l'exponentielle dans l'équation (2.16). C'est-à-dire que l'on remplace le terme $\exp((V_{NL}^n - V_{NL}^{n+1})/V_{ref})$ par $1 + (V_{NL}^n - V_{NL}^{n+1})/V_{ref}$, ce qui nous donne l'itération suivante :

$$-\frac{d^2}{dx^2}V_{NL}^{n+1} + \frac{q^2 n[V_{NL}^n]}{\varepsilon V_{ref}} V_{NL}^{n+1} = \frac{q^2}{\varepsilon} (n(V_{NL}^n)(1 + V_{NL}^n/V_{ref}) - n_D). \quad (2.18)$$

En introduisant la même discrétisation que dans la section précédente, on obtient l'équation (2.18) sous sa forme discrète :

$$M^n W^{n+1} = N^n,$$

où

$$M^n = -D_{xx} + \text{diag} \left[\left(\frac{n_j^n q^2 \Delta x^2 L^2}{\varepsilon V_{ref}} \right)_{j=1, J-1} \right]$$

et

$$N^n = \frac{q^2 \Delta x^2 L^2}{\varepsilon} (n_j^n (1 + w_j^n/V_{ref}) - n_D(x_j L))_{j=1, J-1}$$

équation que l'on résout en inversant la matrice tridiagonale M^n à l'aide d'une décomposition LU . L'avantage de cette linéarisation est qu'elle permet de remplacer le problème non linéaire correspondant à l'itération de Gummel, dont la résolution demande une méthode de Newton, par un problème linéaire que l'on résout par une simple inversion de matrice.

2.1.7 Calcul du niveau de Fermi

On prendra un niveau de Fermi E_F de sorte à vérifier la neutralité électrique dans le semi-conducteur qui se trouve en dehors de la diode, c'est-à-dire tel que

$$\int_{\mathbb{R}} g(E_F, k) dk = n_D^1, \quad (2.19)$$

où g est la statistique de Fermi définie par (1.15) et n_D^1 est le niveau du dopage du semi-conducteur.

On résout l'équation (2.19) à l'aide d'une méthode de Newton.

Pour cela, on pose

$$F(E) = \int_{\mathbb{R}} g(E, k) dk - n_D^1,$$

et on résout $F(E) = 0$.

Etant donnée une valeur initiale de l'énergie E_0 , l'algorithme est le suivant :

$$E_{n+1} = E_n - F(E_n)/F'(E_n),$$

où

$$F'(E) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \int_{\mathbb{R}} \left(1 + \exp \left(\frac{-E_F + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}{k_B T} \right) \right)^{-1} dk,$$

Les intégrales apparaissant dans le calcul de $F(E_n)$ et $F'(E_n)$ sont réalisées à l'aide de la méthode des trapèzes.

2.1.8 Résumé : algorithme de résolution

La méthode de résolution, correspondant à l'itération de Gummel où la densité est calculée avec un maillage adaptatif en fréquence et utilisée en régime stationnaire, est détaillée ci-dessous.

Algorithme 2.1.3 (Résolution directe).

Etant donné un potentiel initial V^0 .

Tant que l'on a pas la convergence :

Calcul de la densité

On prend $k_0 = -k_{max}$.

Tant que $k_p < k_{max}$:

- Calcul de Φ_p^n fonction propre généralisée associée au potentiel V^n et à la fréquence k_p , selon la méthode expliquée dans la section 2.1.3.
- Calcul de $\frac{d}{dk} \log T(k_p)$ selon les formules (2.72) et (2.73) → choix du pas en fréquence Δk_{p+1} .
- Incrément de la fréquence $k_{p+1} = k_p + \Delta k_{p+1}$.

Fin tant que.

Calcul de la densité n^n à partir des Φ_p^n à l'aide de la formule des trapèzes :

$$n_j^n = \sum_{p \geq 0} (g(k_p) |\Phi_{p,j}^n|^2 + g(k_{p+1}) |\Phi_{p+1,j}^n|^2) \frac{\Delta k_{p+1}}{2},$$

Couplage, itération de Gummel

- Calcul du potentiel V^{n+1} à partir du potentiel V^n et de la densité n^n en résolvant l'équation (2.16).
- Test de convergence : si $\|V^{n+1} - V^n\|_2$ est suffisamment petite, on arrête.

Fin tant que.

2.1.9 Résultats numériques

Les valeurs des paramètres physiques utilisés pour l'ensemble des applications numériques sont ci-dessous :

T	n_D^1	n_D^2	m	E_F
300K	$1 \times 10^{24} m^{-3}$	$5 \times 10^{21} m^{-3}$	0,067me	$6,7097 \times 10^{-21}$

La valeur de E_F apparaissant dans le dernier tableau est obtenue par la méthode de Newton de sorte à vérifier la neutralité électrique comme cela est présenté dans la section 2.1.7.

Test 1 : Deux barrières de même taille égale à celle du puits (cas standard)

Dans ce cas, les barrières ont une épaisseur de $5nm$ chacune. La largeur du puits, étant l'écart entre les deux barrières, vaut $5nm$. La hauteur de la barrière est de

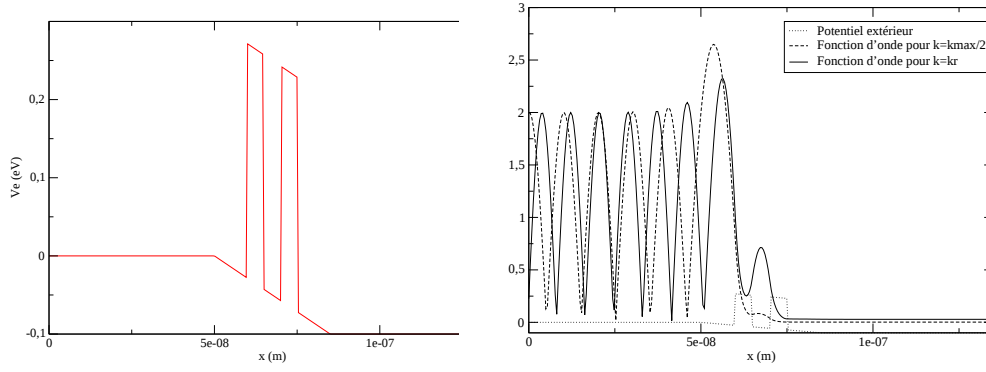


FIG. 2.2 – Potentiel extérieur pour $B = 0.1$ eV et fonction propre généralisée correspondant pour $k = k_{max}/2$ et $k = k_R$.

0,3eV.

Ces données concernant le potentiel extérieur sont réunies dans le tableau suivant :

L	a_1	a_2	a_3	b_3	b_2	b_1	v_0
135nm	50nm	60nm	65nm	70nm	75nm	85nm	0.3eV

Les calculs ont été réalisés avec un nombre de points de discrétisation en espace valant $J = 300$. Le pas obtenu vérifie alors la condition $\Delta x < 2\pi/k_{max}$, c'est-à-dire qu'il est plus petit que la plus petite des longueurs d'onde propres aux ondes incidentes. On remarque que $J = 150$ suffit pour vérifier cette condition.

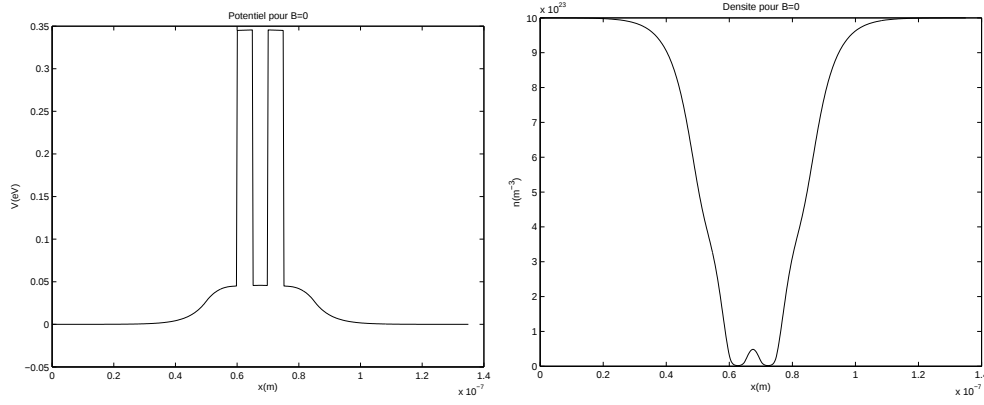
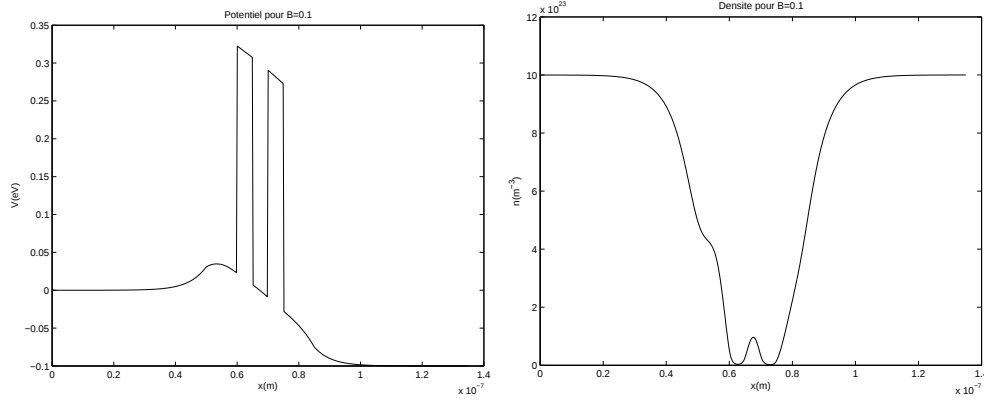
Pour illustrer l'étape de calcul de la densité à partir du potentiel $V_e + V_{NL}$, où V_e est donné par $B = 0.1$ eV et V_{NL} est le potentiel obtenu après résolution du problème de Schrödinger-Poisson, nous avons représenté Figure 2.2 des fonctions d'ondes Φ_k correspondant à un tel potentiel. Sur le graphique de gauche de la figure Figure 2.2 se trouve le potentiel V_e , et sur la figure de droite la fonction Φ_k pour $k = k_{max}/2$ et $k_R = \frac{\sqrt{2mE_R}}{\hbar}$ (E_R désigne la première énergie résonante) avec $J = 300$ points de discrétisation en espace.

Les deux valeurs de k étant positives, l'onde arrive de la gauche. On remarque que Φ_k s'éteint exponentiellement dans la barrière mais que, grâce à la résonance, des électrons sont capturés à l'intérieur du puits et la fonction d'onde est non nulle dans cette zone.

Pour le calcul de la densité, le maillage en fréquence est adaptatif. Le seuil que l'on a choisi pour le changement de pas est $1350A$. Nous avons pris pour pas minimum $\delta = 4 \times 10^{-5} A^{-1}$ ($1A = 1,0 \times 10^{-10} m$) et $\Delta = 4\delta$ pour pas maximum. Cette méthode de discrétisation demande environ 460 points d'intégration en fréquence pour $B = 0$, environ 530 points pour $B = 0.1$ et environ 510 points pour $B = 0.2$.

En ce qui concerne la méthode de Gummel, on considère qu'elle a convergé lorsque les potentiels donnés par deux itérations consécutives sont suffisamment proches, c'est-à-dire lorsque $\|V_{NL}^n - V_{NL}^{n-1}\|_2$ est en dessous de la tolérance $tol = 1 \times 10^{-10}$. Ici $\|\cdot\|_2$ désigne la norme 2 dans $\mathbb{R}^{J-1}$.

Il est important de noter que la méthode de Gummel ne converge pas pour tout potentiel initial.


FIG. 2.3 – Densité et potentiel en régime stationnaire dans le cas $B = 0$

FIG. 2.4 – Densité et potentiel en régime stationnaire dans le cas $B = 0.1$

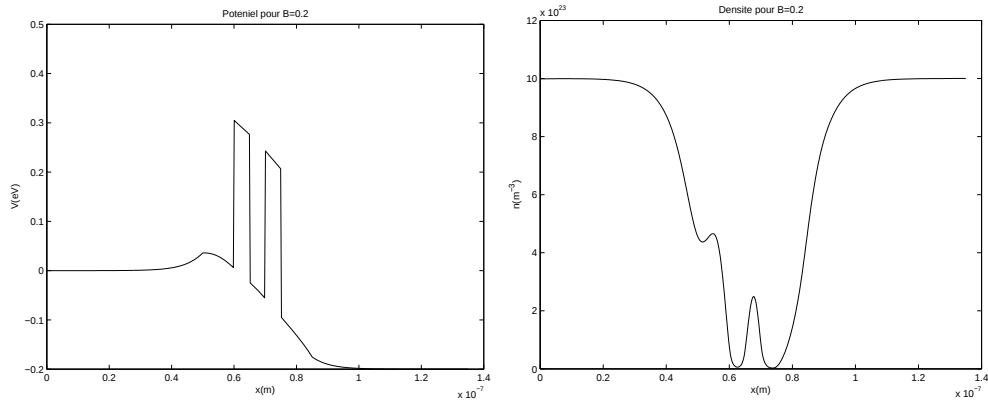
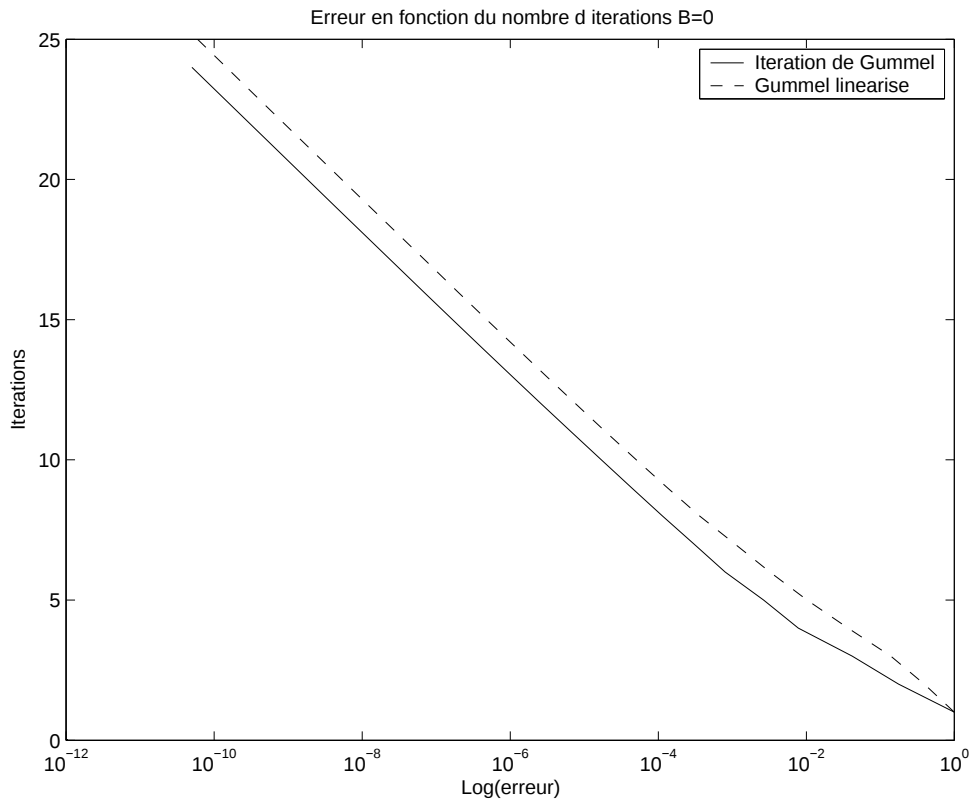
Pour $B = 0$, la méthode de Gummel converge en prenant $V_{NL}^0 = 0$, c'est ce que nous avons fait.

Pour $B \neq 0$, la méthode de Gummel ne converge pas en général en prenant $V_{NL}^0 = 0$, on initialisera la méthode de Gummel en fixant V_{NL}^0 à la valeur finale de V_{NL} obtenue pour $B = 0$.

Les figures Figure 2.3, 2.4, 2.5 représentent la densité en fonction de la variable d'espace pour les valeurs $B = 0$, $B = 0.1$, $B = 0.2$ de la différence de potentiel.

Afin de comparer l'efficacité des deux méthodes de couplage, nous avons représenté sur un même graphique, Figure 2.6, le logarithme de l'erreur relative $\frac{\|V_{NL}^n - V_{NL}^{n-1}\|_2}{\|V_{NL}^{n-1}\|_2}$ en fonction du nombre d'itérations n pour la méthode de Gummel et pour la méthode de Gummel linéarisée.

On remarque que les deux méthodes convergent à une précision élevée, environ 10^{-10} , en peu d'itérations, environ 25 itérations. La méthode de Gummel linéarisée converge moins rapidement que la méthode de Gummel mais elle a un coût de réalisation moins élevé puisqu'elle ne demande pas de méthode de Newton à chaque itération contrairement à celle de Gummel.


 FIG. 2.5 – Densité et potentiel en régime stationnaire dans le cas $B = 0.2$

 FIG. 2.6 – Convergence des différents algorithmes de couplage pour $B = 0$

La Figure 2.7 présente le graphique de la caractéristique courant/tension de la RTD. C'est un graphique important car il permet de caractériser une RTD et fait apparaître l'effet de résistance différentielle négative. Nous l'avons tracé en résolvant le problème de Schrödinger/Poisson pour une suite de valeurs $(B_p)_{p=0,\dots,P}$ du bias B , où la méthode de Gummel pour le bias B_p est initialisée au potentiel obtenu après convergence pour le bias B_{p-1} , et en calculant à chaque fois le courant correspondant (qui est constant sur le domaine en régime stationnaire). Nous avons réalisé ce procédé avec $P = 500$ et B_p une discrétisation uniforme croissante de l'intervalle $[0, 0.3]$. Nous l'avons démarré en prenant le potentiel nul comme valeur initiale de la méthode de Gummel pour $B_0 = 0$.

Le graphique obtenu correspond à ce que donne l'expérience, voir [13], [17], au moins de façon qualitative et cela est le plus important pour les caractéristiques courant-tension.

On remarque que des instabilités sont observées dans la zone $0.14 \leq B \leq 2.1$. Elles sont dues à la présence de deux solutions proches, du système de Schrödinger-Poisson. On peut observer l'existence de ces deux solutions en faisant successivement une courbe courant tension par continuation, comme nous l'avons expliqué ci-dessus, en augmentant B et en diminuant B . On remarque que deux chemins différents sont suivis à l'aller et au retour. Un tel procédé est expliqué plus en détail dans le Test 2 de cette section. Pour ce test, la largeur des barrières fait que l'on observe l'existence de solutions bien distantes, Figure 2.8. Nous renvoyons au Chapitre 3 pour des tests autour du phénomène d'hystérésis.

Test 2 : Deux barrières, deuxième barrière plus large que la première

Les données concernant le potentiel extérieur sont réunies dans le tableau suivant :

L	a_1	a_2	a_3	b_3	b_2	b_1	v_0
135nm	50nm	60nm	63nm	69nm	75nm	85nm	0.3eV

Les calculs ont été réalisés avec un nombre de points de discrétisation en espace valant $J = 300$. On a utilisé le même procédé de maillage adaptatif en fréquence et la même tolérance pour conditionner la convergence de l'itération de Gummel que ceux présentés dans le Test 1.

Le potentiel extérieur utilisé est représenté sur le graphique de gauche de la Figure 2.8 pour $B = 0.25$.

Sur le graphique de droite de la Figure 2.8, nous avons représenté la courbe caractéristique courant/tension obtenue en faisant croître la différence de potentiel (courbe en ronds) et en faisant décroître la différence de potentiel (courbe en points). Pour cela, nous avons appliqué le même procédé que celui expliqué dans le Test 1 en prenant pour suite de valeurs du bias B , la suite $(B_p)_{p=0,\dots,2P}$ définie par $B_p = p dB$ pour $p = 0, \dots, P$, et $B_p = (2P - p)dB$ ($= B_{2P-p}$) pour $p = P + 1, \dots, 2P$ où $dB = 0.3/P$. Ici, nous avons pris $P = 300$.

On remarque que la courbe courant/tension obtenue en faisant croître le bias est

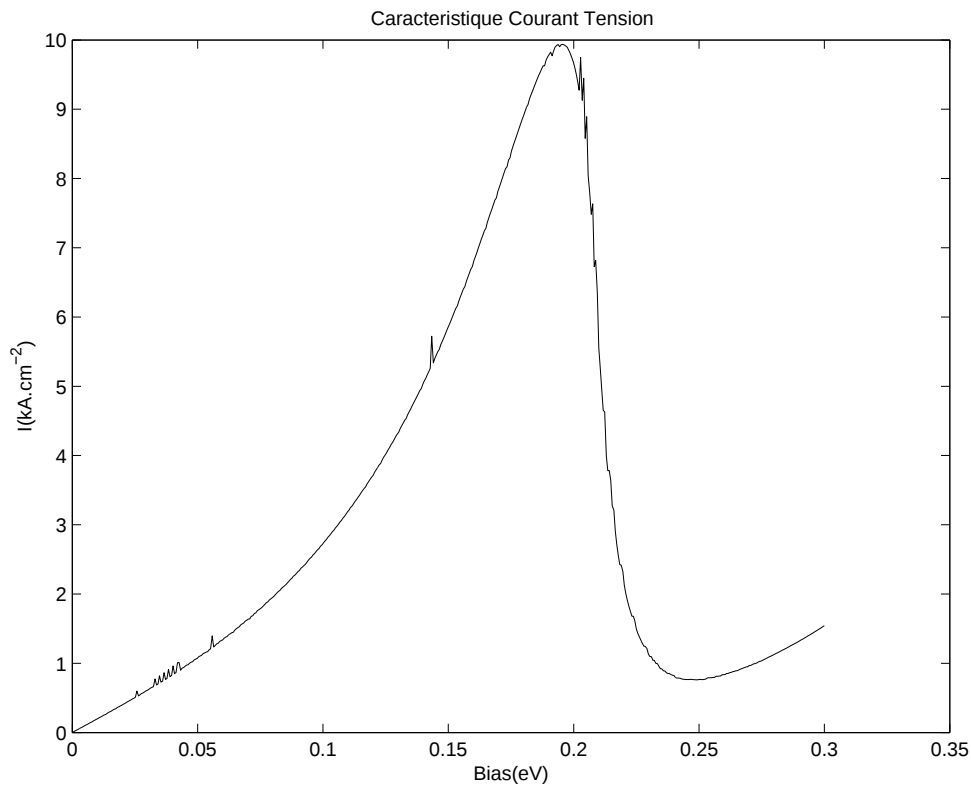


FIG. 2.7 – Caractéristique courant/tension de la diode pour deux barrières de taille égale celle du puits

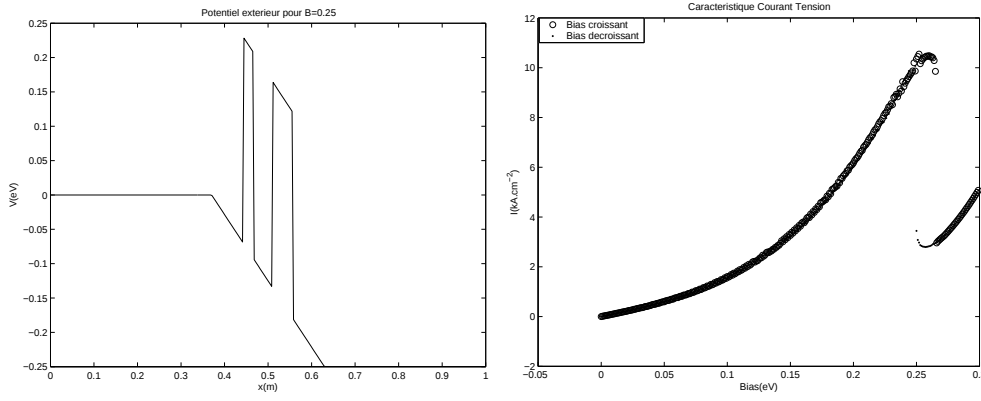


FIG. 2.8 – Potentiel extérieur et caractéristique courant/tension de la diode pour deux barrières, la deuxième étant plus large que la première.

différente de la courbe obtenue en le faisant décroître : on a deux valeurs du courant possibles pour la même différence de potentiel. C'est ce que l'on appelle un phénomène d'hystérésis.

L'obtention de deux valeurs du courant pour la même valeur de la différence de potentiel est due au fait que la méthode de Gummel ne converge pas vers la même solution du problème couplé Schrödinger/Poisson (qui n'a pas une solution unique) selon son initialisation.

Pour une différence de potentiel de $B = 0.25$ étant le lieu du maximum de la courbe caractéristique courant/tension, la densité obtenue est représentée sur la Figure 2.9. On remarque que le fait que la deuxième barrière soit plus large que la première a pour effet de piéger plus de particules entre les deux barrières qu'habituellement.

Test 3 : Deux barrières, première barrière plus large que la deuxième

Les données concernant le potentiel extérieur sont réunies dans le tableau suivant :

L	a_1	a_2	a_3	b_3	b_2	b_1	v_0
135nm	50nm	60nm	66nm	72nm	75nm	85nm	0.3eV

Les calculs ont été réalisés avec un nombre de points de discrétisation en espace valant $J = 300$. On a utilisé le même procédé de maillage adaptatif en fréquence et la même tolérance pour conditionner la convergence de l'itération de Gummel que ceux présentés dans le Test 1.

Le potentiel extérieur utilisé est représenté sur le graphique de gauche de la Figure 2.10 pour $B = 0.16$. En utilisant le même procédé que pour le Test 1, avec $P = 300$, on obtient la courbe courant/tension représentée sur le graphique de droite de la Figure 2.10 sur laquelle on voit que le comportement de la RTD est plus stable lorsque la première barrière est plus large que la deuxième.

Pour une différence de potentiel de $B = 0.16$, qui est le lieu du maximum de

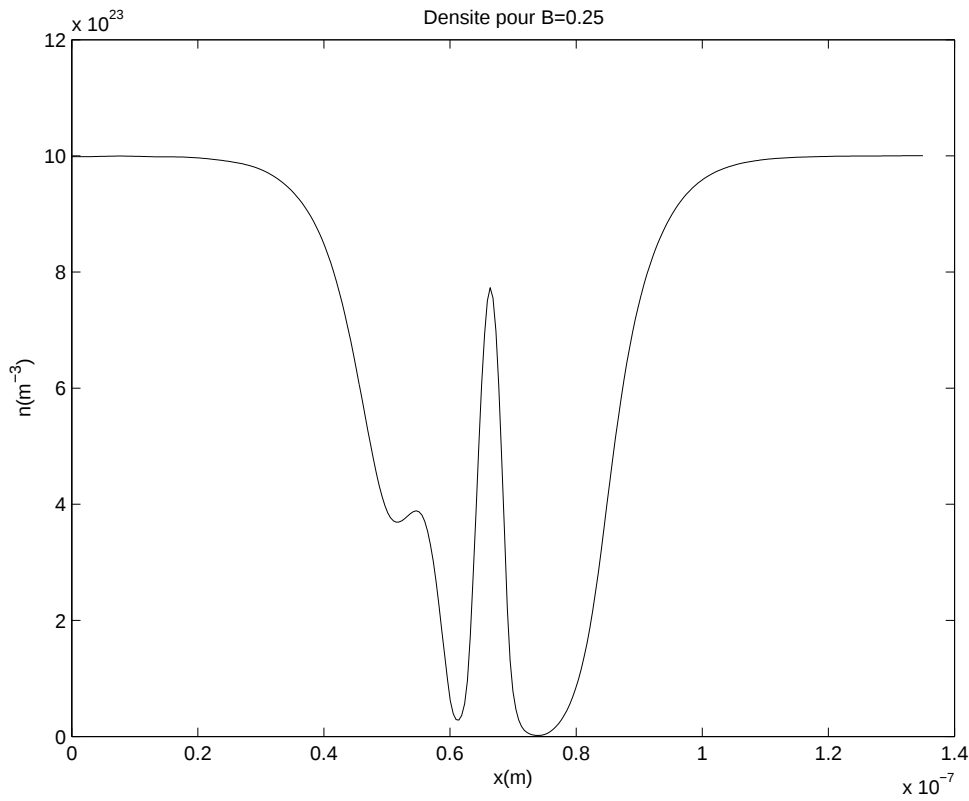


FIG. 2.9 – Densité de répartition des électrons dans la diode pour deux barrières, la deuxième étant plus large que la première avec $B = 0.25$.

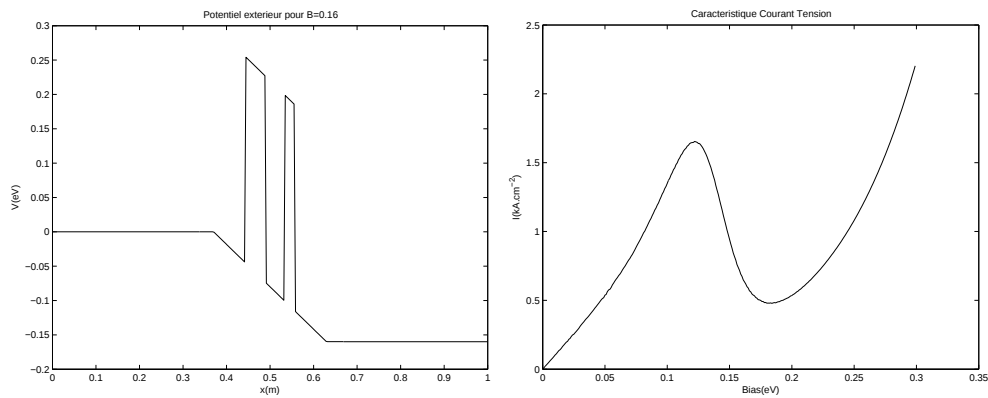


FIG. 2.10 – Potentiel extérieur et caractéristique courant/tension de la diode pour deux barrières, la première étant plus large que la deuxième.

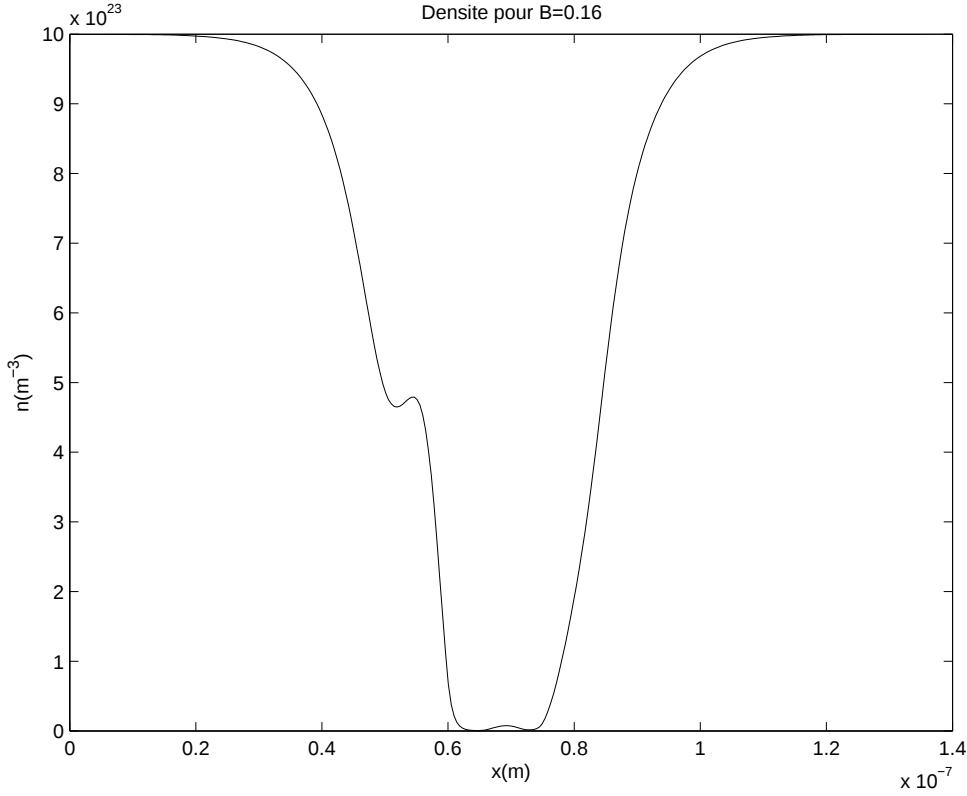


FIG. 2.11 – Densité de répartition des électrons dans la diode pour deux barrières, la première étant plus large que le deuxième avec $B = 0.25$.

la courbe caractéristique courant/tension, la densité obtenue est représentée sur la Figure 2.11. On remarque que le fait que la première barrière soit plus large a pour effet de piéger les particules avant la première barrière et pas entre les deux barrières comme on a pour les tests précédents.

2.2 Régime stationnaire : décomposition sur l'état résonant

Comme nous l'avons fait dans la section 1.5.2 en vue de simplifier les notations nous poserons pour cette partie

$$h = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}, \quad V = V_e + V_{NL} \quad (2.20)$$

Dans cette section, nous serons amené à résoudre le problème (1.47). On utilisera donc fréquemment la racine complexe $s(z)$ apparaissant dans ce problème et définie par (1.46).

2.2.1 Description de la méthode

Dans cette partie, nous donnons un algorithme permettant de calculer la densité de répartition des particules en utilisant la décomposition sur le premier mode résonant. Le fait de choisir le premier mode résonant est appelé approximation à un seul mode dans [39]. Elle est justifiée par la Proposition (1.5.16) puisqu'elle nous dit que le seul élément résonant intéressant, d'énergie assez faible pour ne pas être coupé par la fonction de répartition g , est le premier.

L'idée de cet algorithme est de calculer la résonance et de recueillir ainsi toute l'information donnée par la résonance sans avoir à raffiner le maillage en fréquence autour du pic de résonance.

Les fonctions propres généralisées de l'Hamiltonien qui permettent de construire la densité sont obtenues en les décomposant en une partie non résonante et une partie proportionnelle au mode résonant. Cet algorithme permet de prendre peu de points en fréquence puisque les fonctions non résonantes varient lentement avec la fréquence et la résonance est captée dans la partie résonante à l'aide du mode résonant.

Idée de l'algorithme

Selon une idée de [39] adaptée au régime stationnaire, nous présentons l'algorithme de [9] permettant de calculer la densité de répartition des électrons à partir du potentiel en utilisant le mode résonant.

Soit une énergie E_k donnée,

$$E_k = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - B, & k < 0 \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, & k \geq 0 \end{cases}$$

l'idée de [39] est de décomposer le calcul de la fonction propre généralisée solution de

$$-h^2 \frac{d^2}{dx^2} \Phi_k(x) + (V_e(x) + V_{NL}(x)) \Phi_k(x) = E_k \Phi_k(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.21)$$

pour l'énergie E_k , en deux étapes (dans l'article [39] la fonction propre Φ_k est solution de Schrödinger instationnaire).

Tout d'abord, on se donne le potentiel

$$V_{fill} = V_e + v_0 \mathbf{1}_{[a_3, b_3]},$$

obtenu en bouchant le puits apparaissant dans le potentiel V_e . La première étape est alors de calculer Φ_k^e solution de

$$-h^2 \frac{d^2}{dx^2} \Phi_k^e(x) + (V_{fill}(x) + V_{NL}(x)) \Phi_k^e(x) = E_k \Phi_k^e(x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.22)$$

La seconde étape est de chercher Φ_k solution de (2.21) sous la forme $\Phi_k = \Phi_k^e + \Phi_k^i$ où Φ_k^e est donnée comme ci-dessus. Alors, en l'injectant dans (2.21), on voit que la

fonction Φ_k^i doit résoudre :

$$-h^2 \frac{d^2}{dx^2} \Phi_k^i(x) + (V_e(x) + V_{NL}(x)) \Phi_k^i(x) = E_k \Phi_k^i(x) + v_0 \mathbf{1}_{[a_3, b_3]} \Phi_k^e(x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.23)$$

Les niveaux d'énergie E_k ayant une contribution non nulle à la densité, tels que $g(k)$ est non négligeable, sont plus petits que V_{fill} sur $[a_3, b_3]$. Pour les énergies intéressantes, on en déduit que $[a_3, b_3]$ est une région interdite d'un point de vue classique et par un argument de localisation de support, les solutions de (2.22) sont négligeables à l'intérieur du puits. On les note Φ_k^e où la lettre "e" signifie extérieur. On montre, également par un argument de localisation de support, que Φ_k^i est négligeable dans les barrières, la lettre "i" signifiant non négligeable à l'intérieur du puits.

Comme on veut Φ_k sur l'intervalle $[0, L]$ seulement, on calcule les Φ_k^e en résolvant (2.22) avec des conditions aux limites transparentes. On traite (2.23) avec une approximation à un seul mode. Pour cela, on considère que (2.23) que ce qui est à l'intérieur du puits est bien décrit par le mode résonant. Mode résonant que l'on peut penser comme un quasi état borné qui est non nul à l'intérieur du puits. Ce qui nous amène à chercher les Φ_k^i proportionnels au mode résonant "fondamental" (mode résonant de plus petite énergie) correspondant au potentiel $V = V_e + V_{NL}$. Le mode résonant est calculé sur l'intervalle $[0, L]$ également ce qui demande l'utilisation de conditions aux limites résonantes.

Calcul de la résonance

Par calcul de la résonance nous voulons dire calcul de la valeur de la résonance qui nous intéresse et du mode propre associé sur l'intervalle $[0, L]$. Comme nous l'avons remarqué, le calcul d'une résonance revient à trouver une solution du problème (1.47). On peut le faire en résolvant un problème de valeur propre non linéaire à l'aide d'une méthode de Newton autour d'une valeur propre du problème avec conditions aux limites de type Dirichlet correspondant.

Expliquons cette dernière affirmation. On discrétise le problème (1.47) à l'aide d'une méthode éléments finis P^1 . Les inconnues du problème discrétisé sont le vecteur propre $u \in \mathbb{C}^n$ et la valeur propre associée z , soit un problème à résoudre dans $\mathbb{C}^{n+1}$.

L'avantage de la méthode éléments finis est qu'elle permet de rentrer les conditions aux limites dans la matrice du problème. Or, les conditions aux limites apparaissant dans le problème (1.47) font intervenir les fonctions $s(z)$ et $s(z + B)$ non linéaires en z , on parle donc de problème aux valeurs propres non linéaire. Les problèmes de ce type sont étudiés dans [20].

La matrice du problème est une fonction non linéaire de z , notée $M(z)$. On montrera que le problème discret s'écrit sous la forme :

$$M(z)u = 0, \quad \text{avec} \quad M(z) = [A + s(z)B + s(z + B)C - zD],$$

où A, B, C et D sont des matrices carrées de dimension n à coefficients complexes. Ce problème se distingue bien du problème linéaire aux valeurs propres que l'on a

l'habitude de rencontrer :

$$(A - zI)u = 0.$$

Si $M(z)$ est polynomiale, on peut se ramener au cas linéaire en agrandissant la taille du problème à résoudre [20], [37].

Remarque 2.2.1. Si la différence de potentiel B est nulle, la non linéarité est en $s(z)$ alors il suffit de poser $w = s(z)$ pour obtenir une matrice polynomiale d'ordre 2. Dans ce cas on peut se ramener à un problème linéaire mais pour B quelconque cela n'est pas possible.

Dans [20], un algorithme de résolution, intéressant pour les problèmes de valeurs propres non linéaires de grande taille, est proposé. Dans notre cas, la taille du problème n'étant pas excessivement élevée, la méthode de résolution la plus intéressante semble être la méthode de Newton. Pour les problèmes de valeurs propres non linéaires celle-ci est étudiée dans [37]. Il y est montré que la méthode de Newton revient à une méthode de la puissance inverse dans le cas polynômial.

Ecriture du problème discret

On cherche à résoudre le problème (1.47) qui, en utilisant (2.20), s'écrit :

$$\begin{cases} -h^2 u'' + Vu - zu = 0, & (0, L), \\ hu'(0) + is(z)u(0) = 0, \\ hu'(L) - is(z + B)u(L) = 0. \end{cases}$$

La formulation faible correspondant à l'équation de Schrödinger dans (1.47) est : $\forall v \in H^1(0, L)$,

$$h^2 \int_0^L u' \overline{v'} dx + \int_0^L V u \overline{v} dx + h^2 [(u' \overline{v})(0) - (u' \overline{v})(L)] - z \int_0^L u \overline{v} dx = 0.$$

On cherche u solution du problème (1.47) alors u vérifie les conditions aux limites transparentes homogènes (dites conditions aux limites résonantes). On peut alors remplacer les termes de bords dans l'équation précédente ce qui donne : $\forall v \in H^1(0, L)$,

$$\begin{aligned} h^2 \int_0^L u' \overline{v'} dx + \int_0^L V u \overline{v} dx - ih[s(z)(u \overline{v})(0) + s(z + B)(u \overline{v})(L)] \\ - z \int_0^L u \overline{v} dx = 0. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Comme nous l'avons dit précédemment, l'avantage de la formulation faible est qu'elle contient les conditions aux limites.

On se donne une discrétisation $x_0 = 0 < x_1 < \dots < x_{J-1} < x_J = L$ du domaine

$[0, L]$ de pas constant Δx . On utilise la base éléments finis P^1 des polynômes $p_j(x)$, $j = 0, \dots, J$ définis par :

$$p_0(x) = \begin{cases} \frac{x-x_1}{x_0-x_1}, & x_0 < x < x_1, \\ 0, & x > x_1 \end{cases} \quad (2.25)$$

$$p_j(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{j-1}}{x_j-x_{j-1}}, & x_{j-1} < x < x_j, \\ \frac{x-x_{j+1}}{x_j-x_{j+1}}, & x_j < x < x_{j+1}, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}, \quad j = 1, \dots, J-1, \quad (2.26)$$

$$p_J(x) = \begin{cases} 0, & x < x_{J-1}, \\ \frac{x-x_{J-1}}{x_J-x_{J-1}}, & x_{J-1} < x < x_J. \end{cases} \quad (2.27)$$

En écrivant $u = \sum_{j=0}^J u_j p_j$, où les u_j sont les approximations des valeurs nodales de la solution, et en injectant u dans la formulation faible (2.24) avec $v = p_k$, $k = 0, \dots, J$, on obtient la matrice $M(z)$ du problème discret :

$$M(z) = [A + s(z)B + s(z+B)C - zD],$$

où

$$A = \left(h^2 \int_0^L p'_j p'_k dx + \int_0^L V p_j p_k dx \right)_{0 \leq j, k \leq J} \quad C = \begin{pmatrix} -ih & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & 0 & \\ 0 & & & \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

$$D = \begin{pmatrix} & 0 \\ & \vdots \\ 0 & & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -ih \end{pmatrix} \quad E = \left(\int_0^L p_j p_k dx \right)_{0 \leq j, k \leq J} \quad (2.29)$$

Les valeurs explicites des coefficients des matrices A et E sont données dans l'Appendice 2.B.

Résolution du problème discret : détection des résonances

On résout le problème aux valeurs propres non linéaires à l'aide d'une méthode de "type" Newton. Pour faciliter la présentation, nous la qualifions parfois de méthode de Newton.

On cherche $u \in \mathbb{C}^n$ et $z \in \mathbb{C}$ tels que $M(z)u = 0$, cela revient à chercher un zéro de la fonction $(u, z) \mapsto M(z)u$ définie de $\mathbb{C}^{n+1}$ dans $\mathbb{C}^n$.

Puisque nous allons utiliser une méthode de Newton, il est préférable de chercher le zéro d'une fonction de $\mathbb{C}^{n+1}$ dans $\mathbb{C}^{n+1}$ ayant des dérivées qui sont des matrices carrées de taille $n+1$ que l'on pourra inverser plus facilement.

Pour cela, on ajoute une condition de normalisation sur le vecteur u . On cherche donc à résoudre le problème :

$$\begin{cases} M(z)u = 0, \\ u^H u = 1, \end{cases}$$

Cela revient à résoudre de problème

$$\Phi(u, z) = 0,$$

où

$$\begin{aligned} \Phi : \mathbb{C}^{n+1} &\rightarrow \mathbb{C}^{n+1} \\ (u, z) &\mapsto (M(z)u, u^H u - 1) \end{aligned}$$

On remarque que $u^H u$ n'est pas holomorphe, sa dérivée ne peut donc pas être représentée par un élément de $\mathbb{C}^n$ et Φ n'admet pas une différentielle représentable par une matrice. La méthode de Newton, faisant intervenir l'inverse de la matrice Jacobienne de la fonction à annuler, ne peut pas être appliquée telle qu'on la connaît. En nous inspirant de [37], nous allons présenter une itération Newton modifiée.

On se donne un itéré (u_n, z_n) tel que $u_n^H u_n = 1$, alors on cherche un incrément $(\delta u_n, \delta z_n)$ tel que $\Phi(u_n + \delta u_n, z_n + \delta z_n) = 0$.

Or en négligeant les termes d'ordres 2 en l'incrément, on a :

$$M(z_n + \delta z_n)(u_n + \delta u_n) = M(z_n)(u_n + \delta u_n) + \delta z_n M'(z_n)u_n,$$

et

$$(u_n + \delta u_n)^H (u_n + \delta u_n) - 1 = u_n^H \delta u_n + \delta u_n^H u_n,$$

où nous avons utilisé le fait que $u_n^H u_n = 1$.

Comme on le fait pour écrire la méthode de Newton ordinaire, on demande $\Phi(u_n + \delta u_n, z_n + \delta z_n) = 0$ à l'ordre 2. On trouve alors les équations :

$$M(z_n)\delta u_n + \delta z_n M'(z_n)u_n = -M(z_n)u_n,$$

et

$$u_n^H \delta u_n + \delta u_n^H u_n = 0. \quad (2.30)$$

L'équation (2.30) pose problème numériquement. En effet, on ne peut pas factoriser par δu_n . Comme nous l'avons dit précédemment, cela est dû à la non différentiabilité de $u^H u$.

Cependant, on peut remédier à cela, en demandant $u_n^H \delta u_n = 0$, condition impliquant que (2.30) soit vérifiée.

On en déduit qu'il suffit de choisir $(\delta u_n, \delta z_n)$ tel que

$$\begin{bmatrix} M(z_n) & M'(z_n)u_n \\ u_n^H & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta u_n \\ \delta z_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r_n \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{où } r_n = M(z_n)u_n. \quad (2.31)$$

Ce calcul d'incrément constitue l'itération que nous utiliserons pour la résolution du problème aux valeurs propres non linéaire. Elle constitue ce que nous appelons, par abus, méthode de Newton.

Pour obtenir cette itération, nous avons supposé que $u_n^H u_n = 1$, mais nous conserverons cette itération dans le cas général en choisissant le premier itéré (u_0, z_0) de sorte que $u_0^H u_0 = 1$.

Ceci est justifié puisque si $u_0^H u_0 = 1$, alors l'itéré suivant $(u_1, z_1) = (u_0 + \delta u_0, z_0 + \delta z_0)$ est tel que $u_1^H u_1 = 1$ à l'ordre 2 et ainsi de suite.

Remarque 2.2.2. On pourrait vérifier que la matrice apparaissant dans le système (2.31) est non dégénérée.

Dans le cas linéaire, $M(z) = A - zI$, on montre [37] que la matrice

$$\begin{bmatrix} M(z) & M'(z)u \\ u^H & 0 \end{bmatrix} \quad (2.32)$$

est non dégénérée lorsque z est une valeur propre de A de multiplicité algébrique 1 et u un vecteur propre associé.

Dans notre cas, la multiplicité de la résonance est 1 c'est-à-dire que pour z résonance donnée l'ensemble des modes propres associés est un espace de dimension 1 [36]. On en déduit que le problème discret associé vérifie $\dim(\text{Ker}(M(z))) = 1$.

On devrait pouvoir en déduire que la matrice (2.32) de la méthode de Newton est non dégénérée lorsque z est une résonance et u le mode résonant associé. La propriété de non dégénérescence d'une matrice est stable par petite perturbation. Donc si l'algorithme de Newton est initialisé dans une zone suffisamment proche de (u, z) et que les itérés (u_n, z_n) restent dans cette zone, alors la matrice du problème (2.31) sera inversible pour tout n .

Initialisation de la méthode de Newton

Si l'on initialise la méthode de Newton présentée ci-dessus de façon aléatoire, elle risque de ne pas converger vers la résonance cherchée. Il faut donc l'initialiser dans une région proche de la résonance "fondamentale". Pour cela, on peut utiliser la Proposition 1.5.16 qui nous dit que la résonance est exponentiellement proche du mode fondamental de l'Hamiltonien avec conditions aux limites de type Dirichlet noté H_D .

On peut initialiser la méthode de Newton à $(u_0, z_0) = (e_0, E_0)$ donné par la résolution du problème qui consiste à trouver la plus petite valeur E_0 telle qu'il existe e_0 vérifiant :

$$\begin{cases} -h^2 e_0'' + V e_0 = E_0 e_0, & (0, L), \\ e_0(0) = e_0(L) = 0. \end{cases} \quad (2.33)$$

On peut résoudre ce problème en calculant la plus petite valeur propre de la matrice M_0 obtenue en discrétisant par différences finies l'opérateur $-h^2 \frac{d^2}{dx^2} + V$.

Cependant, on obtient de meilleurs résultats en résolvant (2.33) avec une autre matrice M_0 calculée à l'aide de la méthode de DVR-FBR présentée dans [28]. Cette

méthode consiste à approcher l'opérateur Hamiltonien H_D par sa restriction à un ensemble fini d'éléments de la base des fonctions propres de l'opérateur $y \mapsto y''$ avec conditions aux limites de Dirichlet homogènes, ceci donnant lieu à une matrice.

La plus petite valeur propre de M_0 est calculée avec la méthode de la puissance inverse. Plus précisément, on pose $M_1 = M_0 + B$, alors M_1 est symétrique définie positive (elle est la discrétisation de l'opérateur $-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V + B$ qui est auto-adjoint positif) et ses valeurs propres sont réelles positives. On cherche la plus petite d'entre-elles. La matrice M_1 étant symétrique, on peut lui appliquer la méthode de la puissance inverse [41]. Celle-ci fait appel à l'inverse de M_1 à plusieurs reprises, il est donc intéressant de réaliser la décomposition de Cholewski de M_1 [41] possible car M_1 est symétrique définie positive. Alors son inversion est réduite à l'inversion successive de deux matrices triangulaires. On a donc accès à la plus petite valeur propre λ_0 de M_1 . On obtient $E_0 = \lambda_0 - B$.

Remarque 2.2.3. Par ce procédé, on peut s'attendre à avoir E_0 négative, car rien ne garantit que $\lambda_0 > B$.

Cependant, dans la pratique on a $E_0 > 0$, mais nous ne donnons pas ici la preuve de ce résultat.

Initialiser la méthode de Newton à $(u_0, z_0) = (e_0, E_0)$ fonctionne mais on peut trouver une meilleure initialisation.

Tout d'abord, on sait que la résonance aura une partie imaginaire négative de petite taille, donc pour se rapprocher de la solution, on peut poser

$$z_0 = E_0 - i\delta_0$$

où $\delta_0 > 0$ est petit devant E_0 .

Ensuite, il est courant d'initialiser u_0 à la solution en E_0 du problème de référence que l'on cherche à approcher par décomposition sur la résonance. Dans notre cas, cela revient à prendre :

$$u_0 = M(E_0)^{-1}S_0, \text{ où } S_0 = [2ih\sqrt{E_0}, 0, \dots, 0].$$

c'est-à-dire que u_0 est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire pour l'énergie E_0 avec conditions aux limites transparentes relatives au vecteur d'onde d'énergie E_0 .

Ce procédé est intéressant puisque, E_0 étant proche de la résonance z , la matrice $M(E_0)$ est proche d'être singulière et $M(E_0)^{-1}S_0$ est proche d'être un mode résonant. Dans le cas linéaire $M(\lambda) = A - \lambda I$ avec A telle que S admette la décomposition :

$$S = \sum_{i=1}^n \alpha_i u_i, \text{ où } Au_i = \lambda_i u_i.$$

Alors

$$M(\lambda)^{-1}S = \sum_{i=1}^n \alpha_i (\lambda_i - \lambda)^{-1} u_i,$$

est proche d'être un u_j lorsque λ est proche de λ_j et le coefficient α_j est non nul. D'autre part, la quantité $M(E_0)^{-1}S_0$ est calculée avec la même matrice que celle intervenant dans la méthode Newton alors que e_0 , fonction propre de H_D , est calculée avec une méthode différente. Donc initialiser le Newton en $u_0 = M(E_0)^{-1}S_0$ semble plus adapté au niveau de "l'adéquation des méthodes".

Décomposition sur la résonance

Comme nous l'avons dit dans la présentation de l'algorithme, on cherche Φ_k sous la forme $\Phi_k = \Phi_k^e + \Phi_k^i$ avec Φ_k^e solution de (2.22) et Φ_k^i solution de (2.23).

La fonction d'onde extérieure est calculée avec des conditions aux limites transparentes en résolvant le problème pour $k > 0$:

$$\begin{cases} -h^2 \frac{d^2}{dx^2} \Phi_k^e(x) + (V_{fill}(x) + V_{NL}(x)) \Phi_k^e(x) = E_k \Phi_k^e(x), & x \in (0, L), \\ h(\Phi_k^e)'(0) + ik\Phi_k^e(L) = 0, \\ h(\Phi_k^e)'(L) - i\sqrt{k^2 + B} \Phi_k^e(L) = 0. \end{cases}$$

(et le problème correspondant pour $k < 0$) à l'aide d'une méthode de RK4, comme nous l'avons fait pour déterminer la solution de l'équation de Schrödinger avec la résolution directe.

On cherche la fonction d'onde intérieure sous la forme $\Phi_k^i = \theta_k u$ où u est le mode résonant, correspondant à la résonance de plus petite énergie. Le mode résonant u est solution du problème (1.47), résolu à l'aide de la méthode de Newton que nous avons présenté ci-dessus. Quite à renormaliser u , on peut supposer $\int_0^L |u(x)|^2 dx = 1$. On dispose donc des fonctions Φ_k^e et du mode résonant u , ce qui nous permet d'identifier le coefficient θ_k en injectant la fonction $\theta_k u$ dans l'équation (2.23) où Φ_k^e intervient dans le terme en second membre qui joue le rôle de terme source.

On obtient :

$$\theta_k \left(-h^2 \frac{d^2}{dx^2} u + V u - E_k u \right) = (V_{fill} - V_e) \Phi_k^e,$$

soit en utilisant l'équation vérifiée par u :

$$\theta_k (z - E_k) u = (V_{fill} - V_e) \Phi_k^e.$$

Le mode de résonant étant choisi normalisé, l'équation précédente multipliée par $\bar{u}$ et intégrée sur $[0, L]$ donne la valeur du coefficient :

$$\theta_k = \frac{1}{z - E_k} \int_0^L (V_{fill} - V_e) \Phi_k^e \bar{u} dx. \quad (2.34)$$

L'expression du coefficient est du type formule de Briet-Wigner, similaire à (2.8), ce qui exprime le pic de résonance des coefficients de transmission.

Intégration

Calcul de la densité

L'intérêt de décomposer sur la résonance est de recueillir l'information donnée par celle-ci, sans devoir raffiner le maillage en fréquence, en calculant le mode résonant. Le problème est que si on prend trop peu de points d'intégration, le coefficient θ_k ne peut pas jouer son rôle de pic puisque, dans ce cas, les points d'intégration risquent d'être loin de la fréquence de résonance.

On peut remédier à cela car on dispose de la formule explicite de θ_k et on a le mode résonant. L'idée est de remplacer la formule des trapèzes par une approximation de l'intégrale en utilisant la formule de θ_k qui permet de comptabiliser le poids du pic dans l'intégrale.

On veut calculer la densité :

$$n(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Phi_k(x)|^2 dk \approx \int_{-k_{max}}^{k_{max}} g(k) |\Phi_k(x)|^2 dk = \sum_{p=0}^{P-1} \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) |\Phi_k(x)|^2 dk.$$

Pour la résolution directe nous avons approché le terme $I_p := \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) |\Phi_k(x)|^2 dk$ à l'aide de la formule des trapèzes.

Nous allons chercher une nouvelle approximation qui tienne compte de la forme de θ_k .

On a :

$$\Phi_k(x) = \Phi_k^e(x) + \theta_k u(x),$$

et donc

$$|\Phi_k(x)|^2 = |\Phi_k^e(x)|^2 + |\theta_k|^2 |u(x)|^2 + 2\text{Re}(\Phi_k^e(x) \overline{\theta_k u(x)}).$$

Or la fonction u est négligeable en dehors du puits et la fonctions Φ_k^e est négligeable dans le puits (cf [39]), on a donc $2\text{Re}(\Phi_k^e(x) \overline{\theta_k u(x)})$ est négligeable et on peut faire l'approximation suivante :

$$I_p = \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) (|\Phi_k^e(x)|^2 + |\theta_k|^2 |u(x)|^2) dk = \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) |\Phi_k^e(x)|^2 dk + \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) |\theta_k|^2 dk |u(x)|^2.$$

Cette approximation est bien justifiée comme on peut le voir sur la Figure 2.14.

La fonction $g(k) |\Phi_k^e(x)|^2$ varie lentement en k , on peut donc approcher son intégrale de k_p à k_{p+1} à l'aide de la formule des trapèzes :

$$\int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) |\Phi_k^e(x)|^2 dk \approx (g(k_p) |\Phi_{k_p}^e(x)|^2 + g(k_{p+1}) |\Phi_{k_{p+1}}^e(x)|^2) \Delta k_p / 2.$$

La valeur de $u(x)$ étant connue, il reste à approcher le terme $J_p := \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) |\theta_k|^2 dk$ pour avoir une approximation de I_p .

On obtiendra une bonne approximation permettant de tenir compte du pic de la fonction θ_k en utilisant sa formule explicite (2.34), que l'on peut écrire :

$$\theta_k = \frac{S_k}{E_R - i\frac{\Gamma}{2} - E_k},$$

où on a posé

$$S_k = \int_0^L (V_{fill} - V_e) \Phi_k^e \bar{u} dx. \quad (2.35)$$

On en déduit :

$$\begin{aligned}
 J_p &= \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) \frac{|S_k|^2}{(E_k - E_R)^2 + \Gamma^2/4} dk \\
 &= \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) \frac{|S_k|^2}{(\hbar^2 k^2/2m - (E_R + V_p))^2 + \Gamma^2/4} dk \\
 &= \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) \frac{|S_k|^2}{2k} \frac{1}{(\hbar^2 k^2/2m - (E_R + V_p))^2 + \Gamma^2/4} 2k dk,
 \end{aligned}$$

où $V_p = 0$ pour $0 \leq k_p < k_{p+1}$ et $V_p = B$ pour $k_p < k_{p+1} \leq 0$.

Le terme $g(k) \frac{|S_k|^2}{2k}$ varie lentement en k pour $k > 0$ même si k est proche de la résonance.

En effet, la dépendance en k du terme S_k est donnée par celle des Φ_k^e qui varient doucement avec k . De plus, hors d'un voisinage de 0 suffisamment grand, la fonction $g(k)/2k$ est régulière en k et donc il en est de même pour $g(k) \frac{|S_k|^2}{2k}$ même si k est proche de la résonance. On a également

$$\Phi_k^e = \mathcal{O}(k) \quad (2.36)$$

lorsque $k \rightarrow 0$ où le $\mathcal{O}$ est considéré au sens de la norme $L^\infty(0, L)$. Cela est démontré pour $B \neq 0$ dans l'Appendice 2.C et vérifié numériquement sur la Figure 2.15. On en déduit à partir de la formule (2.35) que $\frac{|S_k|^2}{k} = \mathcal{O}(k)$ en 0. Soit $g(k) \frac{|S_k|^2}{2k}$ est régulière au voisinage de 0, g étant régulière au voisinage de 0.

On en déduit que $g(k)|S_k|^2/2k$ varie peu sur $[k_p, k_{p+1}]$ et on peut l'approcher par $g(k_p)|S_{k_p}|^2/2k_p$ sur cet intervalle.

On obtient alors l'approximation suivante :

$$J_p = g(k_p) \frac{|S_{k_p}|^2}{2k_p} \int_{k_p}^{k_{p+1}} \frac{1}{(\hbar^2 k^2/2m - (E_R + V_p))^2 + \Gamma^2/4} 2k dk.$$

L'avantage d'une telle approximation est qu'elle permet toujours de tenir compte de l'effet de pic à l'aide de l'intégrale que l'on peut expliciter. Si l'on pose $\gamma = 2m/\hbar^2$, $\alpha = \gamma(E_R + V_p)$, $\beta = \gamma \frac{\Gamma}{2}$ et K_p comme étant l'intégrale apparaissant dans la précédente égalité, on a :

$$K_p = \gamma^2 \int_{k_p}^{k_{p+1}} \frac{1}{(k^2 - \alpha)^2 + \beta^2} 2k dk.$$

En réalisant le changement de variable $w = k^2$, on obtient :

$$K_p = \frac{2\gamma}{\Gamma} [\arctan(2(E_{k_{p+1}} - E_R)/\Gamma) - \arctan(2(E_{k_p} - E_R)/\Gamma)].$$

Ce qui donne l'approximation suivante pour la contribution de k_p à k_{p+1} de la densité :

$$\begin{aligned}
 I_p &= (g(k_p)|\Phi_{k_p}^e(x)|^2 + g(k_{p+1})|\Phi_{k_{p+1}}^e(x)|^2) \Delta k_p/2 \\
 &\quad + \frac{g(k_p)|S_{k_p}|^2 \gamma}{k_p \Gamma} [\arctan(2(E_{k_{p+1}} - E_R)/\Gamma) - \arctan(2(E_{k_p} - E_R)/\Gamma)] |u(x)|^2.
 \end{aligned} \quad (2.37)$$

Calcul du courant

On rappelle la formule (2.11) du courant :

$$\mathcal{J}(x) = \frac{q\hbar}{m} \int_{\mathbb{R}} g(k) \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} \right) dk, \quad x \in [0, L].$$

Si on utilise peu de points en fréquence, la formule des trapèzes ne permet pas de bien approcher la valeur de l'intégrale.

Dans le cas de la décomposition sur la résonance, on a

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \left(\Phi'_k(x) \overline{\Phi_k(x)} \right) = & \operatorname{Im} \left((\Phi_k^e)'(x) \overline{\Phi_k^e(x)} \right) + |\theta_k|^2 \operatorname{Im} \left(u'(x) \overline{u(x)} \right) \\ & + \operatorname{Im} \left((\Phi_k^e)'(x) \overline{\theta_k u(x)} + \theta_k u'(x) \overline{\Phi_k^e(x)} \right) \end{aligned}$$

Le terme $\operatorname{Im} \left((\Phi_k^e)'(x) \overline{\Phi_k^e(x)} \right)$ varie lentement en k alors, comme nous l'avons fait pour le calcul de la densité, on peut approcher son intégrale à l'aide de la formule des trapèzes.

Les deux autres termes à intégrer peuvent s'écrire $W_k(x) |\theta_k|^2$ où :

$$W_k(x) = \operatorname{Im}(u'(x) \overline{u(x)}) + \operatorname{Im}((\Phi_k^e)'(x) \overline{\theta_k u(x)} + \theta_k u'(x) \overline{\Phi_k^e(x)}) / |\theta_k|^2.$$

La quantité $W_k(x)$ est non piquée autour de la résonance. On peut donc faire l'approximation suivante :

$$\int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) W_k(x) |\theta_k|^2 dk \approx \frac{g(k_p) |S_{k_p}|^2 W_{k_p}(x)}{2k_p} \int_{k_p}^{k_{p+1}} \frac{1}{(\hbar^2 k^2 / 2m - (E_R + V_p))^2 + \Gamma^2 / 4} 2k dk$$

En utilisant, les calculs fait pour l'intégration de la densité, on obtient l'approximation suivante :

$$\frac{q\hbar}{m} \int_{k_p}^{k_{p+1}} g(k) \operatorname{Im} \left(\frac{d}{dx} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} \right) dk \approx I_p + J_p \quad (2.38)$$

où

$$I_p = \frac{q\hbar}{m} (g(k_p) \operatorname{Im}((\Phi_{k_p}^e)'(x) \overline{\Phi_{k_p}^e(x)}) + g(k_{p+1}) \operatorname{Im}((\Phi_{k_{p+1}}^e)'(x) \overline{\Phi_{k_{p+1}}^e(x)})) \Delta k / 2,$$

et

$$J_p = \frac{2qg(k_p) |S_{k_p}|^2 W_{k_p}(x)}{\hbar k_p \Gamma} [\arctan(2(E_{k_{p+1}} - E_R) / \Gamma) - \arctan(2(E_{k_p} - E_R) / \Gamma)]$$

2.2.2 Résumé : algorithme de résolution

Dans cette section, $\mathcal{P}$ désigne une discrétisation de l'intervalle $[-k_{max}, k_{max}]$.

La résolution du problème de Schrödinger-Poisson non-linéaire en utilisant la décomposition sur la résonance se fait de la même façon que pour la résolution directe avec un calcul de la densité différent. C'est-à-dire que l'on utilise l'Algorithme 2.1.3 où le calcul de la densité n se fait en suivant la méthode présentée ci-dessous.

Algorithme 2.2.4 (Approximation à un mode).

Etape indépendante de k

- Calcul de la résonance : détermination de z et $u \in L^2(\gamma)$ tels que $Hu = zu$ à l'aide de la méthode de Newton présentée ci-dessus. La méthode de Newton est initialisée à (u_0, z_0) état fondamental de H_D , Hamiltonien avec conditions aux limites de type Dirichlet.

Etapes dépendantes de k

Pour $k \in \mathcal{P}$:

- Calcul de Φ_k^e fonction propre généralisée de l'opérateur H_{fill} obtenu en bouchant le puits de potentiel.
- Calcul des Φ_k^i : On calcule θ_k à l'aide de Φ_k^e , z et de la formule (2.34), ce qui donne $\Phi_k^i = \theta_k u$.

Etape finale

- Calcul de la densité en sommant les approximations (2.37) de l'intégrale sur chaque intervalle de fréquence.

Lorsque l'on utilise la méthode de Gummel, pour la première itération, on initialise la méthode de Newton pour le calcul du mode résonant comme cela a été présenté ci-dessus et pour les itérations suivantes, on initialise la méthode de Newton à la résonance et au mode résonant obtenus à l'itération précédente.

2.2.3 Résultats numériques

Les valeurs des paramètres physiques utilisés pour l'ensemble des applications numériques sont les même que celles utilisées dans la section 2.1.9. On les rappelle ci-dessous :

T	n_D^1	n_D^2	m	E_F
$300K$	$1 \times 10^{24} m^{-3}$	$5 \times 10^{21} m^{-3}$	$0,067me$	$6,7097 \times 10^{-21}$

Les tests présentés dans cette section sont réalisés avec deux barrières de taille égale à la taille du puits. Les données concernant le potentiel extérieur sont réunies dans le tableau suivant :

L	a_1	a_2	a_3	b_3	b_2	b_1	v_0
$135nm$	$50nm$	$60nm$	$65nm$	$70nm$	$75nm$	$85nm$	$0.3eV$

a) Choix de la racine complexe

Pour le calcul de la résonance, la racine complexe de l'énergie intervient dans les conditions aux limites ce qui se traduit par une racine dans la matrice du problème. Si la détermination de la racine complexe est mal choisie, la méthode de Newton utilisée pour résoudre le problème ne converge pas. Par exemple, si l'on choisit la racine carrée $\sqrt{z}$ avec coupure sur $\mathbb{R}^+$, la méthode de Newton étant appliquée dans

une zone proche de $\mathbb{R}^+$, les itérées seront instables. En effet, les itérés vont traverser l'axe des abscisses qui est une discontinuité de la racine et, à chaque traversée, la racine change de signe. La racine qu'il faut prendre est la racine carrée $s(z)$ holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus i\mathbb{R}_-$ donnée par (1.46). L'avantage de cette racine est qu'elle est holomorphe sur $\mathbb{R} - \{0\}$ et donc ne risque pas de poser de problèmes à l'algorithme. Avec une telle racine, la méthode de Newton converge en peu d'itérations comme nous le verrons dans la section suivante.

La méthode de Newton converge également avec la racine carrée $z^{1/2}$ qui a sa coupure en $\mathbb{R}^-$. Cela est dû au fait que la partie réelle de la résonance n'est pas dans l'intervalle $[-B, 0)$ où $z^{1/2}$ est discontinue. Cette éventualité aurait pu se produire, c'est la raison pour laquelle on a introduit la racine $s(z)$.

b) Calcul de la résonance

Dans un premier temps, nous n'étudions pas la convergence de l'algorithme complet de résolution du problème de Schrödinger-Poisson, mais nous regardons l'étape du calcul de la résonance pour un potentiel V donné.

Pour un potentiel V_e donné, nous choisisons $V = V_e + V_{NL}$, où V_{NL} est le potentiel solution du problème de Schrödinger/Poisson associé au potentiel V_e obtenu après convergence de la méthode de Gummel pour la résolution directe décrite dans la section 2.1.9.

Nous appliquons ensuite la méthode de Newton pour le calcul de la résonance. Pour cela, on calcule (e_0, E_0) , élément propre de plus basse énergie associé à l'Hamiltonien H_D avec conditions aux limites de type Dirichlet, et on initialise la méthode de Newton en ce point. On considère que la méthode Newton a convergé à l'itéré n lorsque $\|M(z_n)u_n\|_2 < \varepsilon$ où $\|\cdot\|_2$ est la norme 2 dans $\mathbb{R}^J$ et ε est la tolérance que l'on se donne.

Lorsque l'on prend $J = 300$ points de discrétisation en espace, les résultats obtenus pour différentes valeurs du bias B sont résumés dans le tableau ci-dessous :

$B(\text{eV})$	N_{cv}	$E_0(\text{meV})$	$E_R(\text{meV})$	Γ/E_R
0	5	126.56	127.53	2.58×10^{-3}
0.1	5	80.03	81.01	4.39×10^{-3}
0.2	8	39.33	40.29	9.58×10^{-3}

où N_{cv} désigne le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence à la tolérance $\varepsilon = 1 \times 10^{-15}$ près.

Lorsque l'on prend $J = 500$ points de discrétisation en espace, on obtient les résultats suivants :

$B(\text{eV})$	N_{cv}	$E_0(\text{meV})$	$E_R(\text{meV})$	Γ/E_R
0	4	138.04	138.41	2.77×10^{-3}
0.1	4	91.42	91.8	4.43×10^{-3}
0.2	5	51.83	52.21	$1. \times 10^{-2}$

pour la même tolérance $\varepsilon = 1 \times 10^{-15}$.

Bien que le rapport Γ/E_R est quasiment le même pour les deux discrétisations (sauf pour $B = 0.2$), on remarque que la résonance change beaucoup avec le nombre de points de discrétisation en espace (surtout pour $B = 0.1$ et $B = 0.2$). Cela est dû au fait que la méthode présentée ne permet pas de déterminer la résonance avec suffisamment de précision pour un pas de discrétisation trop large. Le problème se pose surtout pour $B = 0.2$ où l'écart entre les énergies obtenues pour les deux discrétisations approche 20%. On verra dans les tests suivants que ce manque de précision se répercute sur le calcul de la densité.

On voit dans ces deux tableaux que la partie imaginaire $\Gamma/2$ de la résonance est petite devant sa partie réelle E_R . C'est une confirmation du résultat de la Proposition 1.5.16.

c) Mode résonant, fonctions d'ondes

Dans le test de la section précédente pour $J = 300$, le mode résonant obtenu pour $B = 0.1$ décroît exponentiellement dans les barrières, comme on peut le voir sur le graphique de la Figure 1.47 où l'on a représenté le module du mode résonant. Localement, ce dernier se comporte comme un mode propre et son support est essentiellement contenu dans le puits.

Pour une fréquence k , la fonction Φ_k^i sera proportionnelle au mode résonant, sa forme est donc donnée par la Figure 2.12. La fonction Φ_k^e est une fonction propre généralisée de l'Hamiltonien H_{fill} donné par le potentiel bouché $V + v_0 \mathbf{1}[a_3, b_3]$ que nous avons représenté sur le graphique de gauche de la Figure 2.13 pour le bias $B = 0.1$. Nous avons représenté, sur le graphique de droite de la Figure 2.13, la fonction Φ_k^e correspondant à ce potentiel pour $k = k_{max}/2$ avec $J = 300$ points de discrétisation en espace.

On remarque que Φ_k^e s'éteint exponentiellement dans la barrière, le support de Φ_k^e est essentiellement contenu en dehors de la barrière.

On retrouve bien le fait, utilisé dans la section 2.2.1, que la quantité $\Phi_k^e(x) \overline{\theta_k u(x)}$ est négligeable, étant le produit de deux fonctions n'ayant pas de support en commun. Sur le graphique de la Figure 2.14, nous avons représenté les contributions $\frac{n_1 100}{n}$, $\frac{n_2 100}{n}$ et $\frac{n_3 100}{n}$, en pourcent, à la densité n des fonctions $n_1(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\Phi_k^e(x)|^2 dk$, $n_2(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) |\theta_k|^2 dk |u(x)|^2$ et $n_3(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) 2 \operatorname{Re}(\Phi_k^e(x) \overline{\theta_k u(x)}) dk$ pour $B = 0.1$ et $J = 300$, où les Φ_k^e , θ_k , et u sont calculés avec le potentiel V_{NL} obtenu après convergence de la méthode de Gummel et l'intégrale sur les fréquences réalisée avec une méthode des trapèzes à pas constant petit $\Delta k = \frac{2k_{max}}{300}$.

On voit que n_3 est négligeable et donc contribue peu à la densité n , ce qui justifie l'approximation $n = n_1 + n_2$ de la section 2.2.1.

Pour illustrer l'équation $\Phi_k^e = \mathcal{O}(k)$ lorsque $k \rightarrow 0$, donnée dans la section 2.2.1, nous avons représenté $\frac{1}{L} \frac{\|\Phi_k^e\|_{L^\infty(0,L)}}{k}$ en fonction de k sur $[0, \frac{k_{max}}{2}]$, pour une discrétisation uniforme de 375 points, avec $B = 0.1$ eV et $J = 300$.

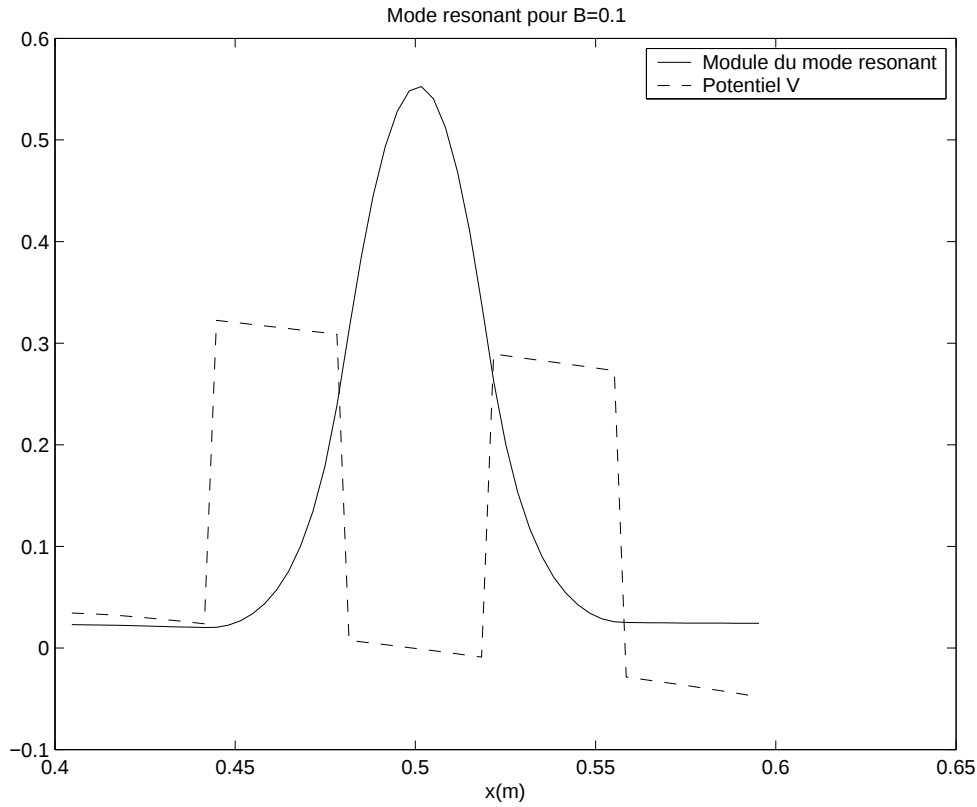


FIG. 2.12 – Représentation du module du mode résonant entre les deux barrières pour $B = 0.1$ eV et $J = 300$.

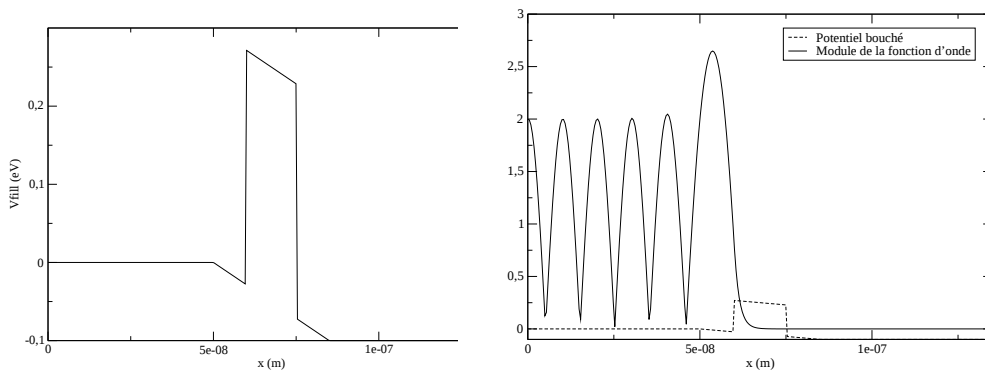
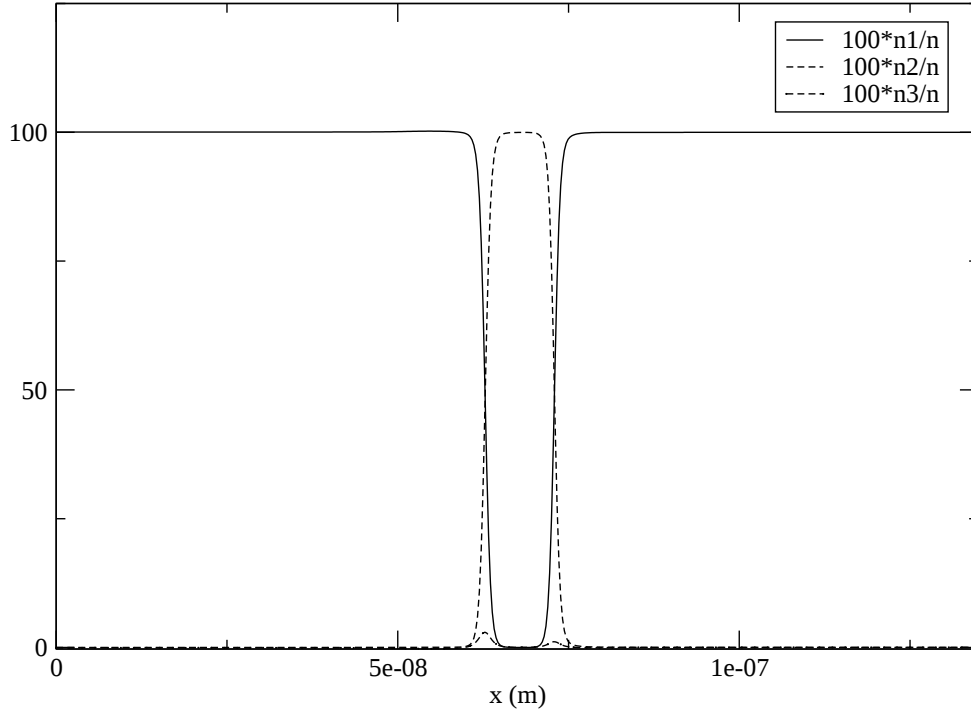


FIG. 2.13 – Potentiel bouché pour $B = 0.1$ eV et fonction propre généralisée correspondant pour $k = k_{max}/2$ et $J = 300$.



$k\mathcal{U}$

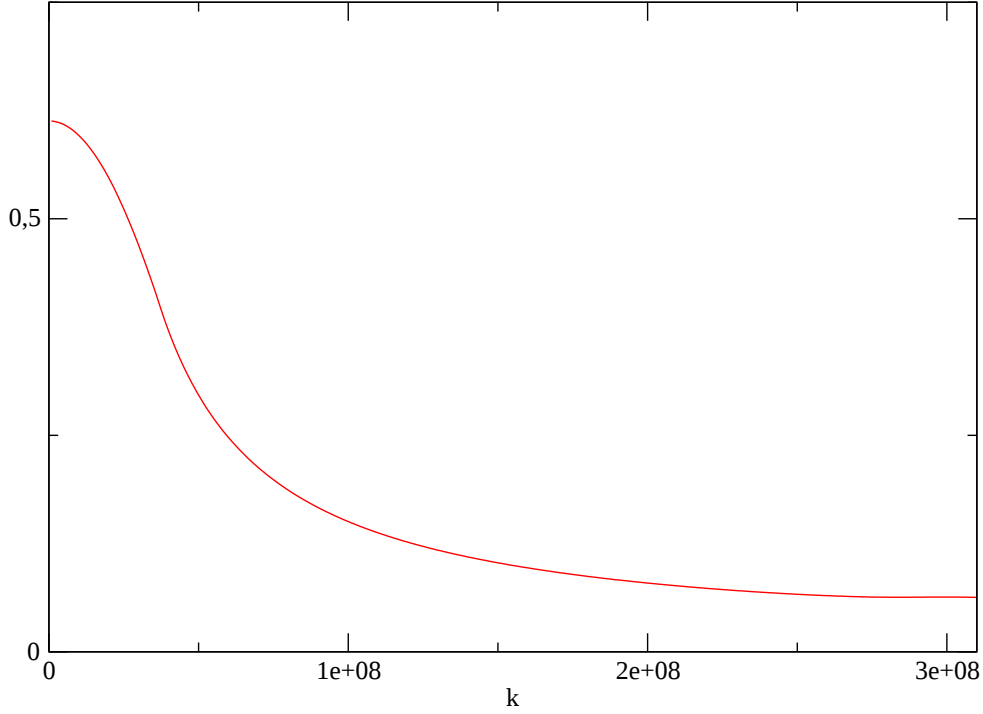


FIG. 2.15 – Représentation de $\frac{1}{L} \frac{\|\Phi_k^\varepsilon\|_{L^\infty(0,L)}}{k}$ en fonction de k pour $B = 0.1$ eV et $J = 300$.

d) Convergence du Gummel pour la décomposition sur la résonance

Si l'on réalise le calcul de la densité à l'aide de la méthode des trapèzes en calculant les fonctions propres généralisées avec décomposition sur la résonance, l'étape du calcul de la densité semble bien approcher le calcul direct, le couplage ne converge pas à moins de prendre beaucoup de points en fréquence. Cela est à notre avis du au fait que la forme piquée du coefficient θ_k n'est pas prise en compte avec la méthode des trapèzes si l'on réalise un maillage trop large en fréquence.

Or prendre beaucoup de points en fréquence n'est pas intéressant puisque le coût de calcul du mode résonant est élevé et donc celui de la densité avec décomposition sur la résonance est plus coûteux que le calcul de la densité résolution directe à nombre de points en fréquence égal.

L'idée est donc d'utiliser, pour la décomposition sur la résonance, la méthode d'intégration (2.37) pour bien calculer la valeur de l'intégrale sans avoir à prendre beaucoup de points d'intégration.

Afin d'illustrer ce qui a été dit ci-dessus, nous avons comparé la convergence de la méthode Gummel pour les trois calculs suivants de la densité :

- (i) Calcul direct (section 2.1.3),
- (ii) Décomposition sur la résonance + méthode des trapèzes,
- (iii) Décomposition sur la résonance + formule intégrée de θ_k .

Pour cela, nous avons représenté sur la Figure 2.16 le logarithme de l'erreur relative $\frac{\|V_{NL}^n - V_{NL}^{n-1}\|_2}{\|V_{NL}^{n-1}\|_2}$ en fonction du nombre d'itérations n pour chacune des méthodes avec $J = 300$ et $B = 0.1$ eV. A chaque itération de Gummel, le calcul de la densité nécessite environ 800 points de fréquence pour la méthode (i) et on prend 800 points pour la méthode (ii) et 50 pour la méthode (iii). On voit que pour la décomposition sur la résonance avec formule intégrée de θ , la méthode de Gummel atteint une précision de 10^{-10} en 24 itérations et converge aussi bien que la résolution directe.

Plus précisément, on doit faire les deux modifications suivantes pour que le Gummel marche :

- Utiliser la résonance de l'itération de Gummel précédente pour initialiser le calcul de la résonance de l'itération de Gummel courante (comme nous le ferons pour le régime instationnaire). Cela donne plus de "liberté" que de l'initialiser à l'état fondamental du Laplacien avec conditions aux limites de type Dirichlet. Et cela permet de gagner du temps de calcul.
- Adapter l'intégration en fréquence comme nous venons de l'expliquer.

e) Efficacité de la méthode : coût de calcul, comparaison avec la résolution directe

Pour illustrer l'efficacité de cette méthode et la comparer avec la résolution directe, nous avons réalisé différents tests résumés dans le tableau de la Figure 2.17. Dans ce tableau, J désigne le nombre de points de discrétisation en espace et B la différence de potentiel. Les méthodes sont notées dans le tableau comme suit : "Directe" correspond à la résolution directe du problème de Schrödinger-Poisson

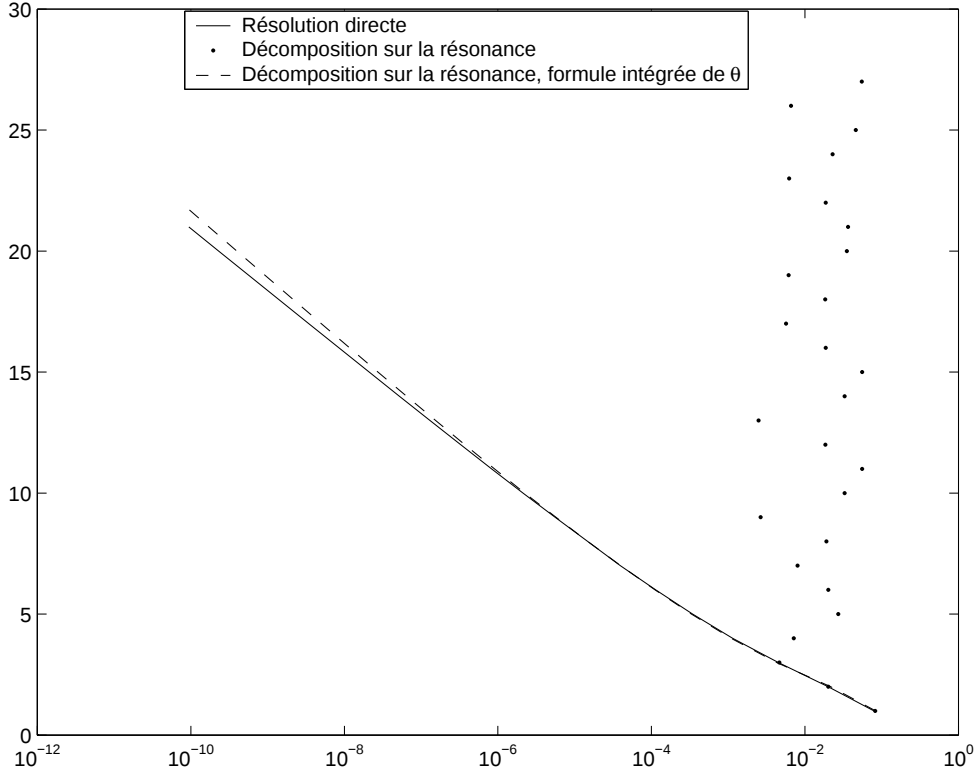


FIG. 2.16 – Représentation de l'erreur relative en fonction de nombre d'itérations

donnée par l'Algorithme 2.1.3, “Dec. résonance” désigne l'Algorithme 2.2.4 utilisant la décomposition sur la résonance et “Elément finis” utilise le même algorithme que “Directe” avec la seule différence que les fonctions propres généralisées sont calculées à l'aide des matrices éléments finis (2.28), (2.29) au lieu de la méthode de Runge-Kutta. Ensuite, N_{cv} est le nombre d'itérations de Gummel nécessaires pour arriver à la convergence, P est le nombre de points de la discrétisation en fréquence, CPU est le temps, en secondes, que le processeur a passé sur le calcul. La dernière colonne Erreur L_2 correspond à l'erreur relative pour la densité dans le puits avec la résolution directe, elle est donnée par la formule : $100 \frac{\|n - n_{ref}\|_{L^2(a_3, b_3)}}{\|n_{ref} - n_D\|_{L^2(a_3, b_3)}}$, où n_{ref} est la densité obtenue avec la résolution directe. Dans cette formule, on considère la norme dans le puits et on soustrait le dopage car sinon la valeur élevée de la densité à l'extérieur écrase tout et on perd l'information sur la pertinence de la méthode. Pour les méthodes “Directe” et “Elements finis”, le nombre de points en fréquences varie d'une itération de Gummel à l'autre, on a donc noté une valeur proche de la moyenne de ce nombre sur l'ensemble des itérations de Gummel que l'on a accompagné du symbole $\approx$. Dans chaque cas, on considère que la méthode a convergé pour $\frac{\|V_{NL}^n - V_{NL}^{n-1}\|_2}{\|V_{NL}^{n-1}\|_2} < 10^{-10}$. En ce qui concerne la méthode “Eléments finis”, elle n'est pas efficace du point de vue de la convergence : cette méthode met beaucoup plus de temps que les deux autres (les cases barrées correspondent à des cas où la convergence n'a pas eu lieu après un nombre d'itérations important) ; cependant, elle est

			N_{cv}	P	CPU(s)	Erreur L_2 (%)
$J = 300$	$B = 0$ eV	Directe	25	≈ 1000	4.59	
		Dec. résonance	26	50	3.76	2.57
		Eléments finis	/	≈ 1000	/	1.7
	$B = 0.1$ eV	Directe	21	≈ 1080	4.46	
		Dec. résonance	22	50	2.46	3.07
		Eléments finis	/	≈ 1080	/	2.19
	$B = 0.2$ eV	Directe	28	≈ 1020	5.67	
		Dec. résonance	22	50	3.45	17.58
		Eléments finis	33	≈ 1000	162.76	13.99
$J = 500$	$B = 0$ eV	Directe	26	≈ 820	8.15	
		Dec. résonance	26	50	19.63	0.28
		Eléments finis	25	≈ 820	307.11	0.97
	$B = 0.1$ eV	Directe	21	≈ 1060	7.66	
		Dec. résonance	22	50	11.31	0.44
		Eléments finis	21	≈ 1060	299.91	1.36
	$B = 0.2$ eV	Directe	22	≈ 1020	7.67	
		Dec. résonance	22	50	12.51	1.89
		Eléments finis	22	≈ 1020	299.33	1.14

FIG. 2.17 – Comparaison des différentes méthodes de résolution du problème de Schrödinger-Poisson en régime stationnaire

suffisamment proche de la solution de référence : elle est très proche pour $J = 500$ et elle est proche pour $J = 300$ sauf pour $B = 0.2$ eV.

La méthode “Déc. résonance” converge rapidement en général et a l’avantage de demander moins de points de discrétisation en fréquence que les autres méthodes. On observe deux comportements différents selon la valeur de J . Pour $J = 300$, la méthode est plus rapide que la résolution directe, la solution est bonne par rapport à la référence sauf pour $B = 0.2$: dans ce cas le gain en rapidité se fait au détriment de la précision. Pour $J = 500$, la solution est proche de la référence pour toutes les valeurs de B . Le temps de calcul est bon mais moins bon que la résolution directe. Le problème en $B = 0.2$ eV s’explique par le fait que, pour une telle valeur de la différence de potentiel, la résonance demande beaucoup de points en espace pour être calculée de façon précise, comme nous l’avions remarqué dans la partie **b)** de cette section. Le fait que l’on gagne peu ou pas en temps de calcul (par rapport à la résolution directe), malgré le petit nombre de points en fréquence demandé par la méthode, s’explique par le coût important demandé par le calcul de la résonance. La décomposition sur la résonance serait beaucoup plus intéressante si une résolution de l’équation de Schrödinger demandait un coût comparable à celui du calcul la résonance. C’est le cas par exemple en deux dimensions ou en régime transitoire où l’équation de Schrödinger ne peut être résolue avec une méthode de Runge-Kutta (qui a l’avantage de ne pas demander d’inversion de matrice) comme on le fait en dimension 1 stationnaire.

D’autre part, en régime transitoire, le maillage adaptatif n’est pas utilisable ce qui

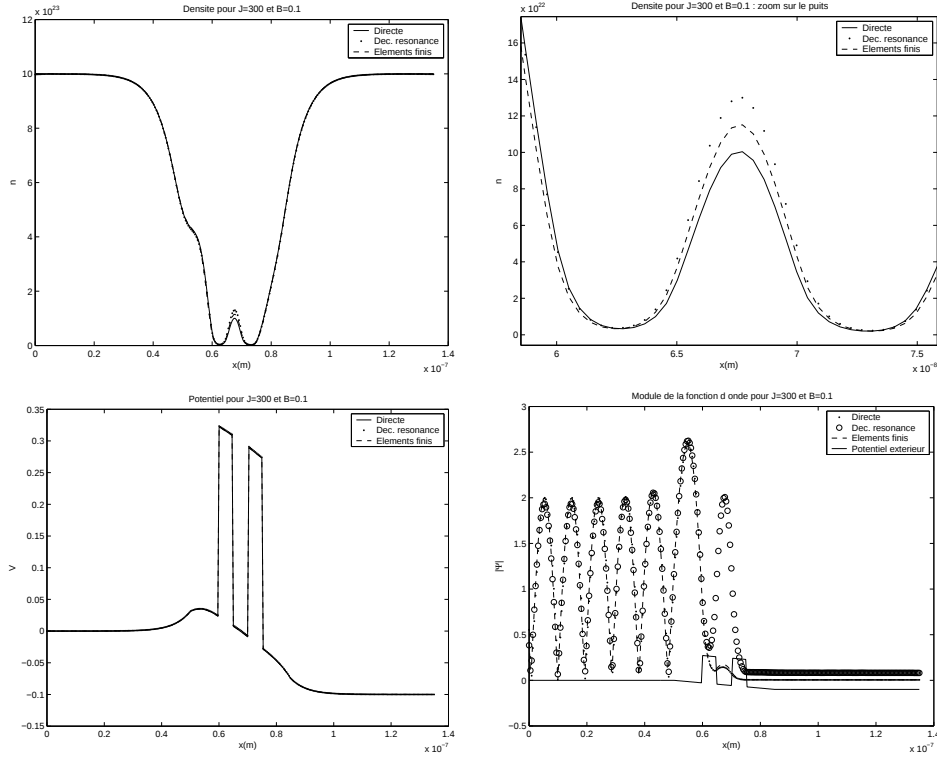


FIG. 2.18 – Pour $J = 300$ et pour $B = 0.1$ eV : densité, potentiel et fonction propre généralisée $k \approx k_R$.

rend le coût de calcul plus important pour la résolution directe.

Il paraît donc intéressant de chercher à adapter au régime instationnaire la méthode utilisant la décomposition sur le mode résonant.

f) Graphiques après convergence

Sur les Figure 2.18, nous avons représenté les résultats correspondant à la partie $J = 300$ et $B = 0.1$ eV du tableau de la Figure 2.17 pour les trois méthodes “Directe”, “Dec. résonance” et “Eléments finis” évoquées dans la section précédente. Comme nous l’avons observé dans la section précédente, les trois méthodes donnent des résultats très proches pour $J = 300$ et $B = 0.1$ eV. En regardant de plus près la densité (deuxième graphique de la Figure 2.18), on remarque que la densité au fond du puits a une valeur plus élevée, donc meilleure, pour les méthodes “Dec. résonance” et “Eléments finis”. La meilleure valeur au fond du puits est donnée par la méthode “Dec. résonance”, cela est dû au fait que la décomposition sur la résonance donne une valeur élevée de la fonction d’onde au niveau du puits, voir le dernier graphique de la Figure 2.18.

Bien que la méthode “Eléments finis” ne converge pas (voir la section précédente), elle donne une valeur intéressante au fond du puits. Nous pensons que cela est dû au fait que les fréquences proches de la résonance sont proches d’être des singularités pour la matrice éléments finis. Alors, pour ces fréquences, la fonction d’onde a une

valeur élevée au niveau du puits et cela contribue à augmenter la valeur de la densité dans cette zone.

2.3 Le cas instationnaire

Dans cette section, nous cherchons à résoudre le problème (1.22). La majeure partie du travail se concentre sur le calcul des $\Psi_k(x, t)$ apparaissant dans ce problème. Ce sont des solutions de l'équation de Schrödinger instationnaire :

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi_k(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi_k(x, t) + V(x, t)\Psi_k(x, t), & t > 0, x \in \mathbb{R}, \\ \Psi_k(x, 0) = \Phi_k(x), \end{cases} \quad (2.39)$$

où les Φ_k sont les fonctions propres généralisées, relatives au potentiel initial, solutions de :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi_k(x) + V(x, 0)\Phi_k(x) = E_k^-\Phi_k(x), \quad x \in \mathbb{R}$$

avec les conditions (1.18)-(1.20).

On introduit la même discrétisation spatiale $x_j, j = 0, \dots, J$ de $[0, L]$ que celle introduite en régime stationnaire et une discrétisation $t_n = n\Delta t, n = 0, \dots, N$ de l'intervalle $[0, T]$ de résolution en temps où $\Delta t = \frac{T}{N+1}$. On notera Ψ_j^n les approximations de la solution $\Psi(x_j, t^n)$ aux différents points de discrétisation.

On résout le problème (2.39) à l'aide du schéma de Crank-Nicolson :

$$\begin{aligned} -iR(\Psi_j^{n+1} - \Psi_j^n) &= \Delta_{xx}\Psi_j^{n+1} + \Delta_{xx}\Psi_j^n + wV_j^{n+1/2}(\Psi_j^{n+1} + \Psi_j^n), \\ j &= 1, \dots, J-1, \quad n \geq 0, \end{aligned} \quad (2.40)$$

où $\Delta_{xx}\Psi_j = \Psi_{j+1} - 2\Psi_j + \Psi_{j-1}$, $R = \frac{4m\Delta x^2}{\hbar\Delta t}$ et $w = -\frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2}$.

Toutefois, on ne peut utiliser ce schéma pour résoudre l'équation (2.39) sur $\mathbb{R}$ tout entier.

On a besoin de conditions aux limites transparentes pour réduire le domaine de résolution à un intervalle borné.

2.3.1 Conditions aux limites transparentes dépendant du temps

Dans les sections suivantes, le cas homogène est le cas où la condition initiale est à support contenu strictement dans le domaine de résolution. La conséquence est qu'elle s'annule au niveau des conditions aux limites.

Le cas homogène : conditions aux limites analytiques

On cherche des conditions aux limites transparentes pour le problème :

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi + V\Psi, & t > 0, x \in \mathbb{R}, \\ \Psi(x, 0) = \Phi(x), & x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2.41)$$

Pour cela, on pose les hypothèses suivantes :

H1. La condition initiale Φ est supportée dans $0 < x < L$.

H2. Le potentiel est constant en temps et en espace en dehors de $0 < x < L$, soit $V(x, t) = 0$, $x \leq 0$ et $V(x, t) = V_L$, $x \geq L$.

On considère la solution de l'équation (2.39) sur un des domaines $x < 0$ et $x > L$. Sous les hypothèses *H1* et *H2*, on peut prendre la transformée de Laplace de l'équation (2.39) sur le domaine considéré et résoudre explicitement l'équation obtenue. En demandant le raccord C^1 en $x = 0$ et $x = L$ et en prenant la transformée de Laplace inverse, on obtient les conditions aux limites transparentes analytiques, à gauche ($x = 0$) :

$$\partial_x \Psi(0, t) = \sqrt{\frac{2}{\hbar\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\Psi(0, s)}{\sqrt{t-s}} ds, \quad (2.42)$$

et à droite ($x = L$) :

$$\partial_x \Psi(L, t) = -\sqrt{\frac{2}{\hbar\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-i\frac{V_L}{\hbar}t} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\Psi(L, s) e^{i\frac{V_L}{\hbar}s}}{\sqrt{t-s}} ds, \quad (2.43)$$

Le cas homogène : conditions aux limites discrètes

Nous présentons ici les conditions aux limites transparentes proposées par [4].

On cherche des conditions aux limites transparentes discrètes pour le problème (2.41), sous les hypothèses *H1* et *H2*.

Des conditions aux limites discrètes peuvent être déduites en discrétisant les conditions aux limites analytiques (2.42), (2.43), cependant, les conditions aux limites obtenues sont conditionnellement stables (voir [31]).

Le procédé utilisé dans [4] est de déduire les conditions aux limites discrètes à partir de l'équation (2.40) vérifiée par la solution discrète sur toute la droite.

Sous les hypothèses *H1* et *H2*, on peut transformer en z , en dehors de $0 < x < L$, le schéma de Crank-Nicolson utilisé pour discrétiser l'équation (2.39) et résoudre explicitement l'équation obtenue.

En prenant la transformée en z inverse, on obtient les conditions aux limites vérifiées par la solution du problème discret sur toute la droite. On en déduit les conditions aux limites transparentes ci-dessous :

$$\Psi_1^n - s_0^0 \Psi_0^n = \sum_{k=1}^{n-1} s_0^{n-k} \Psi_0^k - \Psi_1^{n-1}, \quad n \geq 1, \quad (2.44)$$

$$\Psi_{J-1}^n - s_J^0 \Psi_J^n = \sum_{k=1}^{n-1} s_J^{n-k} \Psi_J^k - \Psi_{J-1}^{n-1}, \quad n \geq 1, \quad (2.45)$$

avec

$$s_j^n = \left[1 - i\frac{R}{2} + \frac{\sigma_j}{2} \right] \delta_0^n + \left[1 + i\frac{R}{2} + \frac{\sigma_j}{2} \right] \delta_n^1 + \alpha_j \exp \left(-in\varphi_j \frac{P_n(\mu_j) - P_{n-2}(\mu_j)}{2n-1} \right), \quad (2.46)$$

$$\varphi_j = \arctan \frac{2R(\sigma_j + 2)}{R^2 - 4\sigma_j - \sigma_j^2}, \quad \mu_j = \frac{R^2 + 4\sigma_j + \sigma_j^2}{\sqrt{(R^2 + \sigma_j^2)[R^2 + (\sigma_j + 4)^2]}}$$

$$\sigma_j = \frac{2\Delta x^2}{\hbar^2} V_j, \quad \alpha_j = \frac{i}{2} ((R^2 + \sigma_j^2)[R^2 + (\sigma_j + 4)^2])^{1/4} \exp\left(i\frac{\varphi_j}{2}\right),$$

et $j = 0, J$.

Les P_n sont les polynômes de Legendre pour lesquels on prend par convention $P_{-1} = P_{-2} = 0$ et δ_j^n est le symbole de Kronecker relatif aux indices j et n .

Les conditions aux limites transparentes obtenues ont de bonnes propriétés et sont telles que la résolution de (2.40) sur $0 < x < L$ avec les conditions aux limites transparentes (2.44), (2.45) est inconditionnellement stable.

Le potentiel V_j , $j = 0, J$ est le potentiel en dehors de $[0, L]$ donné par $V_0 = 0$ et $V_J = V_L$.

On remarque sur la Figure 2.19 qu'elles sont bien transparentes puisqu'elles laissent sortir du domaine considéré un paquet d'ondes se propageant librement sans réflexion numérique.

Pour réaliser ce test, on a initialisé la fonction d'onde au paquet d'ondes $\Phi(x) = \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2} + ik(x-x_0)\right)$ d'énergie k , centré au point x_0 , et on l'a propagé avec l'équation de Schrödinger instationnaire avec potentiel nul à l'aide du schéma de Crank-Nicolson (2.40) avec conditions aux limites transparentes homogènes (2.44), (2.45). La masse de l'électron m et la longueur du domaine de calcul L ont les valeurs données dans la section (2.1.9). Le nombre de points de discrétisation en espace est $J = 300$, le pas de temps est $\Delta t = 0.5$ femto secondes. Les paramètres déterminant le paquet d'ondes sont $\sigma = 0.15L$, $k = \frac{2\pi}{0.05L}$ et $x_0 = \frac{L}{2}$.

Le cas non homogène

Nous nous plaçons ici dans le cas non homogène, c'est-à-dire que l'hypothèse $H1$ n'est plus valide. Nous déduisons, pour des conditions initiales particulières, des conditions aux limites transparentes à partir de celles présentées dans la section précédente.

Soit V^- un potentiel vérifiant $V^-(x) = 0$, $x \leq 0$ et $V^-(x) = V_L^-$, $x \geq L$. Etant donné un potentiel $V(x, t)$, vérifiant l'hypothèse $H2$, tel que $V(x, 0) = V^-(x)$, on cherche des conditions aux limites transparentes pour le problème :

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi + V\Psi, & t > 0, x \in \mathbb{R}, \\ \Psi(x, 0) = \Phi(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (2.47)$$

où Φ est solution du problème stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi + V^-\Phi = E^-\Phi, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.48)$$

pour une énergie E^- donnée.

Un tel Φ n'est pas supporté dans $0 < x < L$, donc l'hypothèse $H1$ n'est pas vérifiée

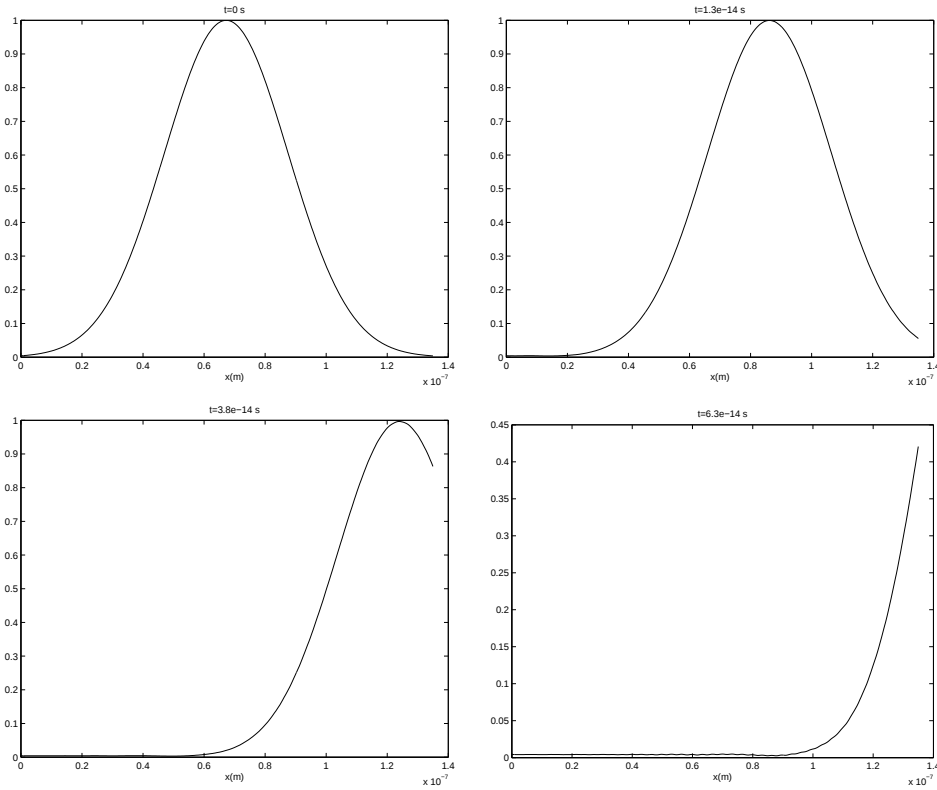


FIG. 2.19 – Evolution d'un paquet d'ondes, soumis à un potentiel nul calculée avec le schéma de Crank-Nicolson, avec conditions aux limites transparentes, pour $J = 300$ et $\Delta t = 0.5$ femto secondes.

et on ne peut pas utiliser les conditions aux limites (2.44), (2.45).

Cherchons une condition aux limites transparente en $x = L$. Pour cela, on considère le domaine $x \geq L$.

On se ramène à une fonction vérifiant l'hypothèse $H1$ en posant :

$$v = \Psi - \Phi e^{-i\frac{E_L}{\hbar}t}, \quad x \geq L,$$

où E_L est choisi de sorte que :

$$i\hbar\partial_t v = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 v + Vv, \quad x \geq L. \quad (2.49)$$

En utilisant le fait que Ψ est solution de (2.47) et le fait que Φ est solution de (2.48), un calcul simple montre que :

$$i\hbar\partial_t v = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V\right)v - (E_L - E^- - (V_L - V_L^-))\Phi e^{-iE_L t}, \quad x \geq L.$$

Donc pour que v soit solution de (2.49), il suffit de choisir :

$$E_L = E^- + (V_L - V_L^-).$$

Alors v vérifie $v(0) = \Psi(0) - \Phi = 0$, et donc l'hypothèse $H1$ et, dans le domaine $x \geq L$, il est solution de l'équation de Schrödinger instationnaire avec le potentiel constant $V = V_L$ (propriété du même type que celle de l'hypothèse $H2$).

Cependant, on ne peut pas déduire directement que v vérifie des conditions aux limites discrètes puisque, à priori, v n'est pas solution d'une équation de Schrödinger sur tout $\mathbb{R}$.

On pourra tout de même réaliser les calculs présentés dans [4] (dont nous avons parlé rapidement dans la section précédente) grâce à l'hypothèse $H1$ vérifiée par v et à l'équation (2.49). Pour que le lecteur en soit convaincu, nous allons donner plus en détail les étapes de ces calculs.

Soit J tel que $x_J = L$, alors l'équation discrète associée à (2.49), obtenue à l'aide du schéma de Crank-Nicolson, s'écrit : $\forall j \geq J$,

$$-iR(v_j^{n+1} - v_j^n) = \Delta_{xx}v_j^{n+1} + \Delta_{xx}v_j^n + wV_L(v_j^{n+1} + v_j^n), \quad n \geq 0.$$

Le fait que $V_j = V_L$ est constant $\forall j \geq J$ permet de transformer en z , sans complication, l'équation précédente. Si V_j n'était pas constant, on aurait une convolution due au produit vV . On obtient, en utilisant le fait que $v_j^0 = 0$ pour $j \geq J$, l'équation sur $\hat{v}_j = TZ((v_j^n)_{n \in \mathbb{N}})$ ci-dessous :

$$\hat{v}_{j+1} - 2\left(1 - \frac{iR}{2}\left(\frac{z-1}{z+1} + i\kappa\right)\right)\hat{v}_j + \hat{v}_{j-1} = 0. \quad (2.50)$$

Le polynôme caractéristique associé à cette équation de récurrence admet deux racines, une de module plus grand que 1 notée ν_1 , et l'autre de module plus petit que 1 notée ν_2 . La résolution de (2.50) sous la condition " $\hat{v}_j$ est borné" implique que $\hat{v}$ vérifie :

$$\hat{v}_{J-1} = \nu_2(z)\hat{v}_J.$$

En prenant la transformée en z inverse de la relation précédente, on obtient que v vérifie la condition aux limites transparente (2.45), c'est-à-dire :

$$v_{J-1}^n - s_J^0 v_J^n = \sum_{k=1}^{n-1} s_J^{n-k} v_J^k - v_{J-1}^{n-1}, \quad n \geq 1,$$

où les s_J^n , $n \geq 0$ sont donnés par (2.46).

En utilisant la discrétisation $v_j^n = \Psi_j^n - \Phi_j e^{-i\frac{E_L}{\hbar} t_n}$ de v dans la condition aux limites pour v ci-dessus, on obtient la condition aux limites transparente non homogène discrète en $x = L$ pour Ψ :

$$\begin{aligned} \Psi_{J-1}^n - s_J^0 \Psi_J^n &= \sum_{k=1}^{n-1} s_J^{n-k} \Psi_J^k - \Psi_{J-1}^{n-1} - \Phi_J \sum_{k=1}^n s_J^{n-k} e^{-i\frac{E_L}{\hbar} k \Delta t} \\ &\quad + \Phi_{J-1} e^{-i\frac{E_L}{\hbar} (n-1) \Delta t} (1 + e^{-i\frac{E_L}{\hbar} \Delta t}), \quad n \geq 1 \end{aligned} \quad (2.51)$$

On procède de la même manière pour obtenir la condition aux limites transparentes non homogène en $x = 0$, on pose :

$$v = \Psi - \Phi e^{-i\frac{E_0}{\hbar} t}, \quad x \leq 0,$$

et un calcul simple montre que :

$$i\hbar \partial_t v = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V\right) v - (E_0 - E^-) \Phi e^{-i\frac{E_0}{\hbar} t}, \quad x \leq 0.$$

Alors, on choisit :

$$E_0 = E^-,$$

et ainsi v vérifie la condition aux limites transparente (2.44). Soit

$$v_1^n - s_0^0 v_0^n = \sum_{k=1}^{n-1} s_0^{n-k} v_0^k - v_1^{n-1}, \quad n \geq 1,$$

où les s_0^n , $n \geq 0$, sont donnés par (2.46).

En utilisant la discrétisation $v_j^n = \Psi_j^n - \Phi_j e^{-i\frac{E_0}{\hbar} t_n}$ de v dans la condition aux limites pour v ci-dessus, on obtient la condition aux limites transparente non homogène discrète en $x = 0$:

$$\begin{aligned} \Psi_1^n - s_0^0 \Psi_0^n &= \sum_{k=1}^{n-1} s_0^{n-k} \Psi_0^k - \Psi_1^{n-1} - \Phi_0 \sum_{k=1}^n s_0^{n-k} e^{-i\frac{E_0}{\hbar} k \Delta t} \\ &\quad + \Phi_1 e^{-i\frac{E_0}{\hbar} (n-1) \Delta t} (1 + e^{-i\frac{E_0}{\hbar} \Delta t}), \quad n \geq 1 \end{aligned} \quad (2.52)$$

Remarque 2.3.1. On peut montrer que v vérifie les conditions aux limites transparentes analytiques (2.42), (2.43) (voir [8]) ce qui nous permet d'obtenir des conditions aux limites transparentes analytiques non homogènes pour Ψ .

Le cas non homogène avec un potentiel dépendant du temps pour $x \geq L$

Dans le cas non homogène avec un potentiel dépendant du temps pour $x \geq L$, les hypothèses $H1$ et $H2$ ne sont plus valides.

Soit V^- un potentiel vérifiant $V^-(x) = 0$, $x \leq 0$ et $V^-(x) = V_L^-$, $x \geq L$. Etant donné un potentiel $V(x, t)$ tel que $V(x, 0) = V^-(x)$, et $V(x, t) = 0$, $x \leq 0$, $V(x, t) = V_L(t)$, $x \geq L$, pour tout $t > 0$ (V ne vérifie pas l'hypothèse $H2$), on cherche des conditions aux limites transparentes pour le problème :

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi + V\Psi, & t > 0, x \in \mathbb{R}, \\ \Psi(x, 0) = \Phi(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

où Φ est solution du problème stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi + V^-\Phi = E^-\Phi, \quad x \in \mathbb{R},$$

pour une énergie E^- donnée.

Un tel Φ n'est pas supporté dans $0 < x < L$, donc l'hypothèse $H1$ n'est pas vérifiée. On cherche une condition aux limites transparentes en $x = 0$ et en $x = L$. Le cas $x = 0$ se traite de la même façon que dans la section précédente puisque le potentiel à gauche ne dépend pas du temps. La condition aux limites (2.52) est donc valable pour Ψ .

Pour traiter le cas $x = L$, on se place dans le domaine $x \geq L$.

On cherche à se ramener à un potentiel constant à droite. Pour cela, on construit la fonction :

$$w = u - \Phi e^{-i\frac{E_L}{\hbar}t}, \quad x \geq L,$$

où $u = \Psi e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_L(s)ds}$ et E_L une constante que l'on choisi arbitrairement dont la valeur sera précisée plus tard.

Une telle fonction w vérifie $w(0) = \Psi(0) - \Phi = 0$, et donc l'hypothèse $H1$. Il reste à s'assurer que w est solution d'une équation de Schrödinger instationnaire pour $x \geq L$, où une hypothèse du type $H2$ est valide, pour que la condition aux limites (2.45) soit applicable à w .

Pour $x \geq L$, on calcule :

$$i\hbar\partial_t u = i\hbar(\partial_t\Psi + \frac{i}{\hbar}V_L(t)\Psi)e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_L(s)ds},$$

ce qui donne, en utilisant le fait que Ψ est solution de (2.47), l'équation :

$$i\hbar\partial_t u = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 u, \quad x \geq L. \quad (2.53)$$

Or, pour $x \geq L$, on a :

$$i\hbar\partial_t w = i\hbar\partial_t u - E_L\Phi e^{-i\frac{E_L}{\hbar}t},$$

et en utilisant le fait que Φ est solution de (2.48)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 w = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 u - (E^- - V_L^-)\Phi e^{-i\frac{E_L}{\hbar}t}.$$

Ce qui combiné avec l'équation (2.53) donne :

$$i\hbar\partial_t w = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 w - (E_L - E^- + V_L^-)\Phi e^{-i\frac{E_L}{\hbar}t}, \quad x \geq L.$$

Donc pour que w soit solution d'une équation de Schrödinger instationnaire pour $x \geq L$ avec un potentiel vérifiant une hypothèse du type $H2$, il suffit de choisir :

$$E_L = E^- - V_L^-.$$

Alors w vérifie l'équation :

$$i\hbar\partial_t w = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 w,$$

et donc une hypothèse de type $H2$ est vérifiée avec un potentiel nul donc constant pour $x \geq L$.

Montrons à présent en discrétisé que l'on a bien une condition aux limites transparente pour w .

Soit J tel que $x_J = L$, alors $\forall j \geq J$, on a

$$-iR(w_j^{n+1} - w_j^n) = \Delta_{xx}w_j^{n+1} + \Delta_{xx}w_j^n, \quad n \geq 0.$$

Les hypothèses $H1$ et du type $H2$ sont vérifiées, on peut appliquer à w le procédé qui a permis de déduire la condition aux limites transparente (2.45) en remplaçant V_L par 0. De ce fait, contrairement au cas non homogène avec potentiel constant, les conditions aux limites n'utiliseront pas les mêmes coefficients que dans le cas homogène.

Plus précisément, on a

$$w_{J-1}^n - \tilde{s}_J^0 w_J^n = \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{s}_J^{n-k} w_J^k - w_{J-1}^{n-1}, \quad n \geq 1,$$

où $\tilde{s}_J^n$, $n \geq 0$ est calculé à l'aide de (2.46) en remplaçant σ_J par 0.

On pose $E^n = e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_n} V_L(s) ds}$, alors $w_J^n = \Psi_J^n E^n - \Phi_J e^{-i\frac{E_L}{\hbar}t_n}$, ce qui donne, en remplaçant dans l'équation ci-dessus, les conditions aux limites transparentes, $\forall n \geq 1$:

$$\begin{aligned} E^n \Psi_{J-1}^n - \tilde{s}_J^0 E^n \Psi_J^n &= \sum_{k=1}^{n-1} \tilde{s}_J^{n-k} E^k \Psi_J^k - E^{n-1} \Psi_{J-1}^{n-1} - \Phi_J \sum_{k=1}^n \tilde{s}_J^{n-k} e^{-i\frac{E_L}{\hbar}k\Delta t} \\ &\quad + \Phi_{J-1} e^{-i\frac{E_L}{\hbar}(n-1)\Delta t} (1 + e^{-i\frac{E_L}{\hbar}\Delta t}). \end{aligned} \quad (2.54)$$

Dans les applications numériques, E^n est calculé en utilisant la formule des trapèzes :

$$E^n = e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} (V_L^k + V_L^{k+1}) \Delta t / 2},$$

où l'on a posé $V_L^n = V_L(t_n)$, $\forall n \geq 0$.

Dans le domaine $x \leq 0$, le potentiel V est constant, on peut donc appliquer le même

procédé que celui qui nous a permis de déduire la condition aux limites transparente (2.52), on obtient alors la condition aux limites pour Ψ en $x = 0$ ci-dessous :

$$\begin{aligned} \Psi_1^n - s_0^0 \Psi_0^n = & \sum_{k=1}^{n-1} s_0^{n-k} \Psi_0^k - \Psi_1^{n-1} - \Phi_0 \sum_{k=1}^n s_0^{n-k} e^{-i \frac{E_0}{\hbar} k \Delta t} \\ & + \Phi_1 e^{-i \frac{E_0}{\hbar} (n-1) \Delta t} (1 + e^{-i \frac{E_0}{\hbar} \Delta t}), \quad n \geq 1 \end{aligned} \quad (2.55)$$

où $E_0 = E^-$ et s_0^n , $n \geq 0$ est calculé à l'aide (2.46).

2.3.2 Algorithme de résolution directe du problème instationnaire

Dans cette section, $\mathcal{P}$ désigne une discrétisation de l'intervalle $[-k_{max}, k_{max}]$. On suppose que l'on connaît initialement les quantités $V_{NL}^{-1/2}$, V_{NL}^0 , et $(\Psi_k^0)_{k \in \mathcal{P}}$ où $\mathcal{P}$ est un ensemble de P valeurs de k uniformément réparties entre $-k_{max}$ et k_{max} . Dans la pratique, V_{NL}^0 et $(\Psi_k^0)_{k \in \mathcal{P}}$ sont calculées en résolvant le problème de Schrödinger-Poisson stationnaire avec le potentiel initial V_e^0 . Alors, le potentiel $V_{NL}^{-1/2}$ est pris égal à V_{NL}^0 .

Le potentiel V_e étant imposé, sa dépendance en temps est arbitraire : on connaît $V_e^{n+1/2}$ pour tout $n \geq 0$.

Nous présentons ici l'algorithme qui permet de calculer la solution du problème couplé Schrödinger-Poisson instationnaire à un instant $n+1$ à partir de la solution du même problème à l'instant n pour $n \geq 0$.

Algorithme 2.3.2 (Résolution directe).

Quantités connues :

On dispose des quantités $V_{NL}^{n-1/2}$, V_{NL}^n et $(\Psi_k^n)_{k \in \mathcal{P}}$.

Calcul du potentiel intermédiaire : $V_{NL}^{n+1/2}$

On a $V_{NL}^{n+1/2} = V_e^{n+1/2} + V_{NL}^{n+1/2}$ où $V_{NL}^{n+1/2}$ est calculé par extrapolation à partir du potentiel V_{NL}^n , ce qui revient à poser

$$V_{NL}^{n+1/2} = 2V_{NL}^n - V_{NL}^{n-1/2}.$$

Calcul des fonctions d'ondes :

Pour tout $k \in \mathcal{P}$, on calcule Ψ_k^{n+1} à partir de Ψ_k^n et de $V_{NL}^{n+1/2}$ en utilisant le schéma de Crank-Nicolson :

$$-iR(\Psi_{k,j}^{n+1} - \Psi_{k,j}^n) = \Delta_{xx} \Psi_{k,j}^{n+1} + \Delta_{xx} \Psi_{k,j}^n + wV_j^{n+1/2}(\Psi_{k,j}^{n+1} + \Psi_{k,j}^n), \quad j = 1, \dots, J-1,$$

avec les conditions aux limites transparentes non homogènes discrètes (2.52), (2.51) ou bien (2.55), (2.54) selon la dépendance en temps du potentiel V_e (voir la Remarque 2.3.3).

Ce problème est résolu en inversant une matrice carrée tridiagonale de taille $J+1$ où le second membre est donné par les $\Psi_{k,j}^n$. Les conditions aux limites définissent la

première ligne et la dernière ligne de la matrice et font intervenir dans la première et la dernière ligne du second membre les valeurs prises par la fonction d'onde aux bords aux itérations précédentes.

Calcul du nouveau potentiel :

La densité n^{n+1} est calculée à partir des $(\Psi_k^{n+1})_{k \in \mathcal{P}}$ en utilisant la formule des trapèzes :

$$n_j^{n+1} = \sum_{p=0}^{P-1} (g(k_p) |\Psi_{k_p,j}^{n+1}|^2 + g(k_{p+1}) |\Psi_{k_{p+1},j}^{n+1}|^2) \frac{\Delta k}{2}$$

et le potentiel V_{NL}^n est donné par :

$$V_{NL}^{n+1} = \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)^{-1} \left[\frac{q^2}{\varepsilon} (n^{n+1} - n_D)\right].$$

où $\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)^{-1}$ est calculé en inversant la matrice obtenue en discrétisant l'opérateur $x \mapsto x''$ par différences finies.

Conclusion :

On dispose des quantités $V_{NL}^{n+1/2}, V_{NL}^{n+1}, (\Psi_k^{n+1})_{k \in \mathcal{P}}$, ce qui permet de boucler.

Remarque 2.3.3. Dans les applications numériques, on aura à faire à deux cas.

Le premier est le cas d'un potentiel à droite imposé initialement à une valeur V_L^- donnée et cette valeur est changée à $t = 0$ pour valoir V_L , c'est-à-dire que le potentiel vaut

$$V_{e,j}^0 = V_L^-, j \geq J, \quad \text{et pour } n \geq 1, V_{e,j}^n = V_L, j \geq J.$$

Alors on utilise les conditions aux limites (2.52), (2.51) où on donne aux énergies E_0 et E_L les valeurs respectives $E_{k,0} = E_k^-$ et $E_{k,L} = E_k^- + (V_L - V_L^-)$ où :

$$E_k^- = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \text{ pour } k \geq 0 \text{ et } E_k^- = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - B, \text{ pour } k < 0,$$

est l'énergie de la fonction d'onde initiale Ψ_k^0 .

Le deuxième cas est celui d'un potentiel à droite imposé initialement à une valeur V_L^- donnée et qui varie au cours du temps pour $t \geq 0$:

$$V_{e,j} = V_L^-, j \geq J, \quad \text{et pour } n \geq 1, V_{e,j}^n = V_L^n, j \geq J.$$

Alors on utilise les conditions aux limites (2.55), (2.54) où on donne aux énergies E_0 et E_L les valeurs respectives $E_{k,0} = E_k^-$ et $E_{k,L} = E_k^- - V_L^-$.

2.3.3 Calcul de la densité du problème instationnaire à l'aide du mode résonant

Dans cette partie, nous donnons un algorithme permettant de calculer la densité de répartition des particules en utilisant la décomposition sur la résonance dans le cas du problème instationnaire.

Comme en régime stationnaire, l'idée de cet algorithme est de calculer la résonance

et de recueillir ainsi toute l'information donnée par la résonance sans avoir à raffiner le maillage en fréquence autour du pic de résonance.

En régime transitoire, il est important d'avoir une méthode qui permette de calculer la densité avec précision sans avoir à utiliser de maillage adaptatif puisque la résonance change avec le temps et qu'il n'est pas possible de modifier le maillage en fréquence une fois qu'il est fixé (les fonctions d'onde à une fréquence donnée dépendent des fonctions d'onde à la même fréquence au pas de temps précédent).

Le procédé de raffiner le maillage initial autour de la résonance ne fonctionne pas puisque le maillage n'est pas adapté pour les temps suivants. On est donc amené à prendre un maillage en fréquence fin partout pour le calcul direct de la densité.

Pour remédier à cela, les fonctions d'onde, qui permettent de construire la densité, sont obtenues en les décomposant en une partie non résonante et une partie proportionnelle au mode résonant. Comme pour le cas stationnaire, cet algorithme permet de prendre peu de points en fréquence puisque les fonctions non résonantes varient lentement avec la fréquence et le pic de résonance est capté dans la partie résonante à l'aide du mode résonant.

Remarque 2.3.4. Comme cela est dit dans [47], utiliser les résonances pour décomposer la solution d'une équation temporelle

$$\frac{1}{i} \frac{d}{dt} u = Au \quad (2.56)$$

est une généralisation de la décomposition de la dynamique sur les modes propres : si A est une matrice, il est connu que les solutions de (2.56) sont de la forme

$$\sum_i e^{iz_i t} u_i \quad (2.57)$$

où les u_i sont des vecteurs propres de A associés aux valeurs propres z_i . Si A est un opérateur ayant pour résonances les z_i , on peut toujours utiliser (2.57) pour résoudre (2.56) en temps grand. Les u_i sont alors des modes résonants, c'est à dire des fonctions propres au sens de la Remarque 1.5.12.

Idée de l'algorithme

Nous présentons ici l'idée de l'algorithme instationnaire, utilisant le mode résonant, que nous avons écrit. Le point de départ se base sur une idée présentée dans [39] qui consiste à décomposer en deux étapes le calcul de la fonction d'onde solution de

$$[-i\hbar\partial_t - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_e(x, t) + V_{NL}(x, t)]\Psi_k(x, t) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.58)$$

et ce pour chaque condition initiale Φ_k solution de

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_e(x, 0) + V_{NL}(x, 0) - E_k]\Phi_k(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Comme pour le cas stationnaire, on se donne le potentiel

$$V_{fill} = V_e + v_0 \mathbf{1}_{[a_3, b_3]}$$

obtenu en bouchant le puits apparaissant dans le potentiel V_e . La première étape est alors de calculer Ψ_k^e solution de

$$[-i\hbar\partial_t - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_{fill}(x, t) + V_{NL}(x, t)]\Psi_k^e(x, t) = 0, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.59)$$

La seconde étape est de chercher Ψ_k sous la forme $\Psi_k = \Psi_k^e + \Psi_k^i$ où étant donné (2.58), Ψ_k^i doit résoudre :

$$[-i\hbar\partial_t - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_e(x, t) + V_{NL}(x, t)]\Psi_k^i(x, t) = v_0 \mathbf{1}_{[a_3, b_3]}(x)\Psi_k^e(x, t). \quad (2.60)$$

En supposant que l'approximation adiabatique est valable, on peut voir Ψ_k^e comme étant proche d'une fonction propre généralisée de l'Hamiltonien associé au potentiel $V_{fill} + V_{NL}$ pour l'énergie E_k . On peut donc utiliser le même argument qu'en régime stationnaire pour dire que l'intervalle $[a_3, b_3]$ est une région interdite d'un point de vue classique et les solutions de (2.59) sont négligeables à l'intérieur du puits, on les note Ψ_k^e . On montre, également par un argument de localisation de support, que Ψ_k^i est négligeable dans les barrières (voir [39]).

Comme on veut Ψ_k sur l'intervalle $[0, L]$ seulement, on calcule les Ψ_k^e en résolvant (2.59) avec les conditions aux limites transparentes instationnaires (2.42), (2.43). On traite (2.60) avec une approximation à un seul mode en cherchant les Ψ_k^i proportionnels au mode résonant "fondamental" (mode résonant de plus petite énergie) correspondant au potentiel $V(t) = V_e(t) + V_{NL}(t)$ à chaque instant t . Le mode résonant est calculé sur l'intervalle $[0, L]$ avec des conditions aux limites résonantes.

Calcul de la résonance

A un instant t , la résonance est, comme en régime stationnaire, calculée en trouvant z et u solution du problème (1.47) posé avec l'Hamiltonien $H(t)$. La différence avec le régime stationnaire est la dépendance en temps de l'Hamiltonien, à travers le potentiel $V = V(t)$, et donc que l'on a $u = u(x, t)$ et $z = z(t)$. On en déduit le problème suivant sur le couple $(u(x, t), z(t))$, pour tout $t > 0$:

$$\begin{cases} [-h^2\partial_x^2 + V_e(x, t) + V_{NL}(x, t) - z(t)]u(x, t) = 0, & (0, L), \\ h\partial_x u(0, t) + is(z)u(0, t) = 0, \\ h\partial_x u(L, t) - is(z + B)u(L, t) = 0. \end{cases} \quad (2.61)$$

où $h = \frac{\hbar^2}{2m}$ et $s(z)$ est la racine complexe définie par (1.46).

Comme en régime stationnaire, ce problème une fois discrétisé revient à un problème de valeur propre non linéaire que l'on résout avec la méthode de Newton présentée précédemment.

Décomposition sur la résonance

Comme nous l'avons dit dans la présentation de l'algorithme, on cherche Ψ_k sous la forme $\Psi_k = \Psi_k^e + \Psi_k^i$ avec Ψ_k^e solution de (2.59) et Ψ_k^i solution de (2.60). La fonction d'onde extérieure est calculée en résolvant (2.59) à l'aide de la méthode de Crank-Nicolson avec le potentiel V_{fill} . Ce qui donne :

$$-iR((\Psi_k^e)_j^{n+1} - (\Psi_k^e)_j^n) = \Delta_{xx}(\Psi_k^e)_j^{n+1} + \Delta_{xx}(\Psi_k^e)_j^n + w(V_{fill,j}^{n+1/2} + V_{NL,j}^{n+1/2})((\Psi_k^e)_j^{n+1} + (\Psi_k^e)_j^n),$$

pour $j = 1, \dots, J-1$, $n \geq 0$, avec les conditions aux limites transparentes non homogènes discrètes (2.52), (2.51) ou bien (2.55), (2.54) selon la dépendance en temps du potentiel V_{fill} (voir la Remarque 2.3.3).

On cherche la fonction d'onde intérieure sous la forme $\Psi_k^i(x, t) = \theta_k(t)u(x, t)$ où u est le mode résonant, solution du problème (2.61), correspondant à la plus petite énergie résonante. Quite à renormaliser u , on peut supposer

$$\int_0^L |u(x, t)|^2 dx = 1.$$

D'autre part, en demandant à la fonction $\theta_k u$ d'être solution de l'équation (2.60), on obtient une équation différentielle ordinaire d'ordre 1 que doit vérifier θ_k , où les fonctions Ψ_k^e et u , dont on dispose puisque on les a calculées précédemment, constituent les données de l'équation.

Plus précisément, en injectant $\theta_k u$ dans (2.60), on obtient :

$$\begin{aligned} -i\hbar\left(\frac{d}{dt}\theta_k\right)(t)u(x, t) - i\hbar\theta_k(t)\partial_t u(x, t) + \theta_k(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V_e(x, t) \right. \\ \left. + V_{NL}(x, t)\right]u(x, t) = v_0\mathbf{1}_{[a_3, b_3]}(x)\Psi_k^e(x, t), \end{aligned}$$

soit en utilisant l'équation vérifiée par u :

$$\left[-i\hbar\left(\frac{d}{dt}\theta_k\right)(t) + z(t)\theta_k(t)\right]u(x, t) - i\hbar\theta_k(t)\partial_t u(x, t) = v_0\mathbf{1}_{[a_3, b_3]}(x)\Psi_k^e(x, t).$$

Le mode de résonant étant choisi normalisé, l'équation précédente multipliée par $\bar{u}$ et intégrée sur $[0, L]$ donne l'équation différentielle sur θ_k ci-dessous :

$$\theta_k'(t) + \left[\frac{i}{\hbar}z(t) + \int_0^L \partial_t u(x, t)\bar{u}(x, t)dx\right]\theta_k(t) = S_k(t). \quad (2.62)$$

où $S_k(t) = \frac{i}{\hbar}v_0 \int_{a_3}^{b_3} \Psi_k^e(x, t)\bar{u}(x, t)dx$.

Par un changement de phase, on peut toujours trouver u solution de $H(t)u = z(t)u$ tel que $\|u(\cdot, t)\|_{L^2} = 1$ et

$$\int_0^L \partial_t u(x, t)\bar{u}(x, t)dx = 0, \quad \forall t > 0. \quad (2.63)$$

En effet, supposons que l'on ait $\tilde{u}$ vérifiant $H(t)\tilde{u} = z(t)\tilde{u}$ et $\|\tilde{u}\|_{L^2} = 1$, alors on pose

$$u = \tilde{u}e^{i\varphi(t)},$$

où $t \mapsto \varphi(t) \in \mathbb{R}$ est telle que u vérifie (2.63).

C'est-à-dire que $\varphi(t)$ est la solution l'équation différentielle :

$$\varphi'(t) = i \int_0^L \partial_t \tilde{u}(x, t) \overline{\tilde{u}(x, t)} dx.$$

On remarque que $\|\tilde{u}(\cdot, t)\|_{L^2} = 1 \Rightarrow \frac{d}{dt} \|\tilde{u}(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = 2 \operatorname{Re}(\int_0^L \partial_t \tilde{u}(x, t) \overline{\tilde{u}(x, t)} dx) = 0$,

donc $\varphi(t) \in \mathbb{R}$ sous la condition $\varphi(0) = 0$, φ est bien une fonction de phase et u solution de $H(t)u = z(t)u$ telle que $\|u(\cdot, t)\|_{L^2} = 1$ et (2.63) est vérifiée.

Cependant, numériquement on résoud le problème trouver u tel que $H(t)u = z(t)u$ et $\|u(\cdot, t)\|_{L^2} = 1$, on ne peut donc pas supposer à priori que (2.63) est vérifiée. On considère donc que θ_k est solution de l'équation (2.62) complète.

Remarque 2.3.5. En supposant que l'approximation adiabatique marche pour le spectre continu, son application à l'équation (2.59) consiste à dire que les fonctions d'onde Ψ_k^e peuvent être approchées par $\Phi_k^e e^{-i \frac{E_k^-}{\hbar} t}$ où les Φ_k^e sont les fonctions propres généralisées de l'Hamiltonien initial, associées à l'énergie E_k^- , solutions de :

$$[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{fill}(0) + V_{NL}(0) - E_k^-] \Phi_k^e = 0.$$

Alors, à ce moment là, S_k est proche d'être un terme oscillant à la fréquence E_k^- de la forme $\tilde{S}_k e^{-i \frac{E_k^-}{\hbar} t}$.

Si on choisit u comme cela a été décrit avant cette remarque, c'est-à-dire tel que θ_k est solution de

$$\theta_k'(t) + \frac{i}{\hbar} z(t) \theta_k(t) = S_k(t),$$

on observe un phénomène de résonance (au sens de résonance donnée par le terme source d'une équation différentielle) pour E_k^- proche de $E_R := \operatorname{Re}(z)$. Ceci correspond, en régime transitoire, à la forme piquée du coefficient θ_k autour de la résonance donnée en régime stationnaire par une formule de type Briet-Wigner.

Décomposition sur la résonance : réalisation numérique

Décomposer sur la résonance revient à calculer le coefficient θ_k lorsque l'on dispose du mode résonant, de la résonance et de la fonction extérieure Ψ_k^e , permettant ainsi de construire la fonction intérieure Ψ_k^i .

Pour cela on résoud l'équation différentielle ordinaire d'ordre 1 (2.62) à l'aide de la méthode de Crank-Nicolson :

$$\begin{aligned} (\theta_k^{n+1} - \theta_k^n) / \Delta t + [\frac{i}{\hbar} z^{n+1/2} + \int_0^L \partial_t u^{n+1/2} \overline{u^{n+1/2}} dx] (\theta_k^{n+1} + \theta_k^n) / 2 \\ = (S_k^{n+1/2, n} + S_k^{n+1/2, n+1}) / 2, \quad (2.64) \end{aligned}$$

où $S_k^{n,m} = \frac{i}{\hbar} v_0 \int_{a_3}^{b_3} \Psi_k^{e,m}(x) \overline{u^n}(x) dx$ et $u^{n+1/2}$, $z^{n+1/2}$ sont le mode résonant et la résonance au temps $t^{n+1/2}$ tels que

$$\mu^{n+1/2}(u) := \int_0^L \partial_t u^{n+1/2} \overline{u^{n+1/2}} dx$$

soit négligeable.

Plus précisément, on calcule le mode résonant $\tilde{u}^{n+1/2}$ et la résonance $z^{n+1/2}$ en résolvant le problème (2.61) en $t = t^{n+1/2}$ (c'est-à-dire pour le potentiel $V^{n+1/2}$) avec $\|\tilde{u}^{n+1/2}\|_{L^2} = 1$ à l'aide de la méthode permettant de résoudre les problèmes de valeur propre non linéaire.

A priori, on a $\mu^{n+1/2}(\tilde{u}) \neq 0$, alors on cherche une phase $\varphi^{n+1/2} \in \mathbb{R}$ telle que $u^{n+1/2} = \tilde{u}^{n+1/2} e^{i\varphi^{n+1/2}}$ vérifie $\mu^{n+1/2}(u)$ est négligeable. On remarque d'abord, en discrétisant la dérivée en temps de u par différences finies et en utilisant $u^{n+1/2} \approx (u^{n-1/2} + u^{n+1/2})/2$, que l'on peut faire l'approximation suivante

$$\mu^{n+1/2}(u) = \frac{1}{2\Delta t} \int_0^L (u^{n+1/2} - u^{n-1/2}) \overline{(u^{n+1/2} + u^{n-1/2})} dx,$$

où l'on suppose que le $u^{n-1/2}$ est tel que $\mu^{n-1/2}(u)$ est négligeable.

En utilisant le fait que $\|u^{n+1/2}\|_{L^2} = \|u^{n-1/2}\|_{L^2} = 1$ dans la dernière égalité, on a :

$$\mu^{n+1/2}(u) = \frac{i}{\Delta t} \text{Im} \left[\int_0^L u^{n+1/2} \overline{u^{n-1/2}} dx \right].$$

Si l'on note $\omega^{n+1/2} = \int_0^L \tilde{u}^{n+1/2} \overline{u^{n-1/2}} dx$, il suffit de choisir $\varphi^{n+1/2}$ tel que

$$e^{i\varphi^{n+1/2}} = \frac{\overline{\omega^{n+1/2}}}{|\omega^{n+1/2}|}, \quad (2.65)$$

qui est bien un complexe de module 1. Une telle phase $\varphi^{n+1/2}$ convient puisqu'elle vérifie :

$$\int_0^L u^{n+1/2} \overline{u^{n-1/2}} dx = e^{i\varphi^{n+1/2}} \int_0^L \tilde{u}^{n+1/2} \overline{u^{n-1/2}} dx = \omega^{n+1/2} e^{i\varphi^{n+1/2}} = |\omega^{n+1/2}| \in \mathbb{R},$$

et donc $\text{Im} \left[\int_0^L u^{n+1/2} \overline{u^{n-1/2}} dx \right] = 0$ et $\mu^{n+1/2}(u)$ est négligeable.

Donc pour u bien choisi, le schéma (2.64) s'écrit :

$$(\theta_k^{n+1} - \theta_k^n) / \Delta t + \frac{i}{\hbar} z^{n+1/2} (\theta_k^{n+1} + \theta_k^n) / 2 = (S_k^{n+1/2,n} + S_k^{n+1/2,n+1}) / 2. \quad (2.66)$$

Remarque 2.3.6. Le schéma de Crank-Nicolson est le plus adapté pour la résolution de (2.62) car les méthodes de Euler explicite et implicite sont instables (à montrer mais on le remarque numériquement). D'autre part, la méthode de Euler implicite est inutilisable dans le cas du couplage avec Poisson puisque la résonance au temps $n+1$ est inconnue tant que le potentiel au temps $n+1$ n'est pas connu et donc tant que la densité n'est pas calculée.

Remarque 2.3.7. Pour écrire (2.64), on a pris les fonctions u et z au temps $n + 1/2$. Pour cela, on s'est inspiré du schéma de Crank-Nicolson (2.40) utilisé pour résoudre (2.39) où le potentiel V est pris au temps $n + 1/2$. On a fait ce choix car l'implication n'est pas possible dans le cas du couplage avec Poisson (voir la Remarque 2.3.6). Comme nous le verrons dans la suite, les quantités $u^{n+1/2}$ et $z^{n+1/2}$ seront accessibles par interpolation du potentiel au temps $n + 1/2$.

Algorithme de résolution à l'aide de l'approximation à un mode en régime transitoire

Dans cette section, $\mathcal{P}$ désigne une discrétisation de l'intervalle $[-k_{max}, k_{max}]$. On suppose que l'on connaît initialement les quantités V_{NL}^0 , $u^{-1/2}$, $(\Psi_k^{e,0})_{k \in \mathcal{P}}$ et $(\theta_k^0)_{k \in \mathcal{P}}$ où $\mathcal{P}$ est un ensemble de P valeurs de k uniformément réparties entre $-k_{max}$ et k_{max} .

Dans la pratique, V_{NL}^0 , et $(\Psi_k^0)_{k \in \mathcal{P}}$ sont calculées en résolvant le problème de Schrödinger-Poisson avec décomposition sur la résonance pour le potentiel initial V_e^0 . Cette résolution nous permet d'avoir notamment le mode résonant initial u^0 . Alors, on prend $u^{-1/2} = u^0$.

Le potentiel V_e étant imposé, sa dépendance en temps est arbitraire : on connaît $V_e^{n+1/2}$ pour tout $n \geq 0$. Le potentiel $V_{fill}^{n+1/2}$ est connu pour tout $n \geq 0$ puisqu'il est construit à partir du potentiel $V_e^{n+1/2}$.

On présente l'algorithme qui permet de calculer la solution de problème couplé Schrödinger-Poisson à un instant $n + 1$ à partir de la solution à l'instant n pour $n \geq 0$.

Algorithme 2.3.8 (Approximation à un mode).

Quantités connues :

On dispose des quantités V_{NL}^n , $u^{n-1/2}$, $(\Psi_k^{e,n})_{k \in \mathcal{P}}$ et $(\theta_k^n)_{k \in \mathcal{P}}$.

Calcul du potentiel et de la résonance intermédiaires (étapes indépendantes de k) :

$V_{NL}^{n+1/2}$ est calculé par interpolation à partir du potentiel V_{NL}^n en faisant l'ansatz (2.15) et en faisant intervenir l'équation de Poisson, c'est-à-dire que l'on prend $V_{NL}^{n+1/2}$ solution de

$$-\frac{d^2}{dx^2} V_{NL}^{n+1/2} = \frac{q^2}{\varepsilon} (n[V_{NL}^n] \exp((V_{NL}^n - V_{NL}^{n+1/2})/V_{ref}) - n_D)$$

On calcule la résonance $z^{n+1/2}$ et le mode résonant $u^{n+1/2}$ en résolvant le problème (2.61) associé au potentiel $V_e^{n+1/2} + V_{NL}^{n+1/2}$ à l'aide de la méthode Newton (2.31).

Le mode propre $u^{n+1/2}$ est renormalisé pour vérifier $\|u^{n+1/2}\|_{L^2} = 1$, à l'aide de (2.65) et $u^{n-1/2}$, pour que $\mu^{n+1/2}(u)$ soit négligeable.

Calcul des fonctions d'ondes :

Pour tout $k \in \mathcal{P}$, on a $\Psi_k^{n+1} = \Psi_k^{e,n+1} + \Psi_k^{i,n+1}$.

On calcule $\Psi_k^{e,n+1}$ à partir de $\Psi_k^{e,n}$, $V_{fill}^{n+1/2}$ et $V_{NL}^{n+1/2}$ en utilisant le schéma de Crank-

Nicolson :

$$\begin{aligned}
 -iR((\Psi_k^e)_j^{n+1} - (\Psi_k^e)_j^n) &= \Delta_{xx}(\Psi_k^e)_j^{n+1} + \Delta_{xx}(\Psi_k^e)_j^n \\
 &+ w(V_{fill,j}^{n+1/2} + V_{NL,j}^{n+1/2})((\Psi_k^e)_j^{n+1} + (\Psi_k^e)_j^n), \quad j = 1, \dots, J-1,
 \end{aligned}$$

avec les conditions aux limites transparentes non homogènes discrètes (2.52), (2.51) ou bien (2.52), (2.51) selon la dépendance en temps du potentiel V_e (voir la Remarque 2.3.3).

Calcul des $\Psi_k^{i,n+1}$ pour tout $k \in \mathcal{P}$: Soit $k \in \mathcal{P}$, on calcule θ_k^{n+1} à partir de $\Psi_k^{e,n}$, $\Psi_k^{e,n+1}$, $z^{n+1/2}$, $u^{n+1/2}$ et θ_k^n en résolvant l'équation différentielle ordinaire (2.62) avec le schéma de Crank-Nicolson (2.66).

Normalement, on doit faire ensuite $\Psi_k^{i,n+1} = \theta_k^{n+1}u^{n+1}$ mais ne disposant pas de u^{n+1} (Remarque 2.3.6), on fait l'approximation :

$$\Psi_k^{i,n+1} = \theta_k^{n+1}u^{n+1/2}$$

Calcul de la nouvelle solution :

La densité n^{n+1} est calculée à partir des $(\Psi_k^{n+1})_{k \in \mathcal{P}}$ en utilisant la formule des trapèzes :

$$n_j^{n+1} = \sum_{p=0}^{P-1} (g(k_p)|\Psi_{k_p,j}^{n+1}|^2 + g(k_{p+1})|\Psi_{k_{p+1},j}^{n+1}|^2) \frac{\Delta k}{2}$$

et le potentiel V_{NL}^n est donné par :

$$V_{NL}^{n+1} = \left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)^{-1} \left[\frac{q^2}{\varepsilon}(n^{n+1} - n_D)\right].$$

où $(-\frac{d^2}{dx^2})^{-1}$ est calculé en inversant la matrice obtenue en discrétisant l'opérateur $x \mapsto x''$ par différences finies.

Conclusion :

On dispose des quantités V_{NL}^{n+1} , $u^{n+1/2}$, $(\Psi_k^{e,n+1})_{k \in \mathcal{P}}$ et $(\theta_k^{n+1})_{k \in \mathcal{P}}$ ce qui permet de boucler.

Remarque 2.3.9. Dans l'algorithme ci-dessus on a fait une approximation consistant à remplacer u^{n+1} par $u^{n+1/2}$ dans le calcul de $\Psi_k^{i,n+1}$. En faisant cela on ne commet pas trop d'erreur puisque u^n varie en temps comme le potentiel V_{NL}^n et ce dernier varie doucement en temps.

Remarque 2.3.10. Pour déduire le potentiel $V^{n+1/2}$ à partir du potentiel on n'a pas utilisé l'extrapolation linéaire

$$V^{n+1/2} = 2V^n - V^{n-1/2}$$

comme nous l'avons fait pour la résolution directe car celle-ci est instable en temps pour la décomposition sur la résonance. Nous avons donc choisi de faire intervenir l'équation de Poisson en s'inspirant de l'itération de Gummel en régime stationnaire. Un tel procédé est meilleur car il fait intervenir le couplage Shrödinger/Poisson.

Remarque 2.3.11. Cet algorithme peut être amélioré en essayant de déduire une forme de l'intégrale de θ_k^n permettant ainsi de mieux tenir compte du pic comme on l'a fait en régime stationnaire. En régime stationnaire, une telle méthode permettrait de prendre moins de points en fréquence et améliorerait la convergence de la méthode de Gummel. Il serait donc bien de pouvoir l'adapter en régime transitoire.

2.3.4 Résultats numériques

Les valeurs des paramètres physiques prises pour la réalisation des tests instationnaires sont les même que celles de la section 2.1.9. On les rappelle ci-dessous :

T	n_D^1	n_D^2	m	E_F
$300K$	$1 \times 10^{24} m^{-3}$	$5 \times 10^{21} m^{-3}$	$0,067me$	$6,7097 \times 10^{-21}$

Pour le système de Schrödinger Poisson instationnaire, on se restreindra au cas du potentiel extérieur suivant. Les barrières ont une épaisseur de $5nm$ chacune. La largeur du puits, qui est l'écart entre les deux barrières vaut $5nm$. La hauteur de la barrière est de $0,3eV$.

Ces données concernant le potentiel extérieur sont réunies dans le tableau suivant :

L	a_1	a_2	a_3	b_3	b_2	b_1	v_0
$135nm$	$50nm$	$60nm$	$65nm$	$70nm$	$75nm$	$85nm$	$0.3eV$

Test des conditions aux limites transparentes

Nous avons déjà réalisé un test pour les conditions aux limites transparentes homogènes, voir Figure 2.19. Dans cette section nous présentons deux tests, le premier réalisé avec des conditions aux limites transparentes non homogènes avec un bias constant, le deuxième réalisé avec des conditions aux limites transparentes non homogènes avec un bias dépendant du temps.

Premier test

On a résolu, avec les conditions aux limites transparentes non homogènes, l'équation de Schrödinger instationnaire linéaire avec une donnée initiale non supportée dans $]0, L[$. Plus précisément, on a pris pour donnée initiale le paquet d'onde $\Phi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2} + ikx\right)$ à l'énergie k , centré au point $x = 0$, et on l'a propagé avec l'équation de Schrödinger instationnaire à l'aide du schéma de Crank-Nicolson (2.40) avec conditions aux limites transparentes non homogènes (2.52), (2.51). Le potentiel linéaire que l'on a pris est une simple barrière $V = v_0 \mathbf{1}_{[a_2, b_2]}$. Le nombre de points de discrétisation en espace est $J = 300$, le pas de temps est $\Delta t = 1$ femto secondes. Les paramètres déterminant le paquet d'ondes sont $\sigma = 0.1L$, $k = \frac{2\pi}{0.08L}$.

Le résultat obtenu est représenté sur les graphiques de la Figure 2.20 : on a représenté le module de la fonction d'onde instationnaire pour différents instants. Pour chaque graphique, nous avons également représenté le potentiel V et le module de la solution de l'équation de Schrödinger correspondant à V , calculée avec la résolution

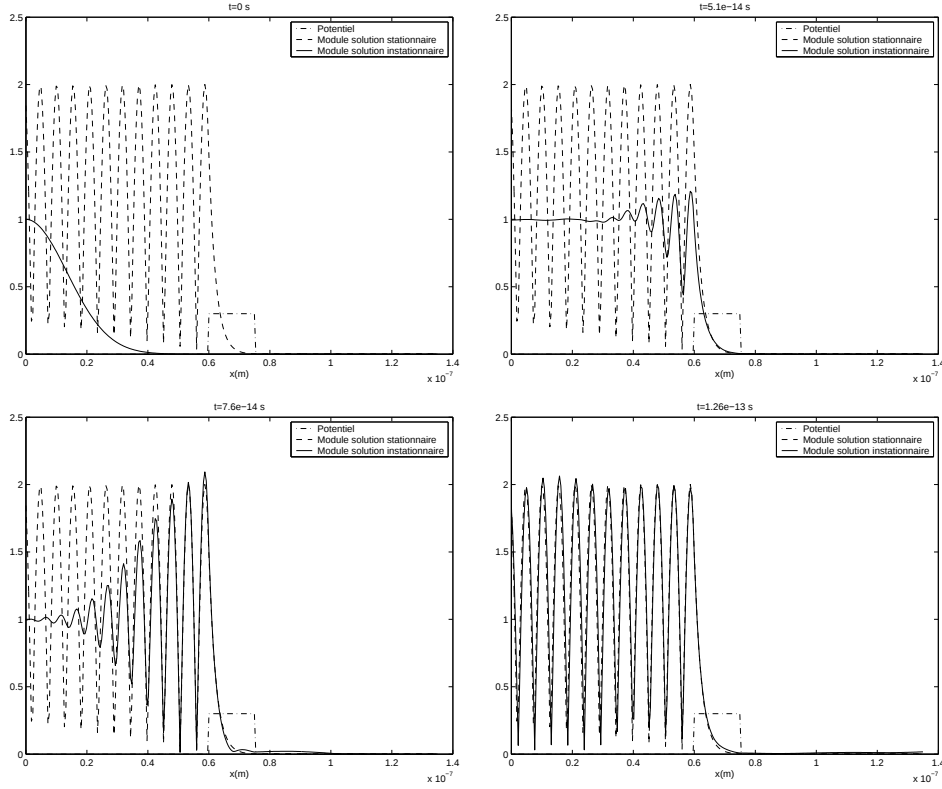


FIG. 2.20 – Evolution d'un paquet d'ondes, soumis à une barrière de potentiel, calculée avec le schéma de Crank-Nicolson avec conditions aux limites transparentes non homogènes pour $J = 300$ et $\Delta t = 1$ femto secondes.

directe présentée dans la section 2.1.3.

On remarque que l'évolution en temps de la solution instationnaire se fait sans réflexion numérique aux bords du domaine. D'autre part, le module de la solution instationnaire converge vers le module de la solution stationnaire comme on peut le voir sur le graphique de gauche de la Figure 2.22. L'erreur L2 représentée sur ce graphique est une erreur relative par rapport à la solution stationnaire exprimée en pourcent : $100 \times \frac{\| |\Psi_{stat}| - |\Psi(t_n, \cdot)| \|_{L^2(0,L)}}{\| \Psi_{stat} \|_{L^2(0,L)}}$.

Deuxième test

Ce test à été réalisé avec la même condition initiale que le test précédent. On a calculé son évolution en temps pour l'équation de Schödinger instationnaire avec un potentiel $V = V_0 + \mathcal{B}$,

$$V_0 = v_0 \mathbf{1}_{[a_2, b_2]},$$

et $\mathcal{B}$ est donné par (1.12) où le biais appliqué $B = B(t)$ dépend du temps. La fonction $B(t)$ que nous avons choisie est représentée sur le graphique de droite de la Figure 2.22. C'est une fonction polynomiale de degré trois allant de $B = 0$ eV à $B = 0.1$ eV en 50 itérations.

Dans ce cas les conditions aux limites transparentes du test précédent ne sont plus utilisables : nous avons réalisé les calculs à l'aide du schéma de Crank-Nicolson (2.40)

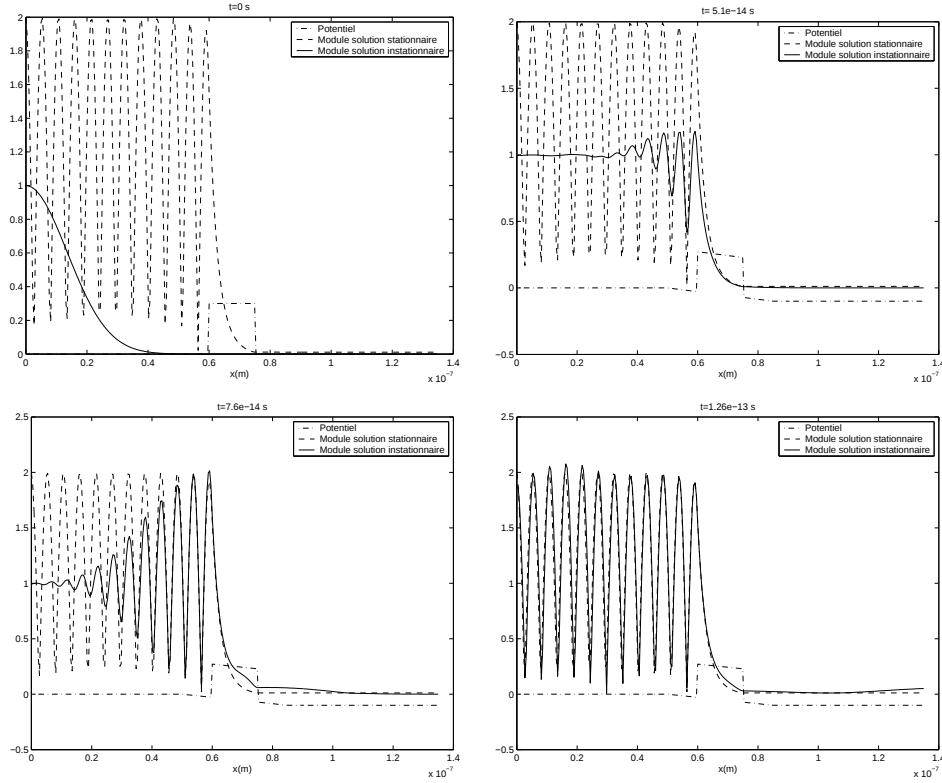


FIG. 2.21 – Evolution d'un paquet d'ondes soumis, à une barrière de potentiel et une différence de potentiel variable, calculée avec le schéma de Crank-Nicolson avec conditions aux limites transparentes non homogènes adaptées, pour $J = 300$ et $\Delta t = 1$ femto secondes.

avec conditions aux limites transparentes non homogènes pour un biais dépendant du temps (2.55), (2.54). Le nombre de points de discrétisation en espace est $J = 300$, le pas de temps est $\Delta t = 1$ femto secondes. Le résultat obtenu est représenté sur les graphiques de la Figure 2.21 : on a représenté le module de la fonction d'onde instationnaire et le potentiel V pour différents instants. Pour chaque graphique, nous avons également représenté le module de la solution de l'équation de Schödinger correspondant au potentiel final, calculée avec la résolution directe présentée dans la section 2.1.3.

On remarque que l'évolution en temps de la solution instationnaire se fait sans réflexion numérique aux bords du domaine. D'autre part, le module de la solution instationnaire converge vers le module de la solution stationnaire comme on peut le voir sur le graphique de gauche de la Figure 2.22. L'erreur L2 représentée sur ce graphique est une erreur relative par rapport à la solution stationnaire exprimée en pourcent :

$$100 \frac{\| |\Psi_{stat}| - |\Psi(t_n, \cdot)| \|_{L^2(0,L)}}{\| \Psi_{stat} \|_{L^2(0,L)}}.$$

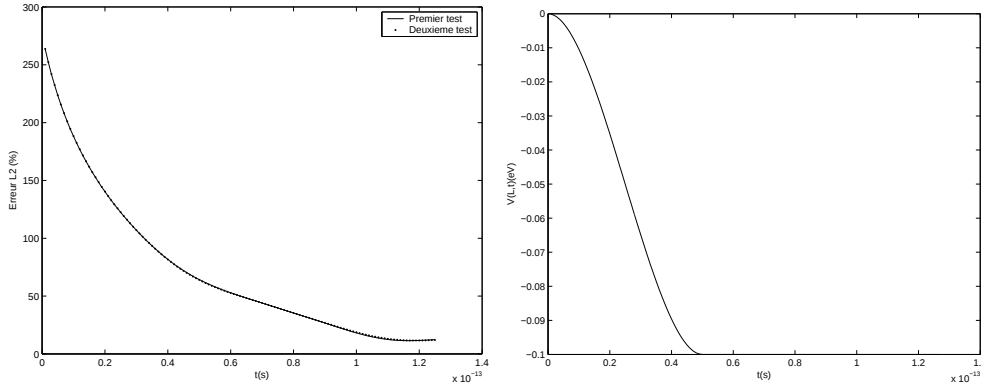


FIG. 2.22 – Evolution de la norme l'erreur L2 avec la solution stationnaire pour les Tests 1 et 2 et évolution du bias pour le Test 2.

Résolution du problème de Schrödinger-Poisson instationnaire

Dans les sous-sections ci-dessous, nous donnons des résultats pour la résolution du problème de Schrödinger-Poisson instationnaire (1.22) à l'aide de l'Algorithme 2.3.2 que nous appellerons "Directe", qui jouera le rôle de référence et à l'aide de l'Algorithme 2.3.8, nous l'appellerons "Dec. résonance", ceci est le nouvel algorithme que nous proposons. Comme nous l'avons signalé dans la section 1.2.1, la dépendance en temps du potentiel extérieur V_e est donnée par celle du bias $B(t)$. La fonction $B(t)$ est telle que $B(0) = B_i$ et $B(t) = B_f$ pour $t \gg \Delta t$, où B_i et B_f sont deux valeurs de la différence de potentiel. La résolution est initialisée à la solution du problème stationnaire (1.18) pour $B = B_i$. La solution instationnaire obtenue doit tendre vers la solution du problème stationnaire (1.18) pour $B = B_f$. En particulier nous considérons les deux cas suivants similaires aux cas de la section précédente où l'on avait pris une simple barrière :

- "Shift brutal" : on a $B(0) = B_i$ et $B(t) = B_f$ pour $t > 0$.

- "Shift C^1 " : étant donné un entier n_0 , on a $B(0) = B_i$, $B(t) = B_f$ pour $t \geq n_0 \Delta t$ et sur $(0, n_0 \Delta t)$ est le polynôme de degré 3 rendant $B(t)$ C^1 sur $\mathbb{R}^+$.

Bien que le "Shift C^1 " semble le plus adapté car plus régulier, il pose la difficulté de devoir adapter les conditions aux limites.

Les résultats donnés par les différents algorithmes sont comparés du point de vue de la convergence vers la solution stationnaire et du temps de calcul. Comme en régime stationnaire, la méthode "Dec. résonance" permet de prendre moins de points en fréquence, la partie résonante de la densité étant donnée par le mode résonant dont on calcule la valeur.

Bien que la méthode de Crank-Nicolson (2.40) avec les conditions aux limites transparentes (2.52), (2.51) soit inconditionnellement stable [4], on remarque numériquement que pour $\Delta t \geq 3 \times 10^{-15} s$ la résolution du problème de Schrödinger-Poisson est instable. On prendra donc pour l'ensemble des tests instationnaires $\Delta t = 10^{-15} s$.

Test 1 : "Shift brutal", $B_i = 0$ et $B_f = 0.1$ eV

Pour ce test, le nombre de points de discrétisation en espace est $J = 300$ et le nombre

de points en fréquence est $P = 1500$ pour la méthode "Directe" et $P = 600$ pour la méthode "Dec. resonance". On utilise les conditions aux limites transparentes (2.52), (2.51) pour la résolution de l'équation de Schrödinger instationnaire. Sur le graphique de gauche de la Figure 2.24, nous avons représenté pour les deux méthodes l'évolution de la charge dans le puits donnée par

$$\int_{a_2}^{b_2} n(x, t) dx \quad (2.67)$$

en fonction du temps t . Pour les deux méthodes, on remarque que la charge dans le puits, qui était initialement à la valeur correspondant au potentiel avec $B = 0$ –plus faible que pour un potentiel avec $B > 0$ comme on peut le voir sur la Figure 2.23– augmente pour converger vers la valeur de la densité avec $B = B_f$.

Sur le graphique de droite de la Figure 2.24, on a représenté l'évolution de l'erreur relative en norme L2 et en pourcent de la densité instationnaire $n(x, t)$ par rapport à la densité stationnaire $n_{stat}(x)$ pour $B = B_f$:

$$100 \frac{\|n(\cdot, t) - n_{stat}\|_2}{\|n_{stat} - n_D\|_2} \quad (2.68)$$

en fonction du temps t . On remarque que pour les deux méthodes, la densité converge vers la densité stationnaire : l'erreur a la valeur 16.1% en $t = 0$ s et 1.92% en $t = 4 \times 10^{-12}$ s.

Nous avons représenté sur la Figure 2.25 le logarithme $C(k)$ de la charge partielle dans le puits correspondant à la fréquence k , calculée avec la résolution "Directe" :

$$C(k) = \log \left(\int_{a_2}^{b_2} |\Psi_k(x, t)|^2 dx \right) \quad (2.69)$$

ainsi que les fréquences

$$k_R^-(t) = -\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_R(t) + B(t))}, \quad k_R^+(t) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E_R(t)} \quad (2.70)$$

correspondant à l'énergie résonante $E_R(t) = \text{Re}(z(t))$ intervenant dans l'approximation à un mode, pour les instants $t = 2 \times 10^{-13}$ s, $t = 2 \times 10^{-12}$ s, $t = 8 \times 10^{-12}$ s et $t = 1.4 \times 10^{-11}$ s. On remarque que pour les temps t petits devant $t_0 = 10^{-12}$ s, la transmission n'est pas piquée autour de l'énergie résonante au temps t , elle est piquée autour de l'énergie résonante initiale $E_R(0)$. Pour les temps de l'ordre de t_0 elle est piquée autour de $E_R(t)$ et le pique initial s'éteint pour disparaître au delà de $10 \times t_0$.

Cette observation est importante pour le choix de l'algorithme. En effet, en utilisant l'ansatz que le coefficient θ_k devant le mode résonant s'écrit à l'aide d'une formule de Briet-Wigner de la forme (2.8), on peut écrire un algorithme où l'intégrale entre deux points de discrétisation en fréquence k_p et k_{p+1} tient compte du pique de transmission. En régime stationnaire, l'ansatz est vrai et cela permet de résoudre le problème de Schrödinger-Poisson avec seulement $P = 60$ points en fréquence. En

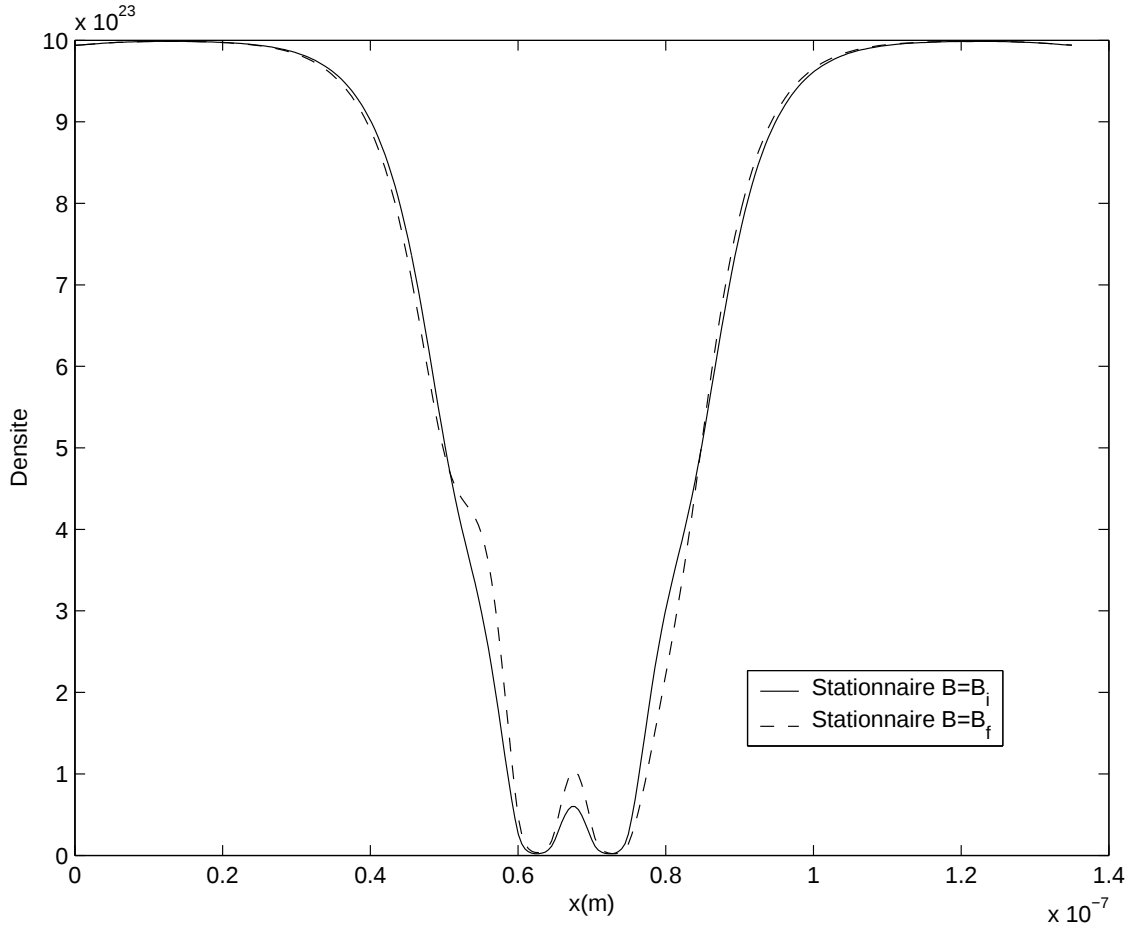
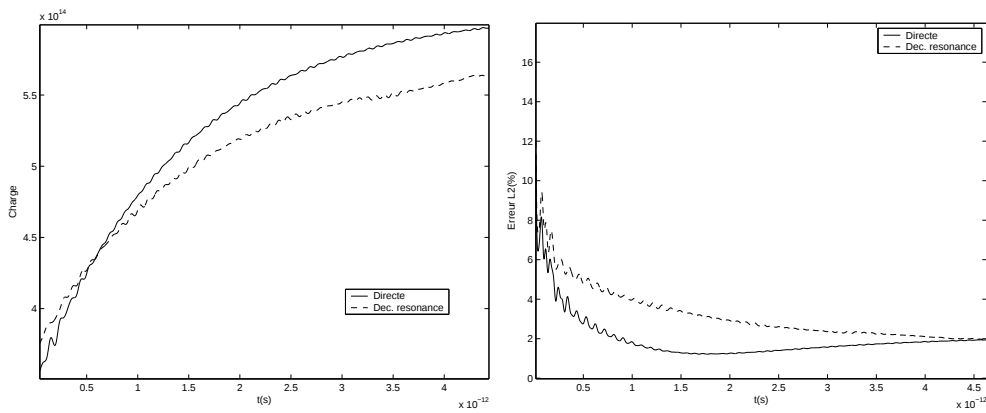

 FIG. 2.23 – Test 1, densité en régime stationnaire pour $B = B_i$ et $B = B_f$.


FIG. 2.24 – Test 1, évolution de la charge dans le puits (gauche) et de l'erreur L2 avec la solution stationnaire (droite) pour les algorithmes "Directe" et "Dec. résonance".

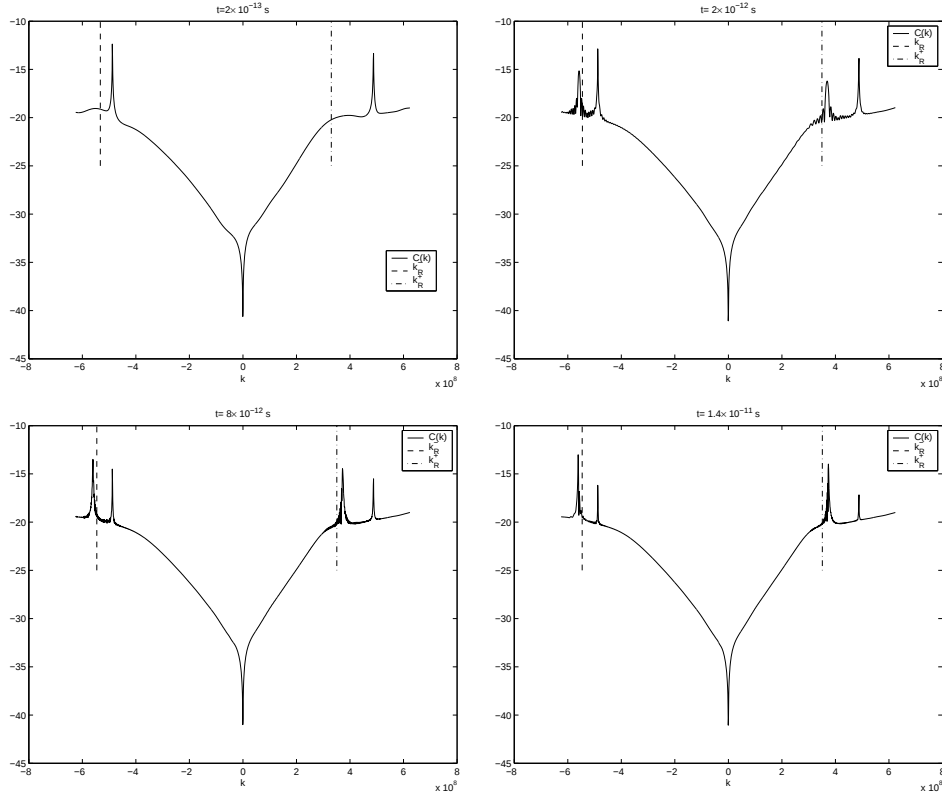


FIG. 2.25 – Test 1, représentation du logarithme $C(k)$ de la charge partielle dans le puits en fonction de la fréquence k , et des fréquences correspondant à l'énergie résonante, pour différents temps.

régime transitoire, nous venons d'observer que la forme piquée autour de $E_R(t)$ n'est pas toujours vraie et les calculs sont plus délicats. Nous n'avons pas réussi à écrire un algorithme stable avec moins de $P = 600$ points en fréquence.

Pour gagner en temps de calcul, l'énergie $E_R(t)$ est approchée par l'énergie fondamentale de l'Hamiltonien avec conditions aux limites de Dirichlet obtenue par la résolution du problème (2.33). L'erreur due à cette approximation explique l'écart entre k_R^- , k_R^+ et les pics de transmission.

La Figure 2.26 illustre le fait que les deux méthodes "Directe" et "Déc. résonance" convergent vers la solution stationnaire : pour chaque méthode la densité instationnaire au temps $t = 10^{-11}$ s est confondue avec la densité stationnaire pour $B = B_f$. La nouvelle méthode proposée "Déc. résonance" a donc la propriété de convergence souhaitée et elle a l'avantage de moins coûter en temps de calcul que la méthode de référence "Directe", comme on peut en juger sur le tableau ci-dessous.

	P	Erreur L2 (%)	CPU (s)
Direct	1500	2.0	76421.47
Déc. résonance	600	1.49	34777.53

Ici P désigne le nombre de points de discrétisation en fréquence, Erreur L2 désigne l'erreur (2.68) au temps final $t = 4.5 \times 10^{-12}$ s et CPU désigne le temps en secondes

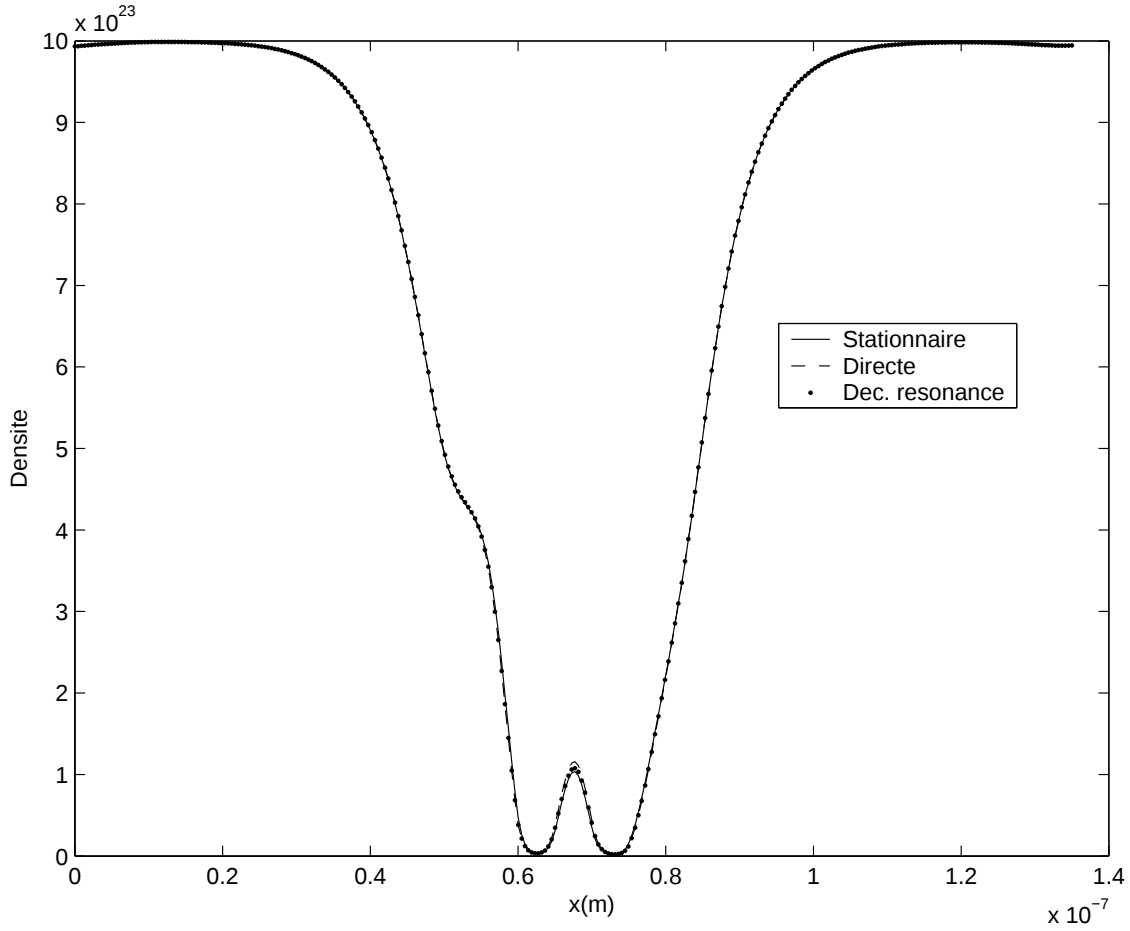


FIG. 2.26 – Test 1, densité instationnaire au temps $t = 10^{-11} s$ pour les méthodes "Directe" et "Déc. résonance" et densité stationnaire pour $B = B_f$.

passé par le processeur pour réaliser le calcul. La méthode "Déc. résonance" permet de gagner 54.49% en temps de calcul par rapport à la méthode "Directe".

Test 2 : "Shift C^1 ", $B_i = 0.1$ eV et $B_f = 0.2$ eV

Pour ce test, le nombre de points de discrétisation en espace est $J = 500$ et le nombre de points en fréquence est $P = 1500$ pour la méthode "Directe" et $P = 600$ pour la méthode "Dec. resonance". On utilise les conditions aux limites transparentes (2.55), (2.54) pour la résolution de l'équation de Schrödinger instationnaire.

Comme on l'a remarqué dans la section 2.2.3, le bias $B = 0.2$ eV est instable, c'est la raison pour laquelle on a besoin de prendre $J = 500$ points de discrétisation en espace, et de faire varier le potentiel V_e de façon régulière, pour obtenir les propriétés de convergence vers le stationnaire similaires au Test 1.

Sur le graphique de gauche de la Figure 2.27, nous avons représenté pour les deux méthodes l'évolution de la charge dans le puits, donnée par (2.67), en fonction du temps t . Sur le graphique de droite de la Figure 2.27, on a représenté l'évolution de l'erreur relative en norme L2 et en pourcent, donnée par (2.68), de la densité

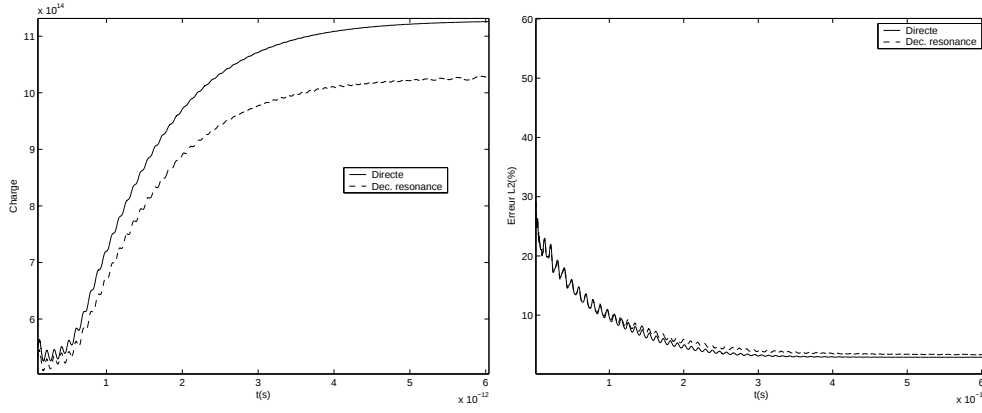


FIG. 2.27 – Test 2, évolution de la charge dans le puits (gauche) et de l'erreur L2 avec la solution stationnaire (droite) pour les algorithmes "Directe" et "Déc. résonance".

instationnaire $n(x, t)$ par rapport à la densité stationnaire pour $B = B_f$ en fonction du temps t . Comme pour le Test 1, on remarque que pour les deux méthodes la charge croît dans le puits et la densité converge vers la densité stationnaire.

Nous avons représenté sur la Figure 2.28 le logarithme $C(k)$ de la charge partielle dans le puits correspondant à la fréquence k , calculée avec la résolution "Directe" ainsi que les fréquences $k_R^-(t)$ et $k_R^+(t)$ définies par les équations (2.69) et (2.70), pour les instants $t = 10^{-12} s$, $t = 2 \times 10^{-12} s$, $t = 6 \times 10^{-12} s$ et $t = 9 \times 10^{-12} s$. Comme pour le Test 1, on remarque que pour les temps t petits devant $t_0 = 10^{-12} s$, la transmission n'est pas piquée autour de l'énergie résonante au temps t , elle est piquée autour de l'énergie résonante initiale $E_R(0)$. Pour les temps de l'ordre de t_0 elle est piquée autour de $E_R(t)$ et le pique initial s'éteint pour disparaître au delà de $10 \times t_0$.

L'énergie résonante $E_R(t)$ se déplace avec le bias $B(t)$, alors le pic de transmission autour de $E_R(t)$ apparaît proche du pic initial et s'en sépare. C'est un comportement différent de celui du Test 1 où le pic autour de $E_R(t)$ est, dès son apparition, éloigné du pic initial.

La comparaison des deux méthodes en terme de convergence et de coût de calcul est résumée dans le tableau ci-dessous :

	P	Erreur L2 (%)	CPU (s)
Direct	1500	2.9	282650.0
Déc. résonance	600	3.34	128634.53

Ici P désigne le nombre de points de discrétisation en fréquence, Erreur L2 désigne l'erreur (2.68) au temps final $t = 6 \times 10^{-12} s$ et CPU désigne le temps en secondes passé par le processeur pour réaliser le calcul.

Test 3 : "Shift brutal", $B_i = 0$ eV et $B_f = 0.1$ eV, décomposition sur le mode résonant initial et le mode résonant à l'instant t

Comme cela a été observé au Test 1, le pic initial autour de $E_R(0)$ et le pic autour de $E_R(t)$ jouent un rôle important dans le calcul de la densité. On en déduit la

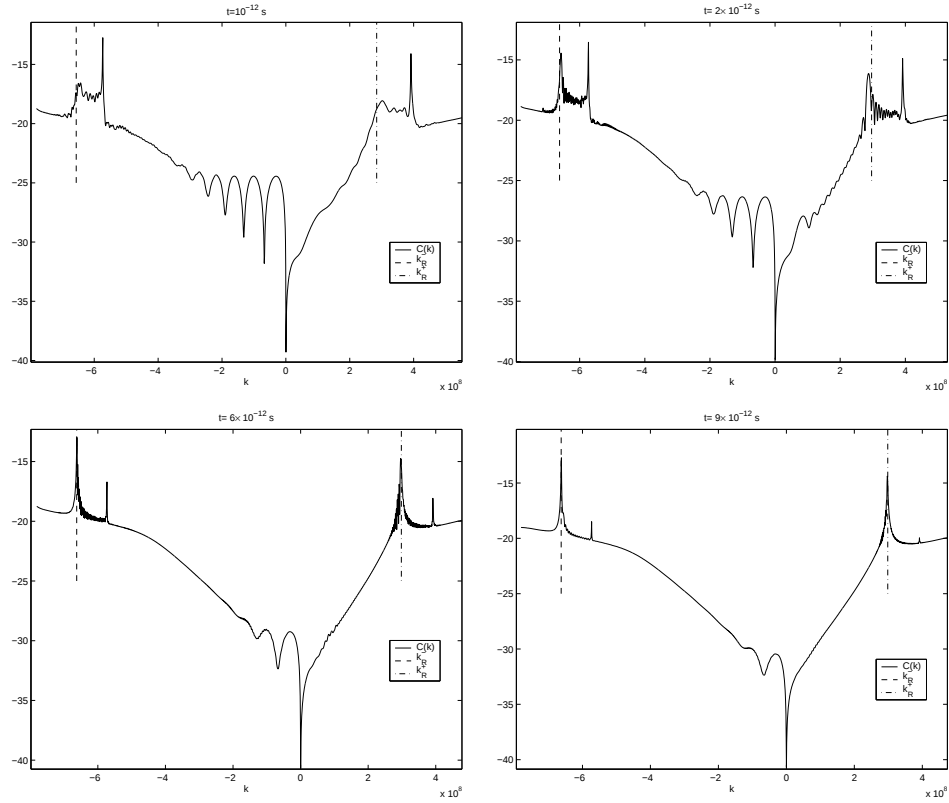


FIG. 2.28 – Test 2, représentation du logarithme $C(k)$ de la charge partielle dans le puits en fonction de la fréquence k , et des fréquences correspondant à l'énergie résonante, pour différents temps.

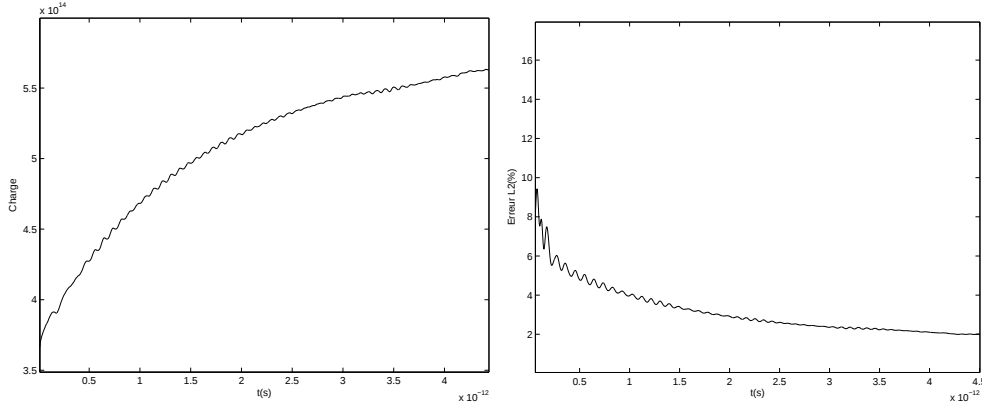


FIG. 2.29 – Test 3, évolution de la charge dans le puits (gauche) et de l'erreur L2 avec la solution stationnaire (droite).

décomposition suivante pour les fonctions d'onde :

$$\Psi_k(t) = \Psi_k^e(t) + \theta_k(0)\tilde{u}(t) + \lambda_k(t)u(t) \quad (2.71)$$

où $\Psi_k^e(t)$, $\theta_k(t)$ et $u(t)$ sont définis dans l'Algorithme 2.3.8. La fonction $\tilde{u}(t)$ est la solution de :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{u}(t) = H\tilde{u}(t) \\ \tilde{u}(0) = u(0) \end{cases}$$

et $\lambda_k(t)$ est choisi tel que $\Psi_k(t)$ vérifie l'équation de Schrödinger instationnaire :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \Psi_k(t) = H\Psi_k(t) \\ \Psi_k(0) = \Phi_k \end{cases}$$

où $\Phi_k = \Psi_k^e(0) + \theta_k(0)u(0)$. On obtient que $\lambda_k(t)$ vérifie la même équation différentielle (2.62) que $\theta_k(t)$ avec la condition initiale :

$$\lambda_k(0) = 0$$

Pour réaliser ce test, nous avons utilisé la décomposition (2.71) dans l'Algorithme 2.3.8. Le nombre de points de discrétisation en espace est $J = 300$ et le nombre de points en fréquence est $P = 600$. On utilise les conditions aux limites transparentes (2.52), (2.51) pour la résolution de l'équation de Schrödinger instationnaire.

Sur le graphique de gauche de la Figure 2.29, nous avons représenté, pour la méthode décrite ci-dessus, l'évolution de la charge dans le puits donnée par (2.67) en fonction du temps t . Sur le graphique de droite de la Figure 2.29, on a représenté l'évolution de l'erreur relative en norme L2 et en pourcent, donnée par (2.68), de la densité instationnaire $n(x, t)$ par rapport à la densité stationnaire pour $B = B_f$ en fonction du temps t . Comme pour le Test 1, on remarque que la charge croît dans le puits et la densité converge vers la densité stationnaire.

Sur le graphique de gauche de la Figure 2.30, nous avons représenté les logarithmes

$C(k)$, $C_1(k)$ et $C_2(k)$ des charges partielles dans le puits correspondant aux fonctions $\Psi_k(t)$, $u(t)$ et $\tilde{u}(t)$ définies par :

$$C(k) = \log \left(\int_{a_2}^{b_2} |\Psi_k(x, t)|^2 dx \right)$$

$$C_1(k) = \log \left(\int_{a_2}^{b_2} |\lambda_k(t)u(x, t)|^2 dx \right)$$

$$C_2(k) = \log \left(\int_{a_2}^{b_2} |\theta_k(0)\tilde{u}(x, t)|^2 dx \right)$$

à l'instant $t = 10^{-12}$ s. On remarque que la majeure partie du pic situé autour de $E_R(t)$ est donnée par $\lambda_k(t)u(t)$ et la majeure partie du pic situé autour de $E_R(0)$ est donnée par $\theta_k(0)\tilde{u}(t)$.

Sur le graphique de droite de la Figure 2.30, nous avons représenté l'évolution du carré de la norme L2 dans le puits de $\tilde{u}(t)$

$$N(t) = \int_{a_2}^{b_2} |\tilde{u}(x, t)|^2 dx$$

en fonction du temps t . On remarque que $\tilde{u}(t)$, le propagé du mode résonant initial, s'échappe en temps grand devant 10^{-15} s pour s'annuler dans le puits. C'est une propriété connue des modes résonants –ou quasi-états bornés– qui les distingue des états bornés. On a de plus la propriété :

$$|\tilde{u}(t)| \approx e^{-\frac{\Gamma(0^+)}{2\hbar}t} |u(0)|$$

où $\Gamma(0^+) := \Gamma|_{t=0^+}$, ce qui implique :

$$\frac{N(t_0 + T)}{N(t_0)} \approx e^{-\frac{\Gamma(0^+)}{\hbar}T}$$

On le vérifie numériquement ci-dessous. En effet, on a $\Gamma(0^+) = 5.68 \times 10^{-23}$ J et pour $t_0 = 10^{-12}$ s et $T = 2 \times 10^{-12}$ s, on vérifie :

$$\frac{N(t_0 + T)}{N(t_0)} = 0.33$$

et

$$e^{-\frac{\Gamma(0^+)}{\hbar}T} = 0.34$$

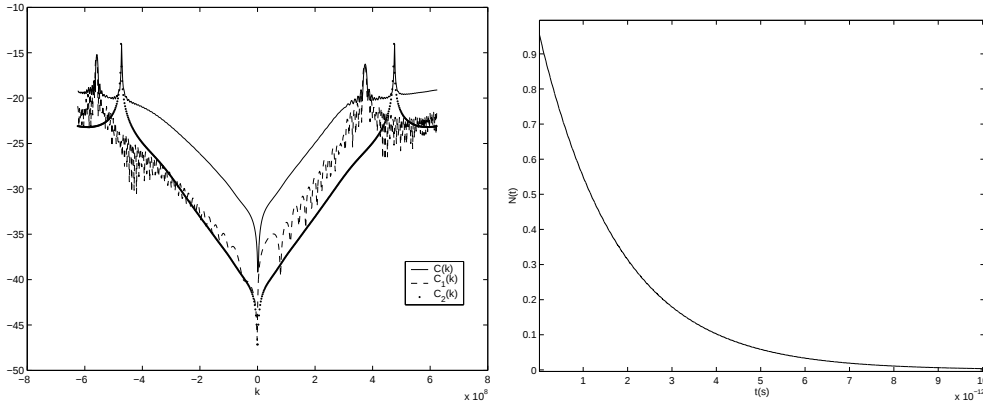


FIG. 2.30 – Test 3, représentation de $C(k)$, $C_1(k)$ et $C_2(k)$ en fonction de la fréquence k au temps $t = 10^{-12}$ s (gauche) et représentation du carré $N(t)$ de la norme L2 dans le puits de $\tilde{u}(t)$ en fonction du temps (droite).

Appendice 2.A : Quelques résultats sur les coefficients de transmission

Dans cette section, nous considérons les coefficients $T(k)$ définis pour $k \in \mathbb{R}$ par (2.9), (2.10). Nous donnons d'abord un résultat permettant de réaliser le maillage adaptatif pour le calcul de la densité en localisant la résonance en fréquence à l'aide de la variation des coefficients de transmission.

Proposition 2.3.12. *Les coefficients de transmissions vérifient :*

$$\forall k > 0, \quad \frac{d}{dk} \log T(k) = -\frac{1}{k} + \frac{k}{k^2 + 2mB/\hbar^2} + \frac{2}{|\Phi_k(L)|^2} \operatorname{Re} \left(\frac{d}{dk} \Phi_k(L) \overline{\Phi_k(L)} \right) \quad (2.72)$$

et

$$\forall k < 0, \quad \frac{d}{dk} \log T(k) = -\frac{1}{k} + \frac{k}{k^2 - 2mB/\hbar^2} + \frac{2}{|\Phi_k(0)|^2} \operatorname{Re} \left(\frac{d}{dk} \Phi_k(0) \overline{\Phi_k(0)} \right) \quad (2.73)$$

Preuve. On a :

$$\frac{d}{dk} \log T(k) = \frac{1}{T(k)} \frac{d}{dk} T(k)$$

Pour $k > 0$, on a :

$$\frac{d}{dk} T(k) = \left(\frac{d}{dk} \frac{\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}}{k} \right) |\Phi_k(L)|^2 + \frac{\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}}{k} \frac{d}{dk} |\Phi_k(L)|^2$$

Or :

$$\frac{d}{dk} \frac{\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}}{k} = \frac{1}{\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}} - \frac{\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}}{k^2}$$

et

$$\frac{d}{dk} |\Phi_k(L)|^2 = 2\operatorname{Re} \left(\frac{d}{dk} \Phi_k(L) \overline{\Phi_k(L)} \right)$$

On en déduit :

$$\frac{d}{dk} \log T(k) = -\frac{1}{k} + \frac{k}{k^2 + 2mB/\hbar^2} + \frac{2}{|\Phi_k(L)|^2} \operatorname{Re} \left(\frac{d}{dk} \Phi_k(L) \overline{\Phi_k(L)} \right)$$

En procédant de la même façon pour $k < 0$, on obtient :

$$\frac{d}{dk} \log T(k) = -\frac{1}{k} + \frac{k}{k^2 - 2mB/\hbar^2} + \frac{2}{|\Phi_k(0)|^2} \operatorname{Re} \left(\frac{d}{dk} \Phi_k(0) \overline{\Phi_k(0)} \right)$$

■

A présent, nous donnons un résultat permettant notamment d'obtenir la formule du courant 2.12 valable en régime stationnaire.

Proposition 2.3.13. 1. Soient $R(k)$ les coefficients de réflexion définis par :

$$R(k) = |1 - \Phi_k(0)|^2, \quad k > 0, \quad \text{et} \quad R(k) = |1 - \Phi_k(L)|^2, \quad k < 0,$$

alors on a la relation de conservation de l'énergie :

$$R(k) + T(k) = 1, \quad \forall k \in \mathbb{R}, \quad (2.74)$$

où T est le coefficient de transmission donné par (2.9), (2.10).

2. Soient $k_1 > 0$ et $k_2 < \frac{-\sqrt{2mB}}{\hbar^2} < 0$ tq :

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - B := E > 0, \quad (2.75)$$

alors $T(k_1) = T(k_2)$

Preuve.

1. Montrons la relation de conservation de l'énergie (2.74) pour $k > 0$ (elle est également vraie pour $k < 0$).

On considère $\Phi_k(x)$ solution de (2.1), alors, en multipliant l'équation de Schrödinger, apparaissant dans (2.1), par $\overline{\Phi_k(x)}$ et en intégrant sur $[0, L]$, on obtient :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \frac{d^2}{dx^2} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} dx + \int_0^L V(x) |\Phi_k(x)|^2 dx = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \int_0^L |\Phi_k(x)|^2 dx.$$

On en déduit :

$$\operatorname{Im} \left(\int_0^L \frac{d^2}{dx^2} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} dx \right) = 0.$$

Or par intégration par parties, on a :

$$\int_0^L \frac{d^2}{dx^2} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} dx = \left[\frac{d}{dx} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} \right]_0^L - \int_0^L \left| \frac{d}{dx} \Phi_k(x) \right|^2 dx$$

ce qui donne :

$$\operatorname{Im} \left[\frac{d}{dx} \Phi_k(x) \overline{\Phi_k(x)} \right]_0^L = 0.$$

En utilisant les conditions aux limites vérifiées par Φ , il vient :

$$\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2} |\Phi_k(L)|^2 + k(|\Phi_k(0)|^2 - 2\operatorname{Re}(\Phi_k(0))) = 0.$$

Or pour tout $z \in \mathbb{C}$, on a $|z - 1|^2 = |z|^2 - 2\operatorname{Re}(z) + 1$, et donc :

$$\sqrt{k^2 + 2mB/\hbar^2}/k |\Phi_k(L)|^2 + |\Phi_k(0) - 1|^2 = 1,$$

ce qui correspond à l'équation de conservation (2.74).

2. Notons $\Phi_1 = \Phi_{k_1}$, $\Phi_2 = \Phi_{k_2}$.

Puisque $k_1 > 0$, et en utilisant (2.75), Φ_1 est solution de :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_1(x) + V(x) \Phi_1(x) = E \Phi_1(x), & x \in (0, L), \\ \Phi_1'(0) + ik_1 \Phi_1(0) = 2ik_1, \\ \Phi_1'(L) + ik_2 \Phi_1(L) = 0. \end{cases} \quad (2.76)$$

De même, puisque $k_2 < 0$ et en utilisant (2.75), Φ_2 est solution de :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_2(x) + V(x) \Phi_2(x) = E \Phi_2(x), & x \in (0, L), \\ \Phi_2'(0) + ik_1 \Phi_2(0) = 0, \\ \Phi_2'(L) + ik_2 \Phi_2(L) = 2ik_2. \end{cases} \quad (2.77)$$

A cause de l'égalité (2.75), Φ_1 et Φ_2 vérifient la même équation sur $[0, L]$. En utilisant cette équation, on remarque que leur Wronskien est constant sur $[0, L]$. En effet :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} W(\Phi_1, \Phi_2) &= \frac{d}{dx} \begin{vmatrix} \Phi_1 & \Phi_2 \\ \Phi_1' & \Phi_2' \end{vmatrix} \\ &= \Phi_1'' \Phi_2 - \Phi_1 \Phi_2'' \\ &= E \Phi_1 \Phi_2 - E \Phi_1 \Phi_2 \\ &= 0 \end{aligned}$$

Ceci peut être généralisé de la façon suivante : le Wronskien de tout couple de solutions de la même équation différentielle homogène d'ordre 2, dont le coefficient devant la dérivée d'ordre 1 est nul, est constant.

On en déduit $W(\Phi_1, \Phi_2)(0) = W(\Phi_1, \Phi_2)(L)$ soit :

$$\Phi_1(0) \Phi_2'(0) - \Phi_1'(0) \Phi_2(0) = \Phi_1(L) \Phi_2'(L) - \Phi_1'(L) \Phi_2(L),$$

et en utilisant les conditions aux limites :

$$-ik_1 \Phi_1(0) \Phi_2(0) + ik_1 \Phi_1(0) \Phi_2(0) - 2ik_1 \Phi_2(0) = -ik_2 \Phi_1(L) \Phi_2(L) + 2ik_2 \Phi_1(L) + ik_2 \Phi_1(L) \Phi_2(L),$$

et donc

$$-k_1\Phi_2(0) = k_2\Phi_1(L).$$

On en déduit $|k_1|^2|\Phi_2(0)|^2 = |k_2|^2|\Phi_1(L)|^2$ et en divisant par $|k_1||k_2|$:

$$\frac{|k_1|}{|k_2|}|\Phi_2(0)|^2 = \frac{|k_2|}{|k_1|}|\Phi_1(L)|^2.$$

Or par définition $T(k_1) = -\frac{k_2}{k_1}|\Phi_1(L)|^2$ et $T(k_2) = \frac{k_1}{|k_2|}|\Phi_2(0)|^2$, on a donc bien le résultat :

$$T(k_1) = T(k_2).$$

■

Appendice 2.B : Calcul des résonances, valeurs des matrices éléments finis.

On rappelle que dans la section 2.2.1, les résonances sont obtenues à partir de la résolution du problème

$$M(z)u = 0$$

où

$$M(z) = [A + s(z)B + s(z + B)C - zD],$$

et les matrices A , B , C et D sont données par (2.28) et (2.29).

Les valeurs explicites des coefficients des matrices A et E sont obtenus à partir de (2.28) et (2.29) en utilisant les formules (2.25)-(2.27) des p_j et en intégrant. Pour la matrice A , il faut en plus remplacer le potentiel V par son interpolé $V = \sum_{j=0}^J V_j p_j$, où les V_j sont les valeurs nodales de V .

On obtient alors les matrices carrées de taille $J + 1$ suivantes :

$$A = \frac{h^2}{\Delta x} \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix} + \Delta x \begin{pmatrix} \xi_0 & \zeta_0 & & & \\ \zeta_0 & \xi_1 & \zeta_1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \zeta_{J-2} & \xi_{J-1} & \zeta_{J-1} \\ & & & \zeta_{J-1} & \xi_J \end{pmatrix}$$

et

$$E = \Delta x \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & & & \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ & & & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

où

$$\zeta_j = \frac{V_j + V_{j+1}}{12}, \quad j = 0, \dots, J-1,$$

et

$$\begin{aligned}\xi_0 &= \frac{V_0}{4} + \frac{V_1}{12} \\ \xi_j &= \frac{V_{j-1} + V_{j+1}}{12} + \frac{V_j}{2}, \quad j = 1, \dots, J-1 \\ \xi_J &= \frac{V_J}{4} + \frac{V_{J-1}}{12}.\end{aligned}$$

Appendice 2.C : Régularité des fonctions propres généralisées autour la fréquence nulle.

Dans cette section, on souhaite montrer le résultat (2.36). Nous le montrerons pour Φ_k et le résultat s'étendra à Φ_k^e en remplaçant V par $V_{fill} + V_{NL}$. Pour $k > 0$, les fonctions propres généralisées Φ_k solutions de (1.17)-(1.20) peuvent s'écrire à l'aide de la formule de Lippmann-Shwinger

$$\Phi_k = \Phi_{1,k} - R(E_k)V_1\Phi_{1,k}$$

où $R(z)$ est donnée par (1.28) et

$$\Phi_{1,k} := h^{1/2}e^{ikb_1}Uu_-$$

avec h , U et u_- données par (1.29) et (1.35). Par construction, $\Phi_{1,k}$ est une fonction propre généralisée de l'opérateur de référence H_1 défini par (1.24) et

$$H_1\Phi_{1,k} = E_k\Phi_{1,k}$$

On rappelle que V_1 est une perturbation L^∞ à support compact de H_1 telle que $H = H_1 + V_1$. On en déduit que $V_1\Phi_{1,k} \in L^2_{2s}(\mathbb{R})$, $\forall s > 1/2$. Alors, la fonction $k \rightarrow R(E_k)$ est définie à l'aide du prolongement donné dans le Corollaire 1.5.7. Il se trouve que ce prolongement définit une fonction analytique sur $(0, +\infty)$. D'autre part, on vérifie à partir de (1.35) que $\Phi_{1,k}$ est analytique pour $k > 0$. Si ce résultat était vrai pour $k = 0$, on aurait directement (2.36) et le travail serait terminé. En effet $\Phi_{k=0} = 0$ et donc, sous l'hypothèse d'analyticit , il existe α tq pour $k > 0$, on ait

$$\frac{\Phi_k}{k} \xrightarrow[k \rightarrow 0]{} \alpha$$

ce qui implique

$$|\Phi_k| \leq Ck$$

dans un voisinage de 0. Or ni la r gularit  de $R(E_k)$, ni celle de $\Phi_{1,k}$ n'est garantie en $k = 0$ vu que le point 0 est un point particulier pour la racine $\sqrt{z}$. Cependant, on a la proposition suivante :

Proposition 2.3.14. *On considère les fonctions propres généralisées Φ_k définies par (1.17)-(1.20). Alors :*

- sous l'hypothèse $B > 0$, il existe $C, k_0 > 0$ telles que

$$\|\Phi_k\|_{L^\infty(0,L)} \leq Ck, \quad \forall k \in (0, k_0] \quad (2.78)$$

- sous l'hypothèse

$$V \geq M, \quad p.p. (0, L) \quad (2.79)$$

où M est une constante strictement positive, il existe $\alpha \in C^1[0, L]$ telle que

$$\lim_{\substack{k \rightarrow 0 \\ k > 0}} \left\| \frac{\Phi_k}{k} - \alpha \right\|_{L^\infty(0,L)} = 0 \quad (2.80)$$

Nous noterons que le deuxième point de la proposition signifie que $k \mapsto \Phi_k$ admet une dérivée à droite en 0 en tant qu'application de $\mathcal{R}$ dans $L^\infty(0, L)$. Des estimations similaires à (2.78) sont également montrées dans [5] et [6].

Preuve. • Nous ferons intervenir les problèmes (2.3)-(2.5) introduits dans la section 2.1.3 et afin de simplifier les notations, nous poserons :

$$W(x) = \frac{2mL^2}{h^2} V(xL), \quad \beta = 2mBL^2/\hbar^2 \quad (2.81)$$

et

$$\check{f}(x) = f(1-x)$$

On considère $Y : (0, 1) \rightarrow \mathbb{C}^2$ la solution du problème (2.5) qui s'écrit à l'aide de (2.81) :

$$\begin{cases} Y'(x) = M(x)Y(x), & x \in (0, 1), \\ Y(0) = Y_0, \end{cases}$$

où

$$M(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \check{W}(x) - k^2 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad Y_0 = (1, -i\sqrt{k^2 + \beta})^T. \quad (2.82)$$

Alors, on a :

$$\|Y'(x)\|_2 \leq \|M(x)\|_2 \|Y(x)\|_2 \quad (2.83)$$

où

$$\|y\|_2 := \sqrt{|y_1|^2 + |y_2|^2} \quad \text{et} \quad \|M\|_2 = \sup_{y \neq 0} \frac{\|My\|_2}{\|y\|_2}$$

En utilisant les propriétés de la norme $\|\cdot\|_2$ des matrices réelles, voir [19], on a :

$$\|M(x)\|_2 = \max\{\lambda^{1/2}; \lambda \in \sigma(M(x)^T M(x))\} \leq 1 + |\check{W}(x) - k^2|$$

L'application du lemme de Grönwall à (2.83) donne donc $\forall k, x \in (0, 1)$:

$$\begin{aligned} \|Y(x)\|_2 &\leq e^{\int_0^x 1 + |\check{W}(t) - k^2| dt} \|Y(0)\|_2 \\ &\leq e^{1 + \|W\|_{L^\infty(0,1)} + k^2} \sqrt{1 + k^2 + \beta} \\ &\leq C \end{aligned} \quad (2.84)$$

où $C > 0$ est une constante indépendante de k et de x .

Comme nous l'avons remarqué dans la section 2.1.3, si l'on note $Y(x) = (v(x), v'(x))^T$, la fonction Φ_k est donnée par

$$\Phi_{\frac{k}{L}}(xL) = u(x) \quad (2.85)$$

où

$$u = \frac{\tilde{v}}{\gamma}k \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{-v'(1) + ikv(1)}{2i} \quad (2.86)$$

est la solution du problème (2.3) que l'on peut réécrire comme suit :

$$\begin{cases} -u'' + (W - k^2)u = 0, & (0, 1) \\ u'(0) + ik u(0) = 2ik \\ u'(1) - i\sqrt{k^2 + \beta}u(1) = 0 \end{cases}$$

En multipliant la première équation du système par $\bar{u}$ et en intégrant par partie, on obtient :

$$\int_0^1 |u'|^2 dx + \int_0^1 (W - k^2)|u|^2 dx - i\sqrt{k^2 + \beta}|u(1)|^2 - ik|u(0)|^2 + 2ik\bar{u}(0) = 0$$

où l'on a utilisé les conditions aux limites vérifiées par u . En prenant la partie imaginaire, on a :

$$\sqrt{k^2 + \beta}|u(1)|^2 + k|u(0)|^2 = 2k\operatorname{Re} u(0)$$

et donc

$$\sqrt{k^2 + \beta}|u(1)|^2 \leq 2k|u(0)|$$

En utilisant (2.86) et (2.84) : $\forall k \in (0, 1)$ on a

$$\begin{aligned} k^2 \sqrt{k^2 + \beta} \frac{|v(0)|^2}{|\gamma|^2} &\leq 2 \frac{k^2}{|\gamma|} |v(1)| \\ &\leq C \frac{k^2}{|\gamma|} \end{aligned}$$

où $C > 0$ est indépendante de k . Ensuite la condition initiale sur $Y(x)$ donnée dans l'équation (2.82) implique $v(0) = 1$ et il vient

$$|\gamma| \geq \frac{1}{C} \sqrt{k^2 + \beta} \geq \frac{1}{C} \sqrt{\beta} > 0 \quad (2.87)$$

En rassemblant (2.84) et (2.87), on obtient :

$$\|u\|_{L^\infty(0,1)} = \frac{\|v\|_{L^\infty(0,1)}}{|\gamma|} k \leq Ck, \quad \forall k \in (0, 1) \quad (2.88)$$

En vertu de (2.85), l'équation précédente donne le résultat (2.78).

• Pour montrer le deuxième point, nous ferons intervenir les formulations variationnelles pour obtenir des estimations à priori que donnerons la limite souhaitée.

Pour $k > 0$, en utilisant les notations du point précédent, la fonction

$$w := \frac{u}{k} \quad (2.89)$$

est la solution du problème

$$w \in C^1[0, 1] \quad \text{t.q.} \quad \begin{cases} -w'' + (W - k^2)w = 0, & \mathcal{D}'(0, 1) \\ w'(0) + ikw(0) = 2i \\ w'(1) - i\sqrt{k^2 + \beta}w(1) = 0 \end{cases} \quad (P_k)$$

et de la formulation variationnelle équivalente à (P_k) :

$$\begin{cases} w \in H^1(0, 1) \quad \text{t.q.} \quad \forall \varphi \in H^1(0, 1) \\ \int_0^1 w' \overline{\varphi'} dx + \int_0^1 (W - k^2)w \overline{\varphi} dx - i\sqrt{k^2 + \beta}(w \overline{\varphi})(1) - ik(w \overline{\varphi})(0) + 2i\overline{\varphi}(0) = 0 \end{cases} \quad (\tilde{P}_k)$$

Nous renvoyons à [14] pour la preuve de l'équivalence

$$(P_k) \Leftrightarrow (\tilde{P}_k). \quad (2.90)$$

Alors, on considère α la solution du problème $(\tilde{P}) := (\tilde{P}_{k=0})$ ci-dessous

$$\begin{cases} \alpha \in H^1(0, 1) \quad \text{t.q.} \quad \forall \varphi \in H^1(0, 1) \\ \int_0^1 \alpha' \overline{\varphi'} dx + \int_0^1 W \alpha \overline{\varphi} dx - i\sqrt{\beta}(\alpha \overline{\varphi})(1) + 2i\overline{\varphi}(0) = 0 \end{cases} \quad (\tilde{P})$$

A l'aide d'une équivalence similaire à (2.90) entre $(\tilde{P})$ et le problème distributionnel associé, on obtient

$$\alpha \in C^1[0, 1] \quad (2.91)$$

D'autre part, en faisant la différence entre la formulation variationnelle du problème $(\tilde{P}_k)$ et celle du problème $(\tilde{P})$, on a $\forall \varphi \in H^1(0, 1)$:

$$\int_0^1 (w - \alpha)' \overline{\varphi'} dx + \int_0^1 ((W - k^2)w - W\alpha) \overline{\varphi} dx - i(\sqrt{k^2 + \beta}w(1) - \sqrt{\beta}\alpha(1)) \overline{\varphi}(1) - ik(w \overline{\varphi})(0) = 0$$

Si l'on pose

$$h = w - \alpha \quad (2.92)$$

l'équation ci-dessus prise en $\varphi = h$ donne :

$$\begin{aligned} \int_0^1 |h'|^2 dx + \int_0^1 W|h|^2 dx - k^2 \int_0^1 w \overline{h} dx - i\sqrt{k^2 + \beta}|h(1)|^2 \\ - i(\sqrt{k^2 + \beta} - \sqrt{\beta})(\alpha \overline{h})(1) - ik(w \overline{h})(0) = 0 \end{aligned}$$

et en prenant la partie réelle :

$$\begin{aligned} \int_0^1 |h'|^2 dx + \int_0^1 W|h|^2 dx + \operatorname{Re} [-k^2 \int_0^1 w \overline{h} dx - i(\sqrt{k^2 + \beta} - \sqrt{\beta})(\alpha \overline{h})(1) \\ - ik(w \overline{h})(0)] = 0 \end{aligned} \quad (2.93)$$

On déduit de (2.88) et (2.91) que :

$$\|w\|_{L^\infty(0,1)}, \|\alpha\|_{L^\infty(0,1)} \leq C$$

et donc

$$\|h\|_{L^\infty(0,1)} \leq C$$

où $C > 0$ est indépendante de $k \in (0, 1)$. Ceci appliqué à l'équation (2.93) implique :

$$\begin{aligned} \int_0^1 |h'|^2 dx + \int_0^1 W|h|^2 dx &\leq k^2 \|w\|_{L^\infty(0,1)} \|h\|_{L^\infty(0,1)} + (\sqrt{k^2 + \beta} - \sqrt{\beta}) \|\alpha\|_{L^\infty(0,1)} \|h\|_{L^\infty(0,1)} \\ &\quad + k \|w\|_{L^\infty(0,1)} \|h\|_{L^\infty(0,1)} \\ &\leq C(k^2 + (\sqrt{k^2 + \beta} - \sqrt{\beta}) + k) = o(1) \end{aligned} \quad (2.94)$$

Maintenant, l'hypothèse (2.79) et l'injection continue

$$H^1(0, 1) \subset L^\infty(0, 1)$$

en dimension 1, permettent d'écrire :

$$\int_0^1 |h'|^2 dx + \int_0^1 W|h|^2 dx \geq \min\{1, M\} \|h\|_{H^1(0,1)}^2 \geq C \|h\|_{L^\infty(0,1)}^2 \quad (2.95)$$

où $C > 0$. On obtient le résultat (2.80) en combinant (2.94) et (2.95) et en tenant compte du changement de variable (2.85)(2.89)(2.92). ■

Bibliographie

- [1] S. Agmon, Spectral properties of Schrodinger operators and scattering theory, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa, ser. IV, 2 (1975), 151–218.
- [2] J. Aguilar, J.M. Combes, A Class of Analytic Perturbations for One-body Schrödinger Hamiltonians, Commun. Math. Phys. 22 (1971), 269–279.
- [3] E. Amart-Servat, Solutions asymptotiques et résonances pour l’opérateur de Klein-Gordon et de Schrödinger, Thèse de doctorat, Université de Paris XIII, 2002.
- [4] A. Arnold, M. Ehrhardt, Discrete Transparent Boundary Conditions for the Schrödinger Equation, Revista di Matematica della Università di Parma, 6/4 (2001), 57–108.
- [5] N. Ben Abdallah, A Hybrid Kinetic-quantum model for stationary electron transport, J. Stat. Phys., vol. 90, n 3-4 (1998), 627–662.
- [6] N. Ben Abdallah, P. Degond, P.A. Markowich, On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model, Z. Angew. Math. Phys., 48 (1997), 135–155.
- [7] N. Ben Abdallah, R. El Hajj, High Density Limit of the stationary one dimensional Schrödinger-Poisson system, SIAM-Multiscale Model. Simul., Vol. 7, N 1 (2008), 124–148.
- [8] N. Ben Abdallah, O. Pinaud, A mathematical model for the transient evolution of a resonant tunneling diode, C.R.A.S. Paris, Ser. I 334 (2002), 283–288.
- [9] N. Ben Abdallah, O. Pinaud, Multiscale simulation of transport in an open quantum system : Resonances and WKB interpolation, J. Comp. Phys. 213 (2006), 288–310.
- [10] N. Ben Abdallah, G. Quinio, F. Mehats, Global existence of classical solutions for a Vlasov-Schrödinger-Poisson system, Indiana Univ. Math. J. 55 (2006), no. 4, 1423–1448.
- [11] D. Bindel, M. Zworski, Theory and Computation of Resonances in 1D Scattering.
<http://www.cims.nyu.edu/~dbindel/resonant1d/>
- [12] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, Y. Patel, Computing the steady states for an asymptotic model of quantum transport in resonant heterostructures, J. Comp. Phys. 219 (2006), 644–670.

- [13] L.L. Chang, L. Esaki, R. Tsu, Resonant tunneling in semi-conductors double barriers, *Appl. Phys. Lett.* 24, 1974.
- [14] R. Dautray, J.L. Lions, *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques*, I-IX, Masson, Paris, 1985.
- [15] M. Dimassi, J. Sjöstrand, *Spectral Asymptotics in the semi-classical limit*, Cambridge University Press, 1999.
- [16] N. Dunford, J.T. Schwartz, *Linear Operators*, I-III, Wiley-Interscience Publication, 1964.
- [17] W.R. Frensley, Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium, *Rev. Mod. Phys.* 62 (1990), 745–791.
- [18] S. Fujiié, T. Ramond, Matrice de scattering et résonances associées à une orbite hétérocline, *Annales de l’institut Henri Poincaré (A) Physique théorique*, 69 no. 1 (1998), 31–82.
- [19] G. Golub, C. Van-Loan, *Matrix Computation*, Johns Hopkins University Press, 1983.
- [20] P. Guillaume, Nonlinear eigenproblems, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol 20, No. 3 (1999), 575–595.
- [21] H.K. Gummel, Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculation, *IEEE Trans. Electron Devices* ED-11, 455, 1974.
- [22] G. Hachem, Sur les fréquences de diffusion (matrice) d’un corps élastique couplé avec l’air, *Ann. Fa . Sci. Toulouse* Tome 2, no. 3-4 (1980), 193–218.
- [23] B. Helffer, J. Sjostrand, Résonances en limite semi-classique, *Mém. Soc. Math. France (N.S.)*, 24-25 (1986).
- [24] P.D. Hislop, Resonances of Schrödinger Operators with compactly supported potentials, Communication au colloque du GDR EDP, 03/06/2008, Evian.
- [25] P.D. Hislop, I.M. Sigal, *Introduction to Spectral Theory with Applications to Schrödinger Operators*, Springer, 1991.
- [26] E. Kapon, *Semiconductor laser I, fundamentals*, Academic Press, 1998.
- [27] M.V. Karasev, V.P. Maslov, quasiclassical soliton solutions of the Hartree equation, *Theoret. and Math. Phys.*, 40 (1979), 715–721.
- [28] J.V. Lill, G.A. Parker, J.C. Light, *Chem. Phys. Lett.* 89, 483 (1982) ; *J. Chem. Phys.* 85, 900 (1986).
- [29] P.L. Lions, T. Paul, Sur les mesures de Wigner, *Rev. Mat. Iberoamer.* 9, 1993.
- [30] André Martinez, *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis*, Springer-Verlag, 2002.
- [31] B. Mayfield, Non local boundary conditions for the Schrödinger equation, Ph.D thesis, University of Rhode Island, providens, RI, 1989.
- [32] A. Messiah, *Mécanique quantique*, Tome 1 et 2. Dunod, Paris, 1965.
- [33] F. Nier, The Dynamics of some Quantum Open Systems with Short-Range Nonlinearities, *Nonlinearity* (1998), 11 :1127–1172.

- [34] F. Nier, Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$: the whole-space case, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A 123, 6 (1993), 1179–1201.
- [35] R.G. Newton, Scattering Theory of Waves and Particles, Springer-Verlag, 1982.
- [36] Y. Patel, Développement de modèles macroscopiques pour des systèmes quantiques hors équilibre, Thèse de doctorat, Université de Rennes I, 2005.
- [37] G. Peters, G. H. Wilkinson, Inverse Iteration, Ill-Conditioned Equations and Newton's Method, SIAM REVIEW, Vol. 21, No. 3 (1979), 339–360.
- [38] O. Pinaud, Transient simulations of a resonant tunneling diode, J. App. Phys. 92,4 (2002).
- [39] C. Presilla, J. Sjöstrand, Transport properties in resonant tunneling heterostructures, J. Math. Phys. 37 (10), October 1996.
- [40] M. Reed, B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics, I-IV, Academic Press, 1980.
- [41] L. Sainsaulieu, Calcul scientifique, Masson, 1996.
- [42] J. Sauloy, Equations fonctionnelles analytiques dans le champ complexe, Polycopié de cours, DEA, Université Paul Sabatier.
- [43] M.A. Shubin, Pseudodifferential operators and spectral theory, Springer, Berlin, 1987.
- [44] I.V. Simenog, Asymptotic solution of stationary nonlinear Hartree equation, Teo. Mat. Fiz., Vol. 30, No. 3 (1976), 408–414.
- [45] J. Sjöstrand, Lectures on resonances, Polycopié de cours, 2002.
- [46] S.H. Tang, M. Zworski, Potential scattering on the real line, Preprint 2006.
- [47] M. Zworski, Resonances in Physics and Geometry, Notices of the AMS, Vol. 14 no. 3 (1999), 319–328.
- [48] M. Zworski, Quantum resonances and partial differential equations, ICM 2002, Vol. III, 1-3.
- [49] http://www.st-andrews.ac.uk/~www_pa/Scots_Guide/RadCom/part5/page1.html

Chapitre 3

Simulation of resonant tunneling heterostructures : numerical comparison of a complete Schrödinger-Poisson system and a reduced nonlinear model

The work presented here was done in common with

Virginie Bonnaillie-Noël ¹, Francis Nier ²

and was submitted in Journal of Computational Electronics.

Abstract : Two different models are compared for the simulation of the transverse electronic transport through an heterostructure : a $1D$ self-consistent Schrödinger-Poisson model with a numerically heavy treatment of resonant states and a reduced model derived from an accurate asymptotic nonlinear analysis. After checking the agreement at the qualitative and quantitative level on quite well understood bifurcation diagrams, the reduced model is used to tune double well configurations for which nonlinearly interacting resonant states actually occur in the complete self-consistent model.

Keywords : Quantum transport, self-consistent models, resonances

¹IRMAR, UMR CNRS 6625, ENS Cachan Bretagne, av Robert Schuman, F-35170 Bruz, FRANCE.

²IRMAR, UMR CNRS 6625, Université de Rennes I, F-35042 Rennes Cedex, FRANCE

3.1 Introduction

The modelling of the electronic transport in quantum electronic devices is well described within a Landauer-Büttiker approach (see [La][BILP][CV][Fr][BAM][BA][Ni3]). A well-known difficulty for the numerical simulations comes from quantum resonances because they produce very stiff variations of the spectral quantities with respect to the energy variable : this increases dramatically the numerical complexity or requires some specific treatment. This point becomes an issue when the numerical simulation is motivated by a self-consistent nonlinear problem which takes into account in a mean field approach the electronic repulsion (see [BAP][LKF][Pi1]). Such a nonlinear system is often referred to as a Schrödinger-Poisson system. Meanwhile in the one-dimensional setting the scattering states are simply described in the active region by using energy-dependent transparent boundary conditions for the Schrödinger equation. After an accurate asymptotic analysis of the nonlinear spectral problem presented in [NP][BNP1][BNP2], an asymptotic reduced model has been derived by considering the regime of a finite number of resonant states produced by quantum wells in a semiclassical island. The reduced model summarizes how a finite number of resonant states as well as the phase-space geometry of the tunnel effect governs the nonlinearity and may produce several nonlinear solutions like in [JLP]. After introducing carefully the scaling and checking the relevancy of the approximations, realistic cases similar to the one studied in [Pi1] for GaAs devices and [LKF] for Si-SiO₂ devices have been numerically tested in [BNP]. The agreement with the simulations of [Pi1][LKF] were satisfactory although the configurations in [BNP] were not exactly the same (for example, the nonlinear effect outside the barriers were not taken into account although they are known to produce sometimes non negligible effects, see for example [MLV]). Furthermore the rapidity of the computations and the exhaustive description of nonlinear solutions with the finite dimensional reduced model made possible the exploration of some exotic nonlinear solutions with nonlinearly interacting resonant states. The purpose of the present article is twofold

1. Check by taking exactly the same data for both models that the reduced model and the complete Schrödinger-Poisson model agree very well at the qualitative and quantitative level.
2. Check that the exotic nonlinear solutions found in the double well problem make sense within the Schrödinger-Poisson problem and lead to interesting physical phenomena like a damped beating effect stable for an extended range of applied bias.

Although a rescaling leading to dimensionless quantities allows to consider equally Ga-As or Si-SiO₂ devices (see [BNP]) only Ga-As have been considered here.

3.2 The model

Initial writing.

The mass m that we use is the effective electronic mass $m = m_3$ in the transverse

direction $\underline{x} = \underline{x}_3$. The quantum hamiltonian for a single electron has the form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\underline{x}^2} + \underline{\mathcal{V}}(\underline{x}), \quad \underline{\mathcal{V}} = \underline{\mathcal{B}} + \underline{\mathcal{V}}_0 + \underline{V}_{NL}, \quad (3.1)$$

with a nonlinear potential $\underline{V}_{NL}$ which is non negative and takes into account the mean repulsive electrostatic potential in the area $a \leq \underline{x} \leq b$. The nonlinear effects are not taken into account outside the heterostructure (quasineutral approximation). The total potential denoted by $\underline{\mathcal{V}}$ also includes the piecewise affine function $\underline{\mathcal{B}}$ referring to the bias voltage $-\underline{B}$,

$$\underline{\mathcal{B}}(\underline{x}) = -\underline{B} \left[\frac{\underline{x} - a}{b - a} 1_{[a,b]}(\underline{x}) + 1_{[b,+\infty)}(\underline{x}) \right].$$

It is also made of the second term $\underline{\mathcal{V}}_0$ which describes the barriers and the wells,

$$\underline{\mathcal{V}}_0(\underline{x}) = \underline{V}_0 1_{[a,b]}(\underline{x}) + \sum_{j=1}^N \underline{W}_j(\underline{x}),$$

with the constant $\underline{V}_0 > 0$ and the compactly supported potentials $\underline{W}_j \in L^\infty(\mathbb{R})$, $-\underline{V}_0 \leq \underline{W}_j \leq 0$, fixed. The external potential $\underline{\mathcal{B}} + \underline{\mathcal{V}}_0$ is represented in Figure 3.1. The beam of electrons injected from both sides is described by a function $\underline{f}$ of the

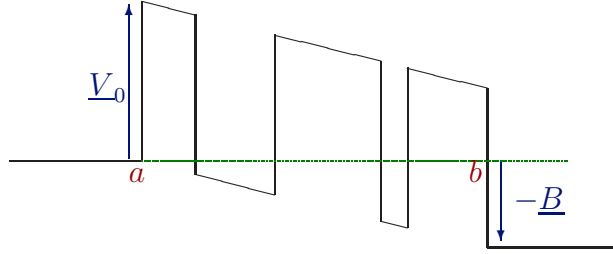


FIG. 3.1 – Linear potential in the heterostructure.

momentum variable $k \geq 0$

$$\underline{f}(\underline{k}) = \underline{g}_+(k^2) 1_{\mathbb{R}_+}(\underline{k}) + \underline{g}_-(k^2 - B) 1_{\mathbb{R}_-}(\underline{k}). \quad (3.2)$$

Up to the reference energy (0 or $-\underline{B}$), the injection profile is the same for both sides

$$\underline{g}_+(E) = \underline{g}_0(E) \quad \text{and} \quad \underline{g}_-(E) = \underline{g}_0(E + B),$$

where $\underline{g}_0$ is the Fermi-Dirac distribution function integrated along the two directions $(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$

$$\underline{g}_0(\underline{k}^2) = \frac{\sqrt{m_1 m_2} k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m}}{k_B T} \right) \right), \quad (3.3)$$

with the Fermi level

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2} (3\pi^2 n_D)^{2/3} (m_1 m_2 m_3)^{-1/3}.$$

The introduction of a non isotropic effective electronic mass (m_1, m_2, m_3) with this simplified relation between donor density n_D and E_F allows to adapt this model and the numerical simulations to Si-SiO₂ heterostructures like in [LKF].

The out-of-equilibrium regime for Schrödinger-Poisson system requires the introduction of the generalized eigenfunctions in order to describe the steady state density. The incoming generalized eigenfunctions $\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})$ are defined for $\underline{k} > 0$ by

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\underline{x}^2} \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) + \underline{\mathcal{V}} \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) &= \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) \quad \text{for } \underline{x} \in \mathbb{R}, \\ \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) &= e^{i\underline{k}\underline{x}} + R(\underline{k}) e^{-i\underline{k}\underline{x}} \quad \text{for } \underline{x} \leq a, \\ \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) &= T(\underline{k}) e^{i\sqrt{\underline{k}^2 + \underline{B}} \underline{x}} \quad \text{for } \underline{x} \geq b, \end{aligned}$$

with a similar formulation for $\underline{k} < 0$ (exchange $x \leq a$ and $x \geq b$, replace $\underline{k}$ by a well chosen square root of $\underline{k}^2 - \underline{B}$, see [BNP] for details). The electronic density $\underline{n}$ is given by

$$\begin{aligned} \underline{n}(\underline{x}) &= \int_0^{+\infty} \underline{g}(\underline{k}^2) |\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})|^2 \frac{d\underline{k}}{2\pi} \\ &\quad + \int_{-\infty}^0 \underline{g}(\underline{k}^2 - \underline{B}) |\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})|^2 \frac{d\underline{k}}{2\pi}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Finally the nonlinear potential $\underline{V}_{NL}$ solves the Poisson equation

$$\begin{cases} -\Delta \underline{V}_{NL} = \frac{q^2}{\epsilon} \underline{n}, \\ \underline{V}_{NL}(a) = \underline{V}_{NL}(b) = 0. \end{cases} \quad (3.5)$$

The average current density (independent of $\underline{x}$ in the steady state) is computed according to the steady state formula

$$\underline{J} = \frac{e\hbar}{m} \int_{\mathbb{R}} \frac{\underline{f}(\underline{k})}{b-a} \int_a^b \Im \nabla \underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x}) \overline{\underline{\psi}_-(\underline{k}, \underline{x})} d\underline{x} \frac{d\underline{k}}{2\pi}, \quad (3.6)$$

with $\underline{f}$ defined in (3.2).

Rescaling.

For a more flexible numerical treatment which can be adapted to several kinds of semiconductors, and also in order to carry out the asymptotic analysis which has led to the reduced model, the Schrödinger-Poisson system is better written with dimensionless quantities and unknowns. The rescaled position variable $x = (\underline{x} - a)/L$, $L = b - a$, now lies in $[0, 1]$ and the rescaled energies are given by

$E = \underline{E}/E_F$, $V = \underline{V}/E_F$. The nonlinear system with unknown V_{NL}^h can be written

$$\left\{ \begin{array}{l} -h^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi_-^h(k, x) + \mathcal{V}^h \psi_-^h(k, x) = k^2 \psi_-^h(k, x), \\ \quad + \text{transparent boundary conditions at } x = 0 \text{ or } 1, \\ \mathcal{V}^h(x) = \mathcal{B}(x) + \mathcal{V}_0^h(x) + V_{NL}^h(x), \\ \mathcal{V}_0^h(x) = V_0 1_{[0,1]}(x) - \sum_{j=1}^N W_j\left(\frac{x-c_j}{h}\right), \\ g_0(k^2) = \beta^{-1} \ln(1 + \exp(\beta(1 - k^2))), \\ g_+(E) = g_0(E) \quad \text{and} \quad g_-(E) = g_0(E + B), \\ n(x) = \int_0^{+\infty} g_+(k^2) |\psi_-^h(k, x)|^2 \frac{dk}{2\pi h} \\ \quad + \int_{-\infty}^0 g_-(k^2 - B) |\psi_-^h(k, x)|^2 \frac{dk}{2\pi h}, \\ -\Delta V_{NL}^h = \gamma n, \quad \text{with} \quad V_{NL}^h(0) = V_{NL}^h(1) = 0. \end{array} \right. \quad (3.7)$$

The parameters equal

$$k = \frac{\underline{k}\hbar}{\sqrt{2mE_F}}, \quad h = \frac{\hbar}{L\sqrt{2mE_F}}, \quad \beta = \frac{E_F}{k_B T} \quad \text{and} \quad \gamma = \frac{4L}{a_B},$$

where the Bohr radius is defined as usual $a_B = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon}{\sqrt{m_1 m_2} q^2}$.

3.3 Theory and applications

The reduced model is obtained after taking the limit $h \rightarrow 0$ in the system (3.7). This analysis has been carried out completely in the series of articles [BNP1][BNP2][NP]. In the end the reduced model consists in solving some simple collection of finite dimensional (the dimension equals the number N of wells) nonlinear systems with constraints. In order to write them, some notations are necessary. We simply give a brief review of the theoretical results and their application. The adaptation of this system in realistic situations when $h > 0$ is 0.1 or 0.3 has been explained with details in [BNP].

Notations.

- For a given limit $V = \lim_{h \rightarrow 0} V_{NL}^h$, the potential $\tilde{\mathcal{V}}$ is the corresponding filled (i.e. where the wells W_j have been removed) potential

$$\tilde{\mathcal{V}}(x) = \mathcal{B}(x) + V_0 1_{[0,1]}(x) + V(x).$$

- For any $j = 1, \dots, N$, $(-\varepsilon_j^k)_{1 \leq k \leq K_j < +\infty}$ denotes the finite collection of negative eigenvalues for the Schrödinger operator $H_j := -d^2/dx^2 + W_j(x)$, labelled in the increasing order. The set of energies $\mathcal{E}_j$ is defined by

$$\mathcal{E}_j = \left\{ \tilde{\mathcal{V}}(c_j) - \varepsilon_j^k, \quad 1 \leq k \leq K_j \right\}. \quad (3.8)$$

- The set of resonant energies is defined as $\mathcal{E} = \cup_{j=1}^N \mathcal{E}_j$.
- For any $E \in \mathbb{R}$, we set

$$J^E := \{j \in \{1, \dots, N\} \text{ s. t. } E \in \mathcal{E}_j\}.$$

When $j \in J^E$, the well c_j is called resonant at the energy E .

- Finally, we set

$$c_\ell^E := \min_{j \in J^E} c_j, \quad c_r^E := \max_{j \in J^E} c_j,$$

and simply

$$c^E \quad \text{when} \quad c_\ell^E = c_r^E.$$

- For a potential Φ , the action (or Agmon distance) is given by

$$d_{Ag}(x, y; \Phi) = \left| \int_x^y \sqrt{\max\{\Phi(t), 0\}} dt \right|.$$

For a resonant energy $E \in \mathcal{E}$, we set

$$\begin{aligned} \delta_\ell^E &:= d_{Ag}(c_r^E, 1; \tilde{\mathcal{V}} - E) - d_{Ag}(0, c_r^E; \tilde{\mathcal{V}} - E), \\ \delta_r^E &:= d_{Ag}(0, c_\ell^E; \tilde{\mathcal{V}} - E) - d_{Ag}(c_\ell^E, 1; \tilde{\mathcal{V}} - E). \end{aligned}$$

Asymptotic system.

The reduced model written for all the possible limits V of V_{NL}^h as $h \rightarrow 0$ is written as a simple Poisson equation

$$\begin{cases} -\Delta V = \sum_{E \in \mathcal{E}} \sum_{j \in J^E} (t_j^E (g_+(E) - g_-(E)) + g_-(E)) \delta_{c_j}, \\ V(0) = V(1) = 0, \end{cases} \quad (3.9)$$

with the convention that $(g_+ - g_-)(0)$ can be any value in $[0, (g_+ - g_-)(0^+)]$ and where the coefficients t_j^E belong to $[0, 1]$ and satisfy :

- $t_j^E = 0$ when $E < 0$,
- and for $E > 0$,

$$\begin{cases} \delta_\ell^E > 0 \Rightarrow t_j^E = 1, \quad \forall j \in J^E, \\ \delta_r^E > 0 \Rightarrow t_j^E = 0, \quad \forall j \in J^E. \end{cases} \quad (3.10)$$

The above system (3.9) is actually a finite dimensional system since the charges are asymptotically concentrated like delta-functions and the potential V is a piecewise affine function. This asymptotic system restates the paradigm about resonant heterostructures which says that the nonlinear effects are governed by a finite number of resonant states. The quantum mechanics is contained in the finite set of resonant energies and also in the coefficients t_j which encodes the comparison of the tunnel effects between the left- and right-hand sides. Consider the single well case for example : the coefficient t_1 vanishes when the tunnel effect at the resonant energie is easier on the left-hand side than on the right-hand side, equals 1 in the opposite case, and can take an arbitrary value when the two tunnel effects have a comparable intensity. The general rule (3.10) given above is just an example of a possible comparison. Things can be specified and are a bit more complicated when the interaction

of resonances is made possible in the multiple well problem. On the basis of the theoretical analysis carried out in [BNP1][BNP2], a complete classification has been proposed in [BNP] for the double well problem. Finally note that the coefficients t_j and the value $(g_+ - g_-)(0)$ can be viewed as Lagrange parameters which takes arbitrary value when some constraint about the Agmon distances or the energies is saturated. Hence the finite dimensional problem can be easily solved numerically in order to get all the possible asymptotic solutions to the nonlinear problem.

Adaptation.

The theoretical asymptotic analysis suggests that in the limit $h \rightarrow 0$ the quantum wells and the charges are concentrated at some points c_i , $i = 1, \dots, N$. In realistic cases, the rescaling of the equations leads to value of h of order 10^{-1} , which is small but not very small. The asymptotic picture has to be adapted in order to make the most suitable approximation for the different quantities : Concentrated charges is a reasonable approximation when the nonlinearity is not very strong and if c_i is well chosen, but the comparison of the tunnel effect has to be done with the exact sizes of the potential barriers :

- The resonances have imaginary parts (or resonances width) of order $e^{-C/h}$ and give rise to very stiff variations of spectral quantities even when $h > 0$ is not very small. This part of the asymptotic model (i.e. the sum over the set J^E) is kept.
- When the nonlinearity is not very strong in comparison with the potential barrier (that is $V_0 = \underline{V}_0/E_F \gg 1$), a good average position of the charge can be determined via an interpolation method based on the Feynmann-Hellman relation.
- The evaluation of the tunnel effects in the phase-space involves the comparison of quantities looking like $e^{-A_1(h)/h}$ and $e^{-A_2(h)/h}$. In order to make an accurate comparison of two such quantities, the factors $A_1(h)$ and $A_2(h)$ have to be computed accurately. In this case the exact geometry of the potential barriers is taken into account, that is they are computed with the exact numerical value of h .

Details of these modifications of the asymptotic model have been explained with details in [BNP] while checking at every step the relevancy of the approximations.

3.4 Steady states computations

In [BNP], a rather good numerical agreement with other simulations for Ga-As in [Pi1] and for Si-SiO₂ in [LKF] heterostructures was observed. The reduced model, after adaptation, allowed to understand clearly how the numerical data influence the bifurcation diagrams of nonlinear steady states when the applied bias varies. For example the hysteresis phenomenon appears clearly in a double barrier structure (one well) when the right-hand side barrier is larger than the first one and not in the opposite case. Contrary to the general numerical tests, the case when the two

barriers have the same size has to be avoided since the tunnel effects on both sides are comparable, with fluctuations due to the nonlinearity and the applied bias which cannot be easily determined a priori. In the double well problem (three barriers) a possible nonlinear interaction of two resonant states, giving rise to a new branch of nonlinear steady states, was detected with the reduced model although no such case had been presented before.

The comparison with the numerical solution of the initial Schrödinger-Poisson system has two aims : 1) Verify accurately the numerical agreement between the adapted reduced model and the Schrödinger-Poisson system roughly observed in [BNP] when the modelling and the numerical data are exactly the same (for example the nonlinear effects outside the heterostructure are not taken into account in the present version of the reduced model contrary to the results in [Pi1] and [LKF]) ; 2) Check that the bifurcation diagrams observed in the reduced model, with a great sensitivity to numerical data, can really be produced with the far from equilibrium Schrödinger-Poisson system.

The reduced resolution is compared with the direct resolution presented in [Pi1]. The direct resolution, considered as the reference, is performed as follows. The nonlinear system (3.7) is solved by using a Gummel iteration, proposed in [21], which corresponds to finding the solution V_{NL}^{new} of the equation

$$-\frac{d^2}{dx^2}V_{NL}^{new} = \gamma n^{old} \exp(V_{NL}^{old} - V_{NL}^{new}),$$

for a given iterate V_{NL}^{old} . The density n^{old} is computed from the potential V_{NL}^{old} by solving a large enough number of Schrödinger equations, appearing in (3.7), in order to make an accurate numerical integration with respect to the k variable in the computation of the particle density. The number of Schrödinger equations and the accuracy of the density are improved by refining the mesh of integration around the resonant energies. The convergence of the algorithm depends strongly on the initial guess, especially when several nonlinear solutions are possible. In particular, the hysteresis phenomenon can be observed numerically. Solving the system (3.7) by increasing and then decreasing the applied bias does not provide the same branch of solution after initializing the Gummel algorithm within a continuation method. Except with the extreme values of B , the numerical solution after convergence for the previous value of the bias is used as an initial guess for the Gummel algorithm. For the extreme values of B , the nonlinear potential is initialized to the null potential. Compared with this, the numerical resolution of the reduced model provides at once all the possible nonlinear solutions for a given bias and all the possible branches of the bifurcation diagram when the bias varies.

Double barrier Ga-As heterostructure.

In [Pi1], Pinaud did not observe the hysteresis phenomenon because he took a symmetric double barrier. A simple change of the size of the barriers leads to multiple nonlinear solutions to the reduced model for a fixed bias, interpreted as an hysteresis

case with respect to the variation of the bias. Let us recall some physical parameters :

Rel. el. mass	0.067	Rel. permittivity	11.4
Temperature	300 K	Height of barriers	0.3 eV
Donor density	$10^{24} m^{-3}$	Fermi level E_F	0.054 eV

The numerical computations are carried out for 200 values of the applied bias $\underline{B}$ between 0 eV and 0.25 eV and the small parameter takes here the value

$$h = 0.22,$$

when the geometry of the potential is given by

$$\begin{array}{ll} \text{Size of barriers} & 3 \times 10^{-9}, 6 \times 10^{-9} m \\ \text{Size of well} & 6 \times 10^{-9} m. \end{array}$$

Figure 3.2 gives the comparison of the I-V curves.

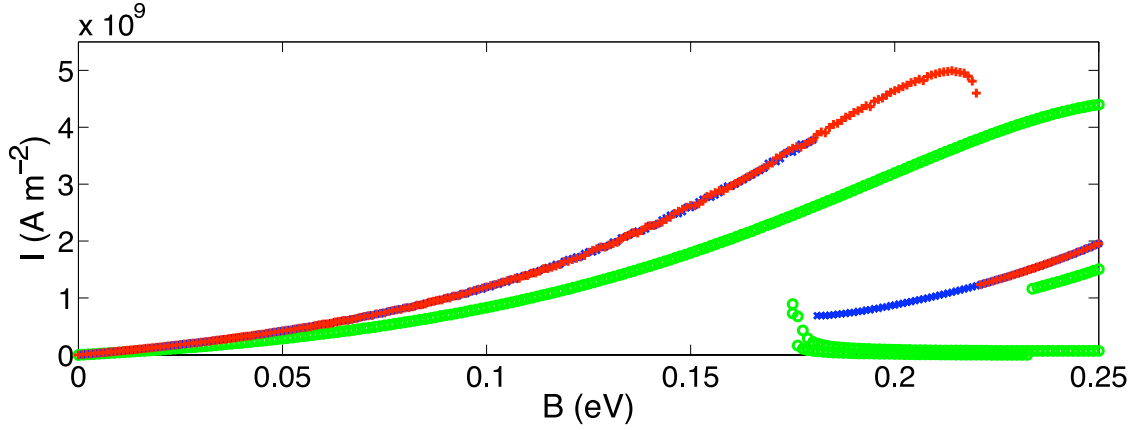


FIG. 3.2 – Comparison of I-V curves for the two models.

Two methods for solving the complete Schrödinger-Poisson system have been tested : 1) a continuation method by increasing or decreasing the applied bias ; 2) for any fixed bias, initiate the Gummel algorithm by the series of all possible nonlinear potentials solving the reduced model. Both methods gave the same result. It is interesting to note that the hysteresis effect detected via the asymptotic model appears in the continuation method : Only one part of the I-V curve is obtained by increasing or decreasing the bias (see Fig. 3.3).

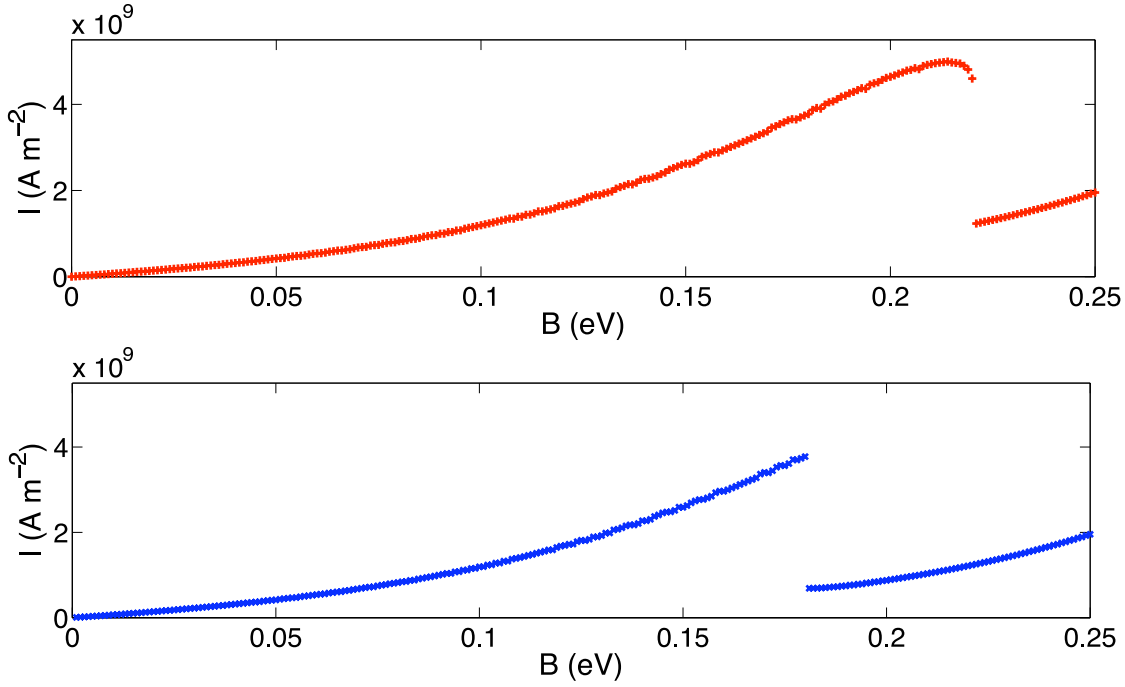


FIG. 3.3 – Comparison of the I-V curves obtained via the continuation method by increasing (top) or decreasing (bottom) the bias.

Another way to understand or compare the bifurcation diagrams is by looking at the resonant energy attached to any nonlinear solution as a function of the applied bias. The first picture of Figure 3.4 shows that the bifurcation diagrams are coherent although the hysteresis phenomena are slightly amplified in the asymptotic model. The second picture of Figure 3.4 shows the comparison for the bias $\underline{B} = 0.05 \text{ eV}$ of the real nonlinear potential and the piecewise affine potential of the reduced model.

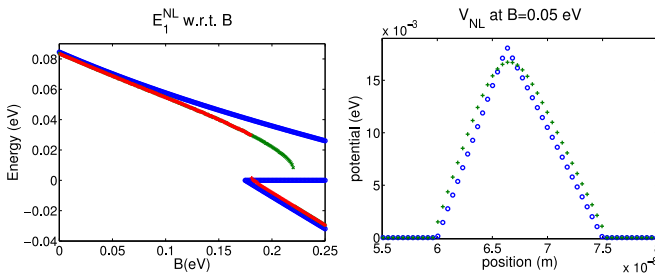


FIG. 3.4 – Comparison of the bifurcation diagram on the E_{res} - V curve (left) of the nonlinear potential for $\underline{B} = 0.05 \text{ eV}$ (right).

Double well Ga-As heterostructure.

With the same physical parameters (except the donor density and the geometry of the barriers) some cases have been tested with the reduced model with a double

well (three barriers) so that there is a non trivial interaction of resonances. Such a case has already been presented in [BNP] for an Si-SiO₂ heterostructure, but we can keep the same material as above with the same effect. The specific data of the device are given in Table 3.1.

Size of barriers	$5 \times 10^{-9}, 5 \times 10^{-9}, 6 \times 10^{-9} \text{ m}$
Size of wells	$6 \times 10^{-9} \text{ m}$
Donor density	$5 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$

TAB. 3.1 – Data for the Ga-As device.

The reduced model leads to the bifurcation diagram given in Figure 3.5, represented in terms of the two resonant energies with respect to the applied bias (the highest resonant energy is initially in the right-hand well).

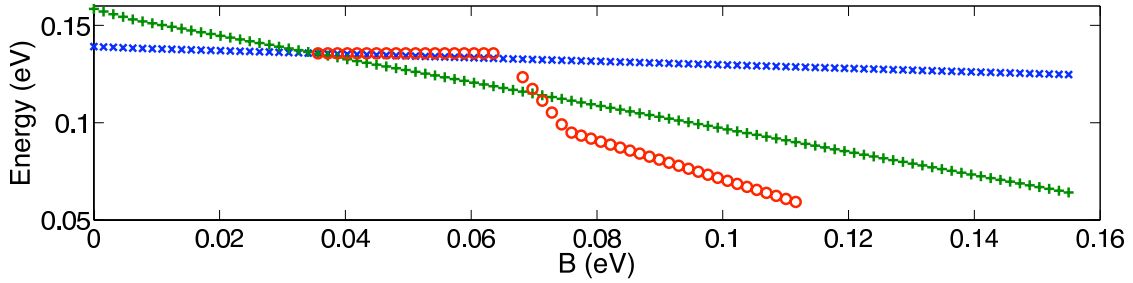


FIG. 3.5 – Bifurcation diagram of the reduced model.

Two branches are possible when the resonances reach the same value, either they cross or they remain together due to the nonlinear effect for a wide range of the bias. Actually we know that this picture is incorrect when $\hbar > 0$ since crossings have to be replaced by avoided crossings in 1D quantum mechanical systems (although resonances can lead exceptionally to higher multiplicity Jordan blocks according to [GMS]). The question is to know which configuration of Figure 3.6 is selected by the complete Schrödinger-Poisson system.

The computations on the full Schrödinger-Poisson system show that both solutions coexist according to the prediction of the reduced model.

The I-V curves are similar (see Fig. 3.8).

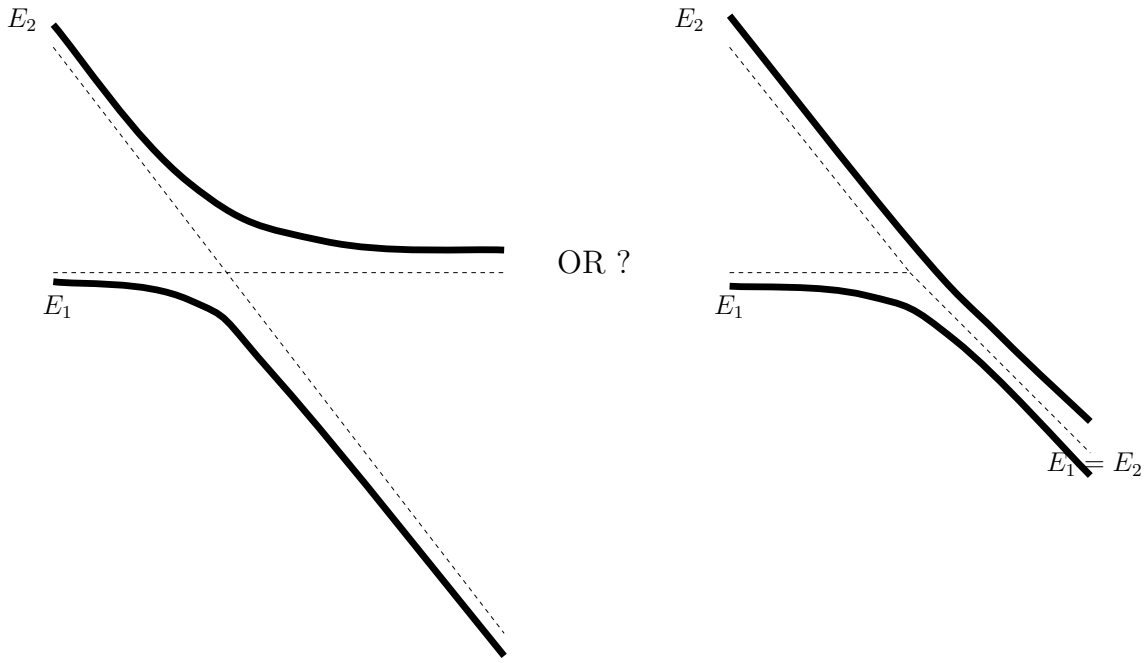


FIG. 3.6 – Two possibilities of nonlinear avoided crossings.

The two model agree at the qualitative and quantitative level although a change by 0.5 nm (a few atomic layers) of the last barrier changes dramatically the bifurcation diagram of the reduced model. With its numerical efficiency, the reduced model appears here as a good tool to detect rapidly the configurations which lead to interesting nonlinear effects.

3.5 Time dependent nonlinear dynamics

When the barriers are well chosen, the double well problem leads to a branch of nonlinear steady states with interacting resonant states. The theoretical analysis as well as the observation of the electron density for these nonlinear solutions, show that they are due to resonant states delocalized in both wells. The question is whether this can lead to some nonlinear beating effect.

Like in [Pi1], the time dependent Schrödinger system is solved by using a Crank-Nicolson scheme :

$$i\hbar \frac{\psi^{n+1}(\underline{k}, \underline{x}) - \psi^n(\underline{k}, \underline{x})}{\Delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\underline{x}^2} (\psi^{n+1}(\underline{k}, \underline{x}) + \psi^n(\underline{k}, \underline{x})) + \underline{\mathcal{V}}^{n+1/2}(\underline{x}) (\psi^{n+1}(\underline{k}, \underline{x}) + \psi^n(\underline{k}, \underline{x})) ,$$

where $\underline{\mathcal{V}}^{n+1/2} = 2\underline{\mathcal{V}}^n - \underline{\mathcal{V}}^{n-1/2}$ and Δt is the time step, together with equation

$$\begin{cases} -\Delta \underline{V}_{NL}^{n+1} = \frac{q^2}{\epsilon} \underline{n}^{n+1}, \\ \underline{V}_{NL}^{n+1}(a) = \underline{V}_{NL}^{n+1}(b) = 0. \end{cases}$$

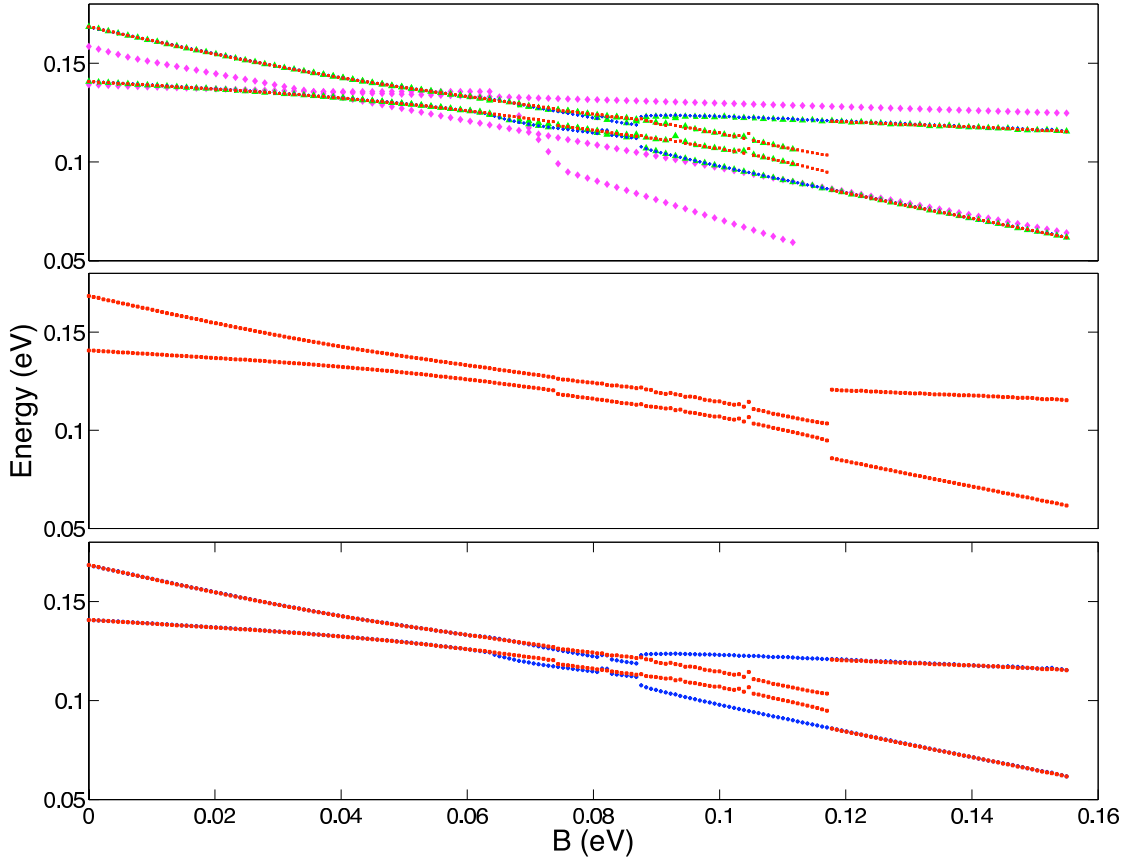


FIG. 3.7 – Top : Comparison of the complete bifurcation diagrams; Middle : Continuation according to $\underline{B} : 0 \text{ eV} \rightarrow 0.16 \text{ eV}$; Bottom : Continuation both ways.

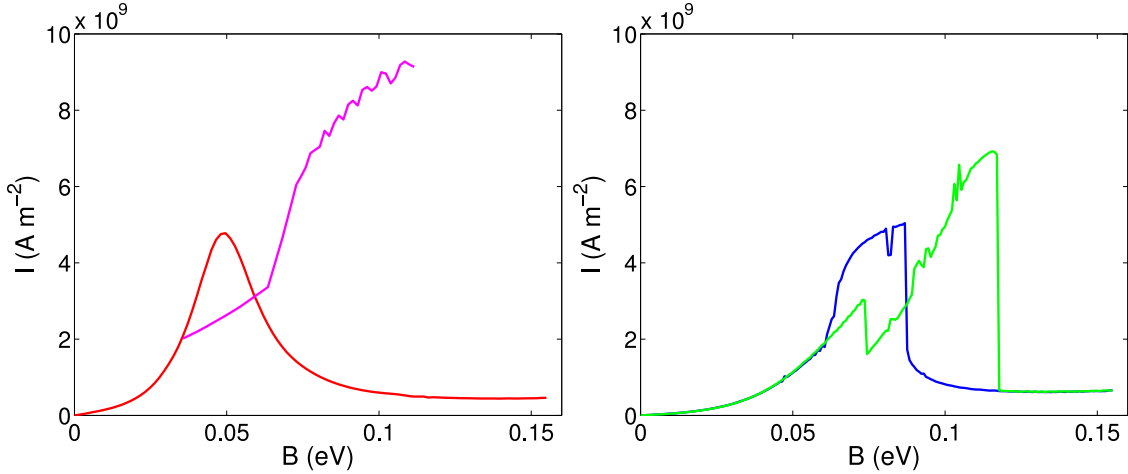


FIG. 3.8 – Comparison of the I-V curve given by the reduced model (left) and by solving the complete Schrödinger-Poisson system (right).

The Crank-Nicolson scheme comes with the transparent boundary conditions proposed by [Arn] and the initial condition $\underline{\psi}^0(\underline{k}, \underline{x}) = \phi(\underline{k}, \underline{x})$, where $\phi(\underline{k}, \underline{x})$ denotes

the wave function at frequency k corresponding to the solution of (3.7) for the initial bias. The density $\underline{n}^{n+1}(\underline{x})$ is computed from the $\underline{\psi}^{n+1}(\underline{k}, \underline{x})$ using formula (3.4).

Several time-dependent simulations of the full Schrödinger-Poisson system have been carried out. It is realized by switching at time $t = 0$, the bias from $\underline{B} = 0$ eV to $\underline{B} = 0.08$ eV. The initial data are the one associated with the nonlinear steady state for $\underline{B} = 0$ eV. Figure 3.9 shows the variations with respect to time of average density current calculated numerically, for the donor density $5 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$. The average current density $\underline{J}^n$ at the n -th time step is computed by using formula (3.6) (such an expression makes sense within an adiabatic approximation), where the stationary wave functions are replaced by the $\underline{\psi}^n(\underline{k}, \underline{x})$:

$$\underline{J}^n = \frac{e\hbar}{m} \int_{\mathbb{R}} \frac{f(\underline{k})}{b-a} \int_a^b \Im \nabla \underline{\psi}^n(\underline{k}, \underline{x}) \overline{\underline{\psi}^n(\underline{k}, \underline{x})} d\underline{x} \frac{d\underline{k}}{2\pi}.$$

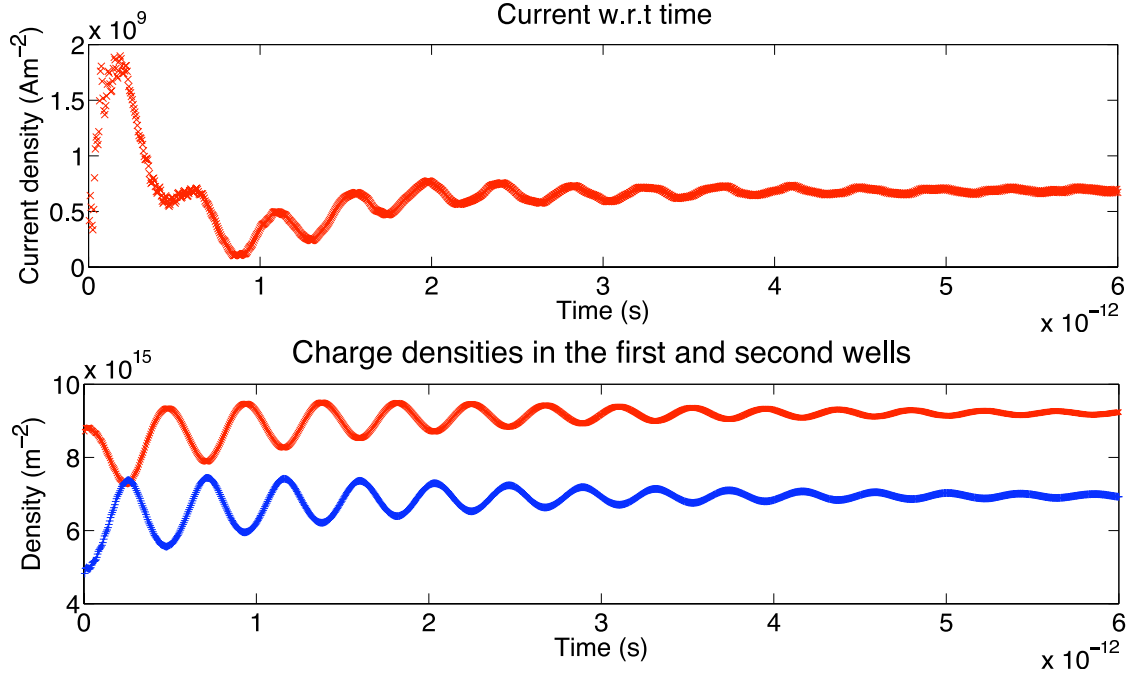


FIG. 3.9 – Evolution of the current and the charge densities in the wells.

The (damped) beating effect is even more obvious on the second plot of Figure 3.9, which shows the time evolution of the charge concentrated in the first and second wells. The period of the oscillations and the damping time can be determined after applying a FFT analysis to the time dependent curves. The damping time is determined after translating the time-dependent curve by one period T_{per} , the peak of the Fourier transform is multiplied by $e^{-T_{per}/T_{damp}}$. The numerical computation of the period T_{per} shows a good agreement with the theoretical value $2\pi\hbar/\Delta E$, where ΔE denotes the gap (computed numerically on the nonlinear steady state solution) between the two resonant energies, although the nonlinear effects should bring some

correction on the time dependent analysis. This has been done in Table 3.2 for several values of the doping density, without changing the other parameters. The nonlinear effects increase when the donor density is increasing.

Donor density (m^{-3})	$\frac{2\pi\hbar}{\Delta E}$ (ps)	T_{per} (ps)	T_{damp} (ps)
10×10^{24}	0.69	0.55	1.1
5×10^{24}	0.51	0.43	1.6
2×10^{24}	0.54	0.43	2.1
1×10^{24}	0.5	0.43	2.6

TAB. 3.2 – Theoretical periods and numerical values of T_{per} and T_{damp} for several donor densities.

The frequency of the oscillations of order 0.5×10^{-12} s corresponding to wavelengths of order 10^{-4} m makes the electrostatic description for such an oscillating charge relevant at the nanometer scale. Note that the damping is increasing when the nonlinear effects are stronger, in agreement with what is observed in some other models studied for example in [GMS2]) where the nonlinearity kills the beating effect after reaching a critical strength. Such a theoretical study would be valuable here but requires some heavy mathematical techniques.

3.6 Conclusion

The comparison of the reduced model introduced in [NP][BNP1][BNP2][BNP] with the simulation of the complete Schödinger-Poisson system confirms its ability to predict the bifurcation diagrams for far from equilibrium resonant tunneling devices. Such a discussion in [NP] and [BNP] had already explained in the single well problem which barrier configuration could lead to hysteresis phenomena. Although a rather strong sensitivity to the geometry of the barriers, it also allows to design configurations for which resonant states of a double well system interact nonlinearly in a rather stable way. The question is whether such nonlinear steady states or in the transient regime such a nonlinear beating effect survive in a more complete modelling taking into account the nonlinear effects outside the barrier-well structure. In the time-dependent double well problem, the coupling of the oscillating dipole with the electromagnetic field could be of interest as well.

Acknowledgements.

The authors would like to thank N. Ben Abdallah, F. Mehats, O. Pinaud, P. Racec, O. Vanbésien, B. Vinter and U. Wulf for remarks and discussions about this work.

Bibliography

- [Arn] A. ARNOLD, Numerical absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. *VLSI Design* 6, 1-4 (1998), 313–319.
- [BA] N. BEN ABDALLAH, On a multidimensional Schrödinger-Poisson scattering model for semiconductors. *J. Math. Phys.* 41, 7 (2000), 4241–4261.
- [BAM] N. BEN ABDALLAH, P. DEGOND AND P. A. MARKOWICH, On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model. *Z. Angew. Math. Phys.* 48, 1 (1997), 135–155.
- [BAP] N. BEN ABDALLAH AND O. PINAUD, Multiscale simulation of transport in an open quantum system : Resonances and WKB interpolation. *J. Comp. Phys.* 213, 1 (2006), 288–310.
- [BNP] V. BONNAILLIE-NOËL, F. NIER AND Y. PATEL, Computing the steady states for an asymptotic model of quantum transport in resonant heterostructures. *J. Comp. Phys.* 219 (2006), 644–670.
- [BNP1] V. BONNAILLIE-NOËL, F. NIER AND Y. PATEL, Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells I. *Prépublications IRMAR* (2007), to appear in Ann. IHP Analyse non linéaire.
- [BNP2] V. BONNAILLIE-NOËL, F. NIER AND Y. PATEL, Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells II. *Prépublications IRMAR* (2007).
- [BILP] M. BÜTTIKER, Y. INRY, R. LANDAUER AND S. PINHAS, Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Phys. Rev. B* 31 (1985), 6207–6215.
- [CD] P. CAUSSIGNAC, J. DESCLOUX AND A. YAMNAHAKKI, Simulation of some quantum models for semiconductors. *Math. Models Methods Appl. Sci.* 12, 8 (2002), 1049–1074.
- [CV] F. CHEVOIR AND B. VINTER, Scattering assisted tunneling in double barriers diode : scattering rates and valley current.
- [Fr] W. R. FRENSLEY, Boundary conditions for open quantum systems driven for equilibrium. *Rev. Mod. Phys.* 62, 3 (1990), 745–791.
- [GMS] V. GRECCHI, A. MARTINEZ AND A. SACCHETTI, Double well Stark effect : crossing and anticrossing of resonances. *Asymptotic Anal.* 13, 4 (1996), 373–391.

-
- [GMS2] V. GRECCHI, A. MARTINEZ AND A. SACCHETTI, Destruction of the beating effect for a non-linear Schrödinger equation. *Comm. Math. Phys.* 227, 1 (2002), 191–209.
 - [GU] H. K. GUMMEL Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculation. *IEEE Trans. Electron Devices ED-11*, 455 (1974).
 - [JLP] G. JONA-LASINIO, C. PRESILLA AND J. SJÖSTRAND, On Schrödinger equations with concentrated nonlinearities. *Ann. Physics* 240, 1 (1995), 1–21.
 - [BG] J. KASTRUP, R. KLANN, H. GRAHN, K. PLOOG, L. BONILLA, J. GALÁN, M. KINDELAN, M. MOSCOSO AND R. MERLIN, Self-oscillations of domains in doped GaAs-AlAs superlattices. *Phys. Rev. B* 52 (1995), 13761–13764.
 - [KKF] A. M. KRIMAN, N. C. KLUKSDAHL AND D. K. FERRY, Scattering states and distribution functions for microstructures. *Phys. Rev. B* 36 (1987), 5953–5959.
 - [La] R. LANDAUER, Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM J. Res. Develop.* 1 (1957), 223–231.
 - [LKF] S. E. LAUX, A. KUMAR AND M. V. FISCHETTI, Analysis of quantum ballistic electron transport in ultra-small semiconductor devices including space-charge effects. *J. Appl. Phys.* 95 (2004), 5545–5582.
 - [MLV] P. MOUNAIX, O. VANBÉSIEN AND D. LIPPENS, Effects of cathode space layer on the current-voltage characteristics of resonant tunneling diodes. *Appl. Phys. Letter* 57, 8 (1990), 1517–1519.
 - [Ni1] F. NIER, Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$: the whole-space case. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A* 123, 6 (1993), 1179–1201.
 - [Ni2] F. NIER, A variational formulation of Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$. *Comm. Partial Differential Equations* 18, 7-8 (1993), 1125–1147.
 - [Ni3] F. NIER, The dynamics of some quantum open systems with short-range nonlinearities. *Nonlinearity* 11, 4 (1998), 1127–1172.
 - [NP] F. NIER AND Y. PATEL, Nonlinear asymptotics for quantum out of equilibrium 1d systems : Reduced models and algorithms. t. Conference "Multiscale methods in quantum mechanics and experiments", Eds., Accademia dei Lincei Roma.
 - [Pi1] O. PINAUD, Transient simulations of a resonant tunneling diode. *J. Appl. Phys.* 92, 4 (2002), 1987–1994.
 - [PS] C. PRESILLA AND J. SJÖSTRAND, Transport properties in resonant tunneling heterostructures. *J. Math. Phys.* 37, 10 (1996), 4816–4844.

Chapitre 4

A semi-classical Schrödinger-Poisson problem in dimension $d \leq 3$ and analysis of the case $d = 1$

We consider the stationary Schrödinger-Poisson model with a background potential describing a quantum well. The Hamiltonian of this system composes of contributions – the background potential well plus a nonlinear repulsive term – which extends on different length scales with ratio parametrized by the small parameter h . With a partition function which forces the particles to remain in the quantum well, the limit $h \rightarrow 0$ in the nonlinear system leads to different asymptotic behaviours, including spectral renormalization, depending on the dimension 1, 2 or 3.

4.1 Introduction

The quantum state of a gas of charged particles is described, in the mean field approximation, by a nonlinear one-particle Schrödinger equation where the electrostatic repulsion is modeled by a non linear potential term depending on the charge density through a Poisson equation. This class of models is usually referred to as Schrödinger-Poisson systems. In this work we consider a stationary Schrödinger-Poisson system in a bounded region of $\mathbb{R}^d$, $d \leq 3$, for which a background potential models a quantum well, while the nonlinear potential extends on a wider scale. After introducing a rescaling for which the small parameter $h > 0$ represents an inverse length scale, the support of the potential well squeezes asymptotically to a single point in the limit $h \rightarrow 0$. An equilibrium state of a gas of charged particles confined in the quantum well will be considered, while the nonlinear electrostatic potential created by such a concentrated charge extends to whole domain with different behaviour far from the well according to the dimension 1, 2 or 3.

Such a Schrödinger-Poisson problem has recently been considered in [1], [2] and [12] in a more complex – although 1 dimensional – setting involving far from equilibrium steady states. This one-dimensional analysis leads to a reduced model which happens to be very efficient in the numerical simulation of the electronic transport through semiconductor heterostructures, like resonant tunneling diodes [4]. In particular this technique allows to forecast with high precision the nonlinear phenomenology – like hysteresis phenomena (e.g. in [9] and [14]) and steady oscillating currents (e.g. in [10]) – observed in such devices.

For the sake of simplicity we shall use a low energy-filter in the definition of the partition function f (see equation (4.5) below), that is the quantum states with an energy larger than the threshold ε_S are not occupied. With such an assumption only the quantum states confined in the well have an effect on the nonlinearity. This is an important point to get asymptotically the macroscopic quantities.

Like in [1], [2] and [12] the analysis will be a mixture of nonlinear apriori estimates combined with accurate semiclassical and spectral techniques (we refer to : [15], [6], [7] and [4]) adapted for potentials with limited regularity. The outline of this Chapter is the following. We end this section by introducing the model for $d \leq 3$, both at the macroscopic and quantum scales. In section 4.2, we give some asymptotics for the spectrum of the linear Hamiltonian. The semi-classical analysis tools, necessary for the study of the limit of the Schrödinger-Poisson system, are given in section 4.3. The proof of the main result of section 4.2 is given in section 4.4. In section 4.5, we present preliminary results for the Schrödinger-Poisson system valid for $d \leq 3$. The limit of the Schrödinger-Poisson system in dimension $d = 1$ is done in section 4.6.

The model

Let Ω be an open bounded set of $\mathbb{R}^d$, $d \leq 3$, and U a non positive function in $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ supported in the ball of radius one centered in the origin of $\mathbb{R}^d$. The open set Ω is supposed smooth enough (for example C^2 or piecewise C^1 and convex) so that the domain of the Dirichlet Laplacian is $H^2 \cap H_0^1(\Omega)$.

For $x_0 \in \Omega$, we define the potential with center x_0 and radius of order $h > 0$

$$U^h(x) = U\left(\frac{x - x_0}{h}\right), \quad x \in \Omega.$$

Being our analysis concerned with the limit $h \rightarrow 0$, we can choose, without loss of generality, h small enough so that the support of U^h is included in Ω . In particular, defining with ω and ω^h the supports of U and U^h respectively, we assume that $\omega^h \subset \Omega$ for all values of h below a suitable positive constant : $h \leq h_0$.

Next we assign the function $f \in C^\infty(\mathbb{R})$, with a threshold at $\varepsilon_S < 0$ and fulfilling the conditions

$$f(x) > 0, \quad \forall x < \varepsilon_S, \quad (4.1)$$

$$f(x) = 0, \quad \forall x \geq \varepsilon_S, \quad (4.2)$$

$$f'(x) \leq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad (4.3)$$

and address, for $h \in (0, h_0]$, the following problem : find V^h solving the non-linear Poisson equation

$$\begin{cases} -\Delta V^h = n[V^h] & \text{in } \Omega \\ V^h|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

where the source term is

$$n[V^h] = \sum_{i \in \mathbb{N}} f(\varepsilon_i^h) |\Psi_i^h|^2, \quad (4.5)$$

with $\{\varepsilon_i^h\}_{i \in \mathbb{N}}$ given by the eigenvalues of the nonlinear Hamiltonian

$$H^h = -h^2 \Delta + U^h + V^h \quad (4.6)$$

numerated from $\inf \sigma(H^h)$ counting multiplicities, while $\{\Psi_i^h\}_{i \in \mathbb{N}}$ are the corresponding eigenvectors

$$\begin{cases} H^h \Psi_i^h = \varepsilon_i^h \Psi_i^h, & \text{in } \Omega, \\ \Psi_i^h|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (4.7)$$

The equations (4.4), (4.5) and (4.7) define the stationary Schrödinger-Poisson system associated with the potential well U^h and the function f . In practical applications, where these equations are used for the description of the charge distribution in electronic devices, $n[V^h]$ describes the density of the charge careers of the system, while f is a response function which depends on the characteristics of the device and has to be considered as a data item of the problem.

The small parameter $h > 0$ arises from a rescaling after considering two length scales, the macroscopic one where the particles behave like classical particles and the microscopic one where the quantum effects have to be taken into account. From this point of view it should be noticed that on $\mathbb{R}^d$, the Schrödinger operator $-h^2 \Delta + U(\frac{x-x_0}{h})$ is unitarily equivalent to $-\Delta + U(x)$ through the unitary map : $L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega^h)$

$$\tilde{\Psi}^h(x) = h^{\frac{d}{2}} \Psi^h(hx + x_0), \quad x \in \Omega^h, \quad (4.8)$$

with

$$\Omega^h = \{x \in \mathbb{R}^d \mid hx + x_0 \in \Omega\}. \quad (4.9)$$

It is easy to show that, under this transformation, the system of equations (4.4) - (4.7) reads as

$$\begin{cases} \left(-\Delta + U + \tilde{V}^h \right) \tilde{\Psi}_i^h = \varepsilon_i^h \tilde{\Psi}_i^h & \text{in } \Omega^h, \\ -\Delta \tilde{V}^h = h^{2-d} \sum_{i \in \mathbb{N}} f(\varepsilon_i^h) |\tilde{\Psi}_i^h|^2 & \text{in } \Omega^h, \\ \tilde{V}^h|_{\partial\Omega^h} = 0, \quad \tilde{\Psi}_i^h|_{\partial\Omega^h} = 0, \end{cases} \quad (4.10)$$

where the Poisson term is related to V^h by

$$\tilde{V}^h(x) = V^h(hx + x_0), \quad x \in \Omega^h. \quad (4.11)$$

In this picture, the parameter h defines an isotropic dilation of the domain Ω such that, in the limit $h \rightarrow 0$, Ω^h covers the whole space $\mathbb{R}^d$. We will refer to (4.10) as the Schrödinger-Poisson problem at the *quantum scale*, while the equations (4.4) - (4.7) describe the problem at the *classical scale*. In both settings, the stationary states form a set of real normalized functions

$$\operatorname{Im} \Psi_i^h = 0; \left\| \Psi_i^h \right\|_{L^2(\Omega)} = 1, \quad (4.12)$$

$$\operatorname{Im} \tilde{\Psi}_i^h = 0; \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} = 1. \quad (4.13)$$

The analysis of our Schrödinger-Poisson system, will involve the operator

$$H_0 = -\Delta + U; \quad D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d), \quad (4.14)$$

whose point spectrum, $\sigma_p(H_0)$, contains a finite number of points embedded in $[-\|U\|_{L^\infty}, 0)$. In particular, we make the following assumptions

$$\sigma_p(H_0) \neq \emptyset \quad (4.15)$$

and

$$e_1 := \inf \sigma(H_0) < \varepsilon_S. \quad (4.16)$$

The reader may refer to Proposition 7.4 in [16] to see that (4.15) is always true for $d = 1, 2$ with $U \leq 0$ and not identically zero. On the other hand, for $d = 3$, potentials fulfilling this condition can be obtained by possibly replacing $U \leq 0$ with $\lambda U \leq 0$, $\lambda > 1$ large enough. The hypothesis (4.16) – which prevents the solution to (4.4) - (4.7) to be trivial – will be extensively used in this work.

4.2 Some asymptotics for the linear operator

Suppose temporarily that $d = 1$, $\Omega = (0, L)$ and consider the operator H_0 defined in (4.14). The multiplication operator U is a relatively compact, and therefore relatively bounded, perturbation of $-\frac{d^2}{dx^2}$. Then, the Weyl and Kato-Reillich Theorems imply that H_0 is self-adjoint and $\sigma_{ess}(H_0) = [0, +\infty)$.

As noted in the introduction $U \leq 0$ implies that $\sigma_d(H_0) \neq \emptyset$, and the discrete spectrum of H_0 is a countable set of negative eigenvalues with finite multiplicity and zero as possible accumulation point. However, the Proposition 7.5 in [16] gives the following bound on the number N of negative eigenvalues of H_0 :

$$N \leq 1 + \int_{\mathbb{R}} |x| |U(x)| dx$$

bound which is finite, U being compactly supported.

We deduce that

$$\sigma(H_0) = \{e_1, \dots, e_N\} \cup [0, +\infty) \quad (4.17)$$

where the e_i are the points of $\sigma_d(H_0)$. We will make the convention $e_i = 0$ for $i \geq N + 1$.

For $d \leq 3$, the potential U can be choosen so that (4.17) is also true.

Now, we are able to study the asymptotical behaviour when $h \rightarrow 0$ of the spectrum of the unitarily equivalent operators

$$H_0^h = -h^2 \Delta + U^h, \quad D(H_0^h) = H^2 \cap H_0^1(\Omega) \quad (4.18)$$

and

$$\tilde{H}_0^h = -\Delta + U, \quad D(\tilde{H}_0^h) = H^2 \cap H_0^1(\Omega^h) \quad (4.19)$$

comparing it with the spectrum of H_0 . This will be done in the general case $d \leq 3$. This operator is important in the study of our problem because it's the linear part of the Hamiltonian H^h defining the Schödinger-Poisson system (4.4) - (4.7). The spectral asymptotics of the linear operator will give information about the non-linear one.

We will denote by $(-h^2 \frac{d^2}{dx^2})_\Omega$ the realisation of $-h^2 \frac{d^2}{dx^2}$ on the bounded domain Ω with domain $H_0^1 \cap H^2(\Omega)$. In dimension 1, the spectrum of the operator $(-h^2 \frac{d^2}{dx^2})_\Omega$ is made of the $\lambda_k^h = \frac{h^2 k^2 \pi^2}{L^2}$ and the corresponding normalized eigenvectors are the $\phi_k = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{k\pi x}{L}$ for $k \geq 1$.

We set

$$\Lambda := \|U\|_{L^\infty} > 0.$$

and we have :

$$\sigma((-h^2 \frac{d^2}{dx^2} - \Lambda)_\Omega) = -\Lambda + \sigma((-h^2 \frac{d^2}{dx^2})_\Omega) = \left\{ \frac{h^2 k^2 \pi^2}{L^2} - \Lambda, k \geq 1 \right\}$$

Let ε be a constant such that $\varepsilon > -\Lambda$, we have :

$$\begin{aligned} \# \left(\sigma((-h^2 \frac{d^2}{dx^2} - \Lambda)_\Omega) \cap (-\infty, \varepsilon] \right) &= \# \left\{ k \geq 1; \frac{h^2 k^2 \pi^2}{L^2} - \Lambda \leq \varepsilon \right\} \\ &= \# \left\{ 1 \leq k \leq \sqrt{\varepsilon + \Lambda} \frac{L}{\pi h} \right\} \leq \sqrt{\varepsilon + \Lambda} \frac{L}{\pi h} \end{aligned}$$

This can be generalized to higher dimensions, see [6]

$$\# \left(\sigma((-h^2 \Delta - \Lambda)_\Omega) \cap (-\infty, \varepsilon] \right) = \mathcal{O}\left(\frac{|\Omega|}{h^d}\right)$$

Coming back to the operator H_0^h , we write :

$$H_0^h \geq (-h^2 \Delta - \Lambda)_\Omega$$

and therefore $\forall \varepsilon > -\Lambda$, the integer

$$N^h := \# \left(\sigma(H_0^h) \cap (-\infty, \varepsilon] \right) \quad (4.20)$$

verifies

$$N^h \leq \# \left(\sigma((-h^2 \Delta - \Lambda)_\Omega) \cap (-\infty, \varepsilon] \right) = \mathcal{O}(h^{-d}). \quad (4.21)$$

The previous asymptotic order is an essential point of the proof of the Lemma above, which is the main result of this section.

Lemma 4.2.1. Consider $\varepsilon \in (e_N, 0)$ and N^h given by (4.20). If we define e_i^h to be the eigenvalues of H_0^h , then, for h_0 small enough, we have :

- $N^h = N, \forall h \in (0, h_0]$
- For $i = 1, \dots, N$:

$$\lim_{h \rightarrow 0} e_i^h = e_i$$

Remark 4.2.2. The Lemma 4.2.1 allows to describe the behaviour of eigenvalues below ε_S , which are interesting for the computation of the density (4.5).

Indeed, as it will appear in the proof of the lemma, we have the following alternative. Either $\exists N_0$ such that $e_{N_0} < \varepsilon_S < e_{N_0+1}$ and the number of eigenvalues of H_0^h below the threshold is the number N_0 of eigenvalues of H_0 below the threshold. Or $\exists N_0$ such that $e_{N_0} = \varepsilon_S$, and the number of eigenvalues of H_0^h below the threshold is controled by the one of H_0 plus the multiplicity of the eigenvalue e_{N_0} . For the second alternative, the eigenvalues of H_0^h , which tend to e_{N_0} , may not have a fixed position with respect to the threshold.

Remark 4.2.3. An another consequence of this Lemma is :

$$\liminf_{h \rightarrow 0} e_i^h \geq 0$$

for $i \geq N + 1$. Asymptotically, the eigenvalues of H_0^h , for $i \geq N + 1$, are embedded in the continuous spectrum of H_0 .

Before giving the proof of Lemma 4.2.1, we recall in next section some basic proprieties of the mathematical tools needed.

In particular, the proof of this lemma is based on the exponential decay of eigenfunctions cooresponding to energies below ε . We will present exponential decay estimates in the section 4.3.2 for a non negative nonlinearity V^h . Therefore, this exponential decay will be available in our case $V^h = 0$.

4.3 Mathematical tools

4.3.1 Agmon distance

We will mainly follow [8] and present an additional result in the framework of our problem. Let f be a real-valued function, continuous on a regular bounded set $\Omega \subset \mathbb{R}^d$.

We note $g = (f)_+^{\frac{1}{2}}$, where $(x)_+$ equals x if x is positive, or else equals 0.

For given $x, y \in \Omega$, we define :

$$\mathcal{P}_{x,y} = \{\gamma : [0, 1] \rightarrow \Omega; \gamma(0) = x, \gamma(1) = y, \gamma \in AC[0, 1]\}$$

where $AC[0, 1]$ is the set of absolutly continuous functions on $[0, 1]$. Then, for any path $\gamma \in \mathcal{P}_{x,y}$, $|\gamma| = \int_0^1 |\gamma'(s)| ds$ is the usual length of γ , and

$$|\gamma|_g = \int_0^1 g(\gamma(s)) |\gamma'(s)| ds$$

is the length of γ associated to g . Then the Agmon distance related to g is :

$$d(x, y) = \inf_{\gamma \in \mathcal{P}_{x,y}} |\gamma|_g$$

We remark that this distance is degenerated : it may happen that $d(x, y) = 0$ with $x \neq y$. However the Agmon distance verifies the following properties : $\forall x, y, z \in \Omega$

$$d(x, y) = d(y, x), \quad d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$$

For $y \in \Omega$ fixed, the fonction $x \mapsto d(x, y)$ is Lipschitzian continuous. Then, it is differentiable almost everywhere by Rademacher's Theorem. It can be shown that where $x \mapsto d(x, y)$ is differentiable, we have :

$$|\nabla_x d(x, y)| \leq g(x)$$

For a set $\omega \subset \Omega$, we define :

$$d(x, \omega) = \inf_{y \in \omega} d(x, y)$$

Then, $d(x, \omega)$ has the same regularity as $x \mapsto d(x, y)$ and

$$|\nabla d(x, \omega)| \leq g(x) \quad a.e. \ \Omega \quad (4.22)$$

In our case, we will use the Agmon distance associated to the potential $U^h - \varepsilon$ for a constant $\varepsilon < 0$. It simply means that we will take $f = U^h - \varepsilon$.

For the exponential decay estimates, it will be useful to replace the Agmon distance with the Euclidian distance. To do this, the main point is to remark that, for Ω convex and $f = 1$, the Agmon distance, $d(x, y)$, corresponds to the Euclidian one, $|x - y|$, the shorter path between x and y beeing the straight line.

Lemma 4.3.1. *Let ω^h be the support of the well U^h , then $\exists c_0, c_1 > 0$ such that $\forall x \in \Omega$:*

$$d(x, \omega^h) \geq c_0 |x - x_0| - c_1 h \quad (4.23)$$

For simplicity, the proof will be performed under the assumption that pathes in $\mathcal{P}_{x,y}$ are continuous, but the result is also true for absolutely continuous pathes.

Proof. Let $x \in \Omega \setminus \omega^h$, $y \in \omega^h$, then $\forall \gamma \in \mathcal{P}_{x,y}$, $\exists s \in [0, 1]$ s.t. $\gamma(s) \in \partial\omega^h$. We set :

$$s_0 = \inf\{s \in [0, 1]; \gamma(s) \in \partial\omega^h\}, \quad y_0 = \gamma(s_0)$$

Then, we have :

$$\begin{aligned} \int_0^1 (U^h(\gamma(s)) - \varepsilon)_+^{\frac{1}{2}} |\gamma'(s)| ds &\geq \int_0^{s_0} (U^h(\gamma(s)) - \varepsilon)_+^{\frac{1}{2}} |\gamma'(s)| ds \\ &= |\varepsilon|^{\frac{1}{2}} \int_0^{s_0} |\gamma'(s)| ds \end{aligned}$$

The path $\tilde{\gamma}(s) = \gamma(s_0 s)$ belongs to $\mathcal{P}_{x,y_0}$ and verifies :

$$\begin{aligned} \int_0^{s_0} |\gamma'(s)| ds &= \int_0^1 |\tilde{\gamma}'(s)| ds = |\tilde{\gamma}| \\ &\geq \inf_{\gamma \in \mathcal{P}_{x,y_0}^*} |\gamma| = |x - y_0| \end{aligned}$$

where $\mathcal{P}_{x,y_0}^* \supset \mathcal{P}_{x,y_0}$ is the set of pathes joinging x and y_0 which does not necessarily stay in Ω :

$$\mathcal{P}_{x,y_0}^* = \{\gamma : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^d; \gamma(0) = x, \gamma(1) = y_0, \gamma \in C[0, 1]\}$$

We deduce that :

$$\begin{aligned} d(x, y) &= \inf_{\gamma \in \mathcal{P}_{x,y}} \int_0^1 (U^h(\gamma(s)) - \varepsilon)_+^{\frac{1}{2}} |\gamma'(s)| ds \\ &\geq |\varepsilon|^{\frac{1}{2}} |x - y_0| \geq |\varepsilon|^{\frac{1}{2}} (|x - x_0| - h) \end{aligned}$$

where we used that $\omega^h \subset B(x_0, h)$. ■

If we consider the Agmon distance, related to the potential $(U - \varepsilon)$ at the quantum scale and to the domain Ω^h , and defined by (4.9), we have a result similar to the previous one :

$$d(x, \omega) \geq c_0 |x| - c_1$$

where ω denotes the support of U .

4.3.2 Exponential decay of eigenfunctions

The exponential decay estimates, also called Agmon estimates, form a standard technical tool in evaluating the rate of decay of eigenfunctions far from the interaction support. In what follows, we apply this technique to the case of the Schrödinger Poisson system with a squeezing quantum well; in particular we give some useful decay estimates for those stationary states – on both the classical and the quantum scales – related to the energies below some negative energy. Let us first recall the definition of the *Agmon distance*, introduced in section 4.3.1, associated to a smooth potential V , defined on $D \subset \mathbb{R}^d$, and to the energy E

$$d_{V-E}(x, y) = \inf_{\gamma \in \mathcal{P}_{x,y}} \int_0^1 \sqrt{(V(\gamma(s)) - E)_+} |\gamma'(s)| ds, \quad (4.24)$$

where $\mathcal{P}_{x,y}$ denotes the set of all regular curves connecting x and y in D .

Lemma 4.3.2 (Agmon estimates). *Let ε_i^h be a spectral point of the (unitarily equivalent) Hamiltonians*

$$H^h = -h^2 \Delta + U^h + V^h \quad (4.25)$$

and

$$\tilde{H}^h = -\Delta + U + \tilde{V}^h \quad (4.26)$$

placed below some negative energy : $\varepsilon_i^h < \varepsilon$ where $\varepsilon \in (-\|U\|_{L^\infty}, 0)$. The related stationary states $-\Psi_i^h$ and $\tilde{\Psi}_i^h$ admit the estimates

$$\|h \nabla (e^{\phi/h} \Psi_i^h)\|_{L^2(\Omega)} + \|e^{\phi/h} \Psi_i^h\|_{L^2(\Omega)} \leq C, \quad (4.27)$$

$$\|e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h\|_{H^1(\Omega^h)} \leq \tilde{C}, \quad (4.28)$$

where C and $\tilde{C}$ are suitable positive constants, ϕ and $\tilde{\phi}$ are the Agmon distances

$$\phi(x) = (1 - \delta) d_{U^h - \varepsilon}(x, \omega^h), \quad x \in \Omega \quad (4.29)$$

$$\tilde{\phi}(x) = (1 - \delta) d_{U - \varepsilon}(x, \omega), \quad x \in \Omega^h \quad (4.30)$$

δ is a positive parameter smaller than 1, while ω^h and ω are respectively the support of U^h and U .

Proof. We start considering the problem at the quantum scale. We use the relation (see for instance Theorem 1.1 in [7])

$$\int_{\Omega^h} |\nabla(e^\varphi u)|^2 dx + \int_{\Omega^h} (V - |\nabla \varphi|^2) e^{2\varphi} u^2 dx = \int_{\Omega^h} e^{2\varphi} (-\Delta + V) u \cdot u dx. \quad (4.31)$$

Setting $u = \tilde{\Psi}_i^h$, $\varphi = \tilde{\phi}$ and $V = U + \tilde{V}^h - \varepsilon_i^h$, we get

$$\int_{\Omega^h} |\nabla(e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h)|^2 dx = - \int_{\Omega^h} (U + \tilde{V}^h - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2) e^{2\tilde{\phi}} (\tilde{\Psi}_i^h)^2 dx, \quad (4.32)$$

As it will be noted in section 4.5, we have $V^h \geq 0$ and therefore

$$\int_{\Omega^h} |\nabla(e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h)|^2 dx \leq - \int_{\Omega^h} (U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2) e^{2\tilde{\phi}} (\tilde{\Psi}_i^h)^2 dx. \quad (4.33)$$

Next we follow the same line as in Proposition 3.3.1 of [6] and introduce the set

$$\Omega_{h,\delta}^+ = \{x \in \Omega^h \mid U - \varepsilon \geq \delta\},$$

where δ is a small positive parameter. Relation (4.33) can be written as

$$\int_{\Omega^h} |\nabla(e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h)|^2 dx + \int_{\Omega_{h,\delta}^+} (U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2) e^{2\tilde{\phi}} (\tilde{\Psi}_i^h)^2 dx \leq - \int_{\Omega_{h,\delta}^-} (U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2) e^{2\tilde{\phi}} (\tilde{\Psi}_i^h)^2 dx, \quad (4.34)$$

with $\Omega_{h,\delta}^- = \Omega^h \setminus \Omega_{h,\delta}^+$. The function $U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2$ admits the following estimates

- The domain $\Omega_{h,\delta}^-$ is inside the support of U ; therefore, in this region, we have $\tilde{\phi} = 0$, $U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2 = U - \varepsilon_i^h$ and

$$\sup_{x \in \Omega_{h,\delta}^-} -(U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2) \leq \|U\|_{L^\infty}. \quad (4.35)$$

– In $\Omega_{h,\delta}^+$; applying (4.22), we have

$$\begin{aligned} U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2 &\geq U - \varepsilon_i^h - (1 - \delta)^2 (U - \varepsilon) \\ &\geq (U - \varepsilon)(2\delta - \delta^2) \geq 2\delta^2 - \delta^3. \end{aligned}$$

For $\delta < \min\{1, |\varepsilon|\}$, it follows

$$\inf_{x \in \Omega_{h,\delta}^+} \left(U - \varepsilon_i^h - |\nabla \tilde{\phi}|^2 \right) > \delta^2. \quad (4.36)$$

Replacing (4.35) and (4.36) into (4.34) and taking into account the condition $\|\tilde{\Psi}_i^h\|_{L^2(\Omega^h)} = 1$, we obtain

$$\int_{\Omega^h} |\nabla(e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h)|^2 dx + \delta^2 \int_{\Omega_{h,\delta}^+} e^{2\tilde{\phi}} \left(\tilde{\Psi}_i^h \right)^2 dx \leq \|U\|_{L^\infty}$$

and

$$\int_{\Omega^h} |\nabla(e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h)|^2 dx + \delta^2 \int_{\Omega^h} e^{2\tilde{\phi}} \left(\tilde{\Psi}_i^h \right)^2 dx \leq \|U\|_{L^\infty} + \delta^2 \int_{\Omega_{h,\delta}^-} e^{2\tilde{\phi}} \left(\tilde{\Psi}_i^h \right)^2 dx \leq \|U\|_{L^\infty} + \delta^2.$$

This gives the estimate (4.28).

The analogous result at the classical scale (4.27) can be easily achieved making use of the change of variables : $\Omega^h \rightarrow \Omega$, and taking into account the relations (4.8) and

$$\frac{1}{h} d_{U^h - \varepsilon}(x, \omega^h) = d_{U - \varepsilon}\left(\frac{x - x_0}{h}, \omega\right), \quad x \in \Omega.$$

■

Remark 4.3.3. The previous Lemma allows us to state that the stationary states related to negative energies show an exponential decay outside the support of the potential well, which is given by ω^h or ω depending on the description adopted. In particular, for $\varepsilon < 0$, we notice that the corresponding Agmon metric

$$(U^h - \varepsilon)_+^{\frac{1}{2}} dx \quad \text{and} \quad (U - \varepsilon)_+^{\frac{1}{2}} dx$$

identifies with the Euclidian one

$$|\varepsilon|^{\frac{1}{2}} dx$$

in the open domains $x \in \mathbb{R}^d \setminus \bar{\omega}^h$ and $x \in \mathbb{R}^d \setminus \bar{\omega}$ respectively. It follows that, in these regions, $\phi(x)$ and $\tilde{\phi}(x)$ are strictly positive functions increasing, for $|x| \rightarrow \infty$, as the standard Euclidean distance in $\mathbb{R}^d$. This property can be rephrased by the following Lemma, which is a complement of Lemma 4.3.1.

Lemma 4.3.4. *The functions ϕ and $\tilde{\phi}$, defined in (4.29)-(4.30), admit the following estimates*

$$c_0 |x - x_0| - h c_1 \leq \phi(x) \leq c_2 |x - x_0|, \quad x \in \Omega \quad (4.37)$$

$$c_0 |x| - c_1 \leq \tilde{\phi}(x) \leq c_2 |x|, \quad x \in \Omega^h \quad (4.38)$$

where c_i , $i = 0, 1, 2$, are suitable positive constants.

Corollary 4.3.5. *Set $\varepsilon \in (-||U||_{L^\infty}, 0)$. For $\varepsilon_i^h < \varepsilon$, the following estimates hold*

$$\left\| e^{c_0|\cdot|} \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} + \left\| e^{c_0|\cdot|} \nabla \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} \leq C, \quad (4.39)$$

$$\left\| e^{c_0|\cdot|} \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^p(\Omega^h)} \leq C', \quad (4.40)$$

with : $p \in [1, 6]$ in dimension $d = 3$ or $p \in [1, +\infty)$ in dimension $d = 2$, and for suitable positive constants C, C' .

Proof. As a direct consequence of the estimate (4.28) and the inequality (4.38), it follows that the L^2 -norm of the function $e^{c_0|\cdot|} \tilde{\Psi}_i^h$ is uniformly bounded w.r.t. h .

For what concern the second contribution in (4.39), we notice that

$$e^{c_0|\cdot|-c_1} \left| \nabla \tilde{\Psi}_i^h \right| \leq \left| e^{\tilde{\phi}} \nabla \tilde{\Psi}_i^h \right| = \left| \nabla \left(e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h \right) - \left(\nabla e^{\tilde{\phi}} \right) \tilde{\Psi}_i^h \right|.$$

The term $\nabla e^{\tilde{\phi}}$ at the r.h.s. is pointwise bounded by

$$\left| \nabla e^{\tilde{\phi}} \right| \leq (U - \varepsilon)_+^{\frac{1}{2}} e^{\tilde{\phi}},$$

as it comes from (4.22). Then, using once more the relation (4.28), we obtain

$$e^{-c_1} \left\| e^{c_0|\cdot|} \nabla \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} \leq \left\| \nabla \left(e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h \right) \right\|_{L^2(\Omega^h)} + \sup_{x \in \Omega^h} (U - \varepsilon)_+^{\frac{1}{2}} \left\| e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} \leq C.$$

From the continuous injection $H^1 \hookrightarrow L^p$ and the Agmon estimate (4.28), we get

$$\left\| e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^p(\Omega^h)} \leq C'.$$

Then, relation (4.40) easily follows taking into account the inequality $e^{p(c_0|\cdot|-c_1)} \left| \tilde{\Psi}_i^h \right|^p \leq \left| e^{\tilde{\phi}} \tilde{\Psi}_i^h \right|^p$. ■

4.3.3 Spectral comparison between self-adjoint operators.

The elements given there are presented in detail in [7].

For two linear subspaces E and F of a Hilbert H , we will denote by Π_E and Π_F the orthogonal projections on E and F respectively. Let us define the non symmetric distance between spaces :

$$d(E, F) = ||\Pi_E - \Pi_F \Pi_E|| = ||\Pi_E - \Pi_E \Pi_F|| \quad (4.41)$$

Then the first important result is the following :

Lemma 4.3.6. *If $d(E, F) < 1$, the projection $\Pi_F|_E : E \rightarrow F$ is injective, in particular $\dim E \leq \dim F$.*

We present now the theorem which will allow us to make the asymptotic $h \rightarrow 0$ of the spectrum of the operator H_0^h or H^h , depending on the case, by comparing them with an operator defined on the whole space.

Theorem 4.3.7. *Consider A a self-adjoint operator on a Hilbert space H . Consider a compact interval $I \subset \mathbb{R}$, a family $\Psi_1, \dots, \Psi_N$ of linearly independant vectors of $D(A)$ and $\mu_1, \dots, \mu_N \in I$ such that :*

$$A\Psi_j = \mu_j\Psi_j + r_j, \text{ with } \|r_j\| \leq \varepsilon$$

Suppose that $\sigma(A) \cap ((I + B(0, 2a)) \setminus I) = \emptyset$ for some constant $a > 0$.

Then, if E denotes the vector space spanned by $\Psi_1, \dots, \Psi_N$ and F is the spectral sub-space related to $\sigma(A) \cap I$, we have

$$d(E, F) \leq \left(\frac{N}{\lambda_{\min}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\varepsilon}{a}$$

where $\lambda_{\min}$ is the smallest eigenvalue of the matrix $((\Psi_j, \Psi_k))$.

4.4 Proof of Lemma 4.2.1

Some ideas of the proof are similar the ones of the proof of Theorem 12.9 in [13] and will be also used in section 4.6 and in Chapter 5. In order to use (4.40), we will work at the quantum scale with the operator $\tilde{H}_0^h$ given by (4.19). This operator is unitarily equivalent to H_0^h , therefore its spectrum is made of the e_i^h .

We set ϕ_i^h the normalized eigenvector of $\tilde{H}_0^h$.

The spectral comparison of $\tilde{H}_0^h$ with the operator H_0 , defined by (4.14), will give the result of the Lemma.

- Introduce the family : $u_i^h = \chi^h \phi_i^h \in D(H_0)$, for $i = 1, \dots, N^h$, where $\chi^h(x) = \chi(hx + x_0)$ and $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ is such that : $\chi = 1$ on $B(x_0, \frac{R}{2})$ and $\chi = 0$ on $\mathbb{R}^d \setminus B(x_0, R)$ for a radius $R > 0$ verifying $B(x_0, R) \subset \Omega$.

We have the following classical inequality for self-adjoint operators, see [6] :

$$\|u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} d(e_i^h, \sigma(H_0)) \leq \|(H_0 - e_i^h)u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

The decay given by (4.39) implies that the mass of the ϕ_i^h is important around 0 uniformly with respect to $h \in (0, h_0]$. It follows

$$\|u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \geq \frac{1}{2}$$

Moreover, this functions verify

$$(H_0 - e_i^h)u_i^h = -(\Delta\chi^h)\phi_i^h - 2\nabla\chi^h \cdot \nabla\phi_i^h.$$

The r.h.s. in the previous equality being supported in a region where ϕ_i^h is exponentially decaying, the estimate (4.39) gives :

$$\|(H_0 - e_i^h)u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \leq Ce^{-\frac{\gamma}{h}} \quad (4.42)$$

where $C, \gamma > 0$ doesn't depend on i and h .

We deduce that

$$d(e_i^h, \sigma(H_0))_{1 \leq i \leq N^h} \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0.$$

- Let $I = [-||U||_{L^\infty}, \varepsilon]$ and $a > 0$ be small enough to have

$$\sigma(H_0) \cap ((I + B(0, 2a)) \setminus I) = \emptyset.$$

We consider the vector space E spanned by $u_1^h, \dots, u_{N^h}^h$ and the spectral subspace F corresponding to $\sigma(H_0) \cap I$. Estimation (4.39) implies that the matrix $M = ((u_i^h, u_j^h)_{L^2(\mathbb{R}^d)})_{1 \leq i, j \leq N^h}$ verifies

$$M = I + o(1) \tag{4.43}$$

when $h \rightarrow 0$. As it will be clarified in Remark 4.4.1, equation (4.43) implies that the u_i^h are linearly independant. If we consider in addition equation (4.42), the conditions for the application of Theorem 4.3.7 are gathered and

$$d(E, F) \leq \left(\frac{N^h}{\lambda_{\min}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{C e^{-\frac{\gamma}{h}}}{a}$$

where $\lambda_{\min}$ is the smallest eigenvalue of M . We deduce from (4.43) that $\lambda_{\min} = 1 + o(1)$, and using (4.21), we get :

$$d(E, F) \leq C(N^h)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\gamma}{h}} \leq C h^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{\gamma}{h}} \leq \frac{1}{2}$$

for all $h \in (0, h_0]$ and h_0 small enough. Then, Lemma 4.3.6 gives

$$N^h \leq N \tag{4.44}$$

- In order to conclude, we have to show that the e_i , defined by (4.17), are near the spectrum of $\tilde{H}_0^h$.

Let $\phi_i, i = 1, \dots, N$, be the normalized eigenvectors of H_0 . We refer to [4] to see that estimation (4.28) can be extended to the whole space. The weight appearing in this inequality is given by the Agmon distance on $\mathbb{R}^d$ related to the potential $(U - \varepsilon)$. Then inequality (4.38), for $\Omega^h = \mathbb{R}^d$, gives

$$\int_{\mathbb{R}^d} |e^{c_0|x|} \phi_i|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} |e^{c_0|x|} \nabla \phi_i|^2 dx \leq C \tag{4.45}$$

Therefore, if we set $v_i^h = \chi^h \phi_i \in D(\tilde{H}_0^h)$, for $i = 1, \dots, N$, using (4.45), we can reproduce the calculation of the first point to get

$$||(\tilde{H}_0^h - e_i) v_i^h||_{L^2(\Omega^h)} \leq C e^{-\frac{\gamma}{h}} \tag{4.46}$$

and

$$d(e_i, \sigma(\tilde{H}_0^h)) \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0.$$

From (4.44), we have $N^h = \mathcal{O}(1)$, and therefore, we can already conclude that we are in the following situation : if we note f_k , $k = 1, \dots, K$, the eigenvalues of H_0 , counted only one time, and M_k the multiplicity of f_k , then for all small $\delta > 0$, $\exists h_0$ such that $\forall h \in (0, h_0]$ we have, even if the numerotation of the eigenvalues has to be changed,

$$e_1 = \dots = e_{M_k} = f_k \quad (4.47)$$

$$e_1^h, \dots, e_{N_k}^h \in [f_k - \delta, f_k + \delta] \quad (4.48)$$

with $\sum_{k=1}^K M_k = N$ and $N_k \geq 1$ an integer, depending on h , such that $\sum_{k=1}^K N_k = N^h$. If we obtain

$$M_k \leq N_k \quad (4.49)$$

this will end the proof of the Lemma. In what follows we will show that (4.49) is verified.

• Consider that we are in the framework of (4.47), (4.48) and define $I = [f_k - \delta, f_k + \delta]$. Since $M_k \leq N = \mathcal{O}(1)$, and

$$\sigma(\tilde{H}_0^h) \cap ((I + B(0, 2\delta)) \setminus I) = \emptyset \quad \forall h \in (0, h_0]$$

for δ and h_0 small, we get $M_k \leq N_k$ using the same process as in the previous point, where E is the vector space spanned by $v_1^h, \dots, v_{M_k}^h$ and F is the spectral subspace associated to $\sigma(\tilde{H}_0^h) \cap I$. Estimations (4.45) and (4.46) allow to conclude.

Remark 4.4.1. The matrix $M := ((u_i^h, u_j^h))$ verifies $M = I + \mathcal{O}(e^{-\frac{\gamma}{h}})$ for a constant $\gamma > 0$ where the asymptotics $\mathcal{O}$ is considered with respect to the norm

$$\|A\|_\Delta = \max_{i,j} |a_{ij}|$$

This implies the linear independence of the u_i^h . When $N^h = N$ is fixed, it is a consequence of the continuity of the determinant on $\mathbb{C}^{N \times N}$. Indeed, $\det(I) = 1$ implies that when $h \rightarrow 0$, $\det(M) \geq \frac{1}{2}$ and M is invertible. Suppose there exists $\lambda = (\lambda_i)$ such that $\sum_i \lambda_i u_i = 0$, then $M\lambda = 0$ and $\lambda = 0$.

In our case, N^h may tend to $+\infty$ and working with the determinant imposes technical difficulties. However, M is well invertible. To obtain it, we note that (see [5])

$$\forall A \in \mathbb{C}^{N^h \times N^h}, \quad \|A\|_2 \leq N^h \|A\|_\Delta$$

where

$$\|A\|_2 = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}, \quad \|x\|_2 = \left(\sum_i x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

We obtain $\|M - I\|_2 \leq Ch^{-d} e^{-\frac{\gamma}{h}} < 1$, $\forall h \in (0, h_0]$ for h_0 small, and the inequality $\|AB\|_2 \leq \|A\|_2 \|B\|_2$ implies that the sequence $S := \sum_{n \geq 0} (-1)^n (M - I)^n$ converges and verifies :

$$SM = MS = I$$

which allows to conclude.

The asymptotics $\lambda_{min} = 1 + o(1)$, where λ_{min} is the smallest eigenvalue of M , is given by the perturbation estimate for eigenvalues

$$|\lambda_n(M) - 1| \leq \|M - I\|_2, \quad \sigma(M) = \{\lambda_n(M), 1 \leq n \leq N^h\}$$

which can be found in [5]. As $\|M - I\|_2 \leq N^h \|M - I\|_\Delta \leq C e^{-\frac{\gamma}{2h}}, \forall h \in (0, h_0]$, we get :

$$\lambda_{min} = 1 + \mathcal{O}(e^{-\frac{\gamma}{2h}})$$

4.5 Preliminary results for the Schrödinger-Poisson system in dimension $d \leq 3$

We give some apriori estimates for our Schrödinger-Poisson system, valid in dimension $d \leq 3$, which will be also used in Chapter 5.

From the lower bounds

$$-\Delta V^h \geq 0 \quad \text{in } \Omega \quad \text{and} \quad -\Delta \tilde{V}^h \geq 0 \quad \text{in } \Omega^h, \quad (4.50)$$

with homogeneous Dirichlet boundary condition, the maximum principle implies

$$V^h \geq 0 \quad \text{in } \Omega \quad \text{and} \quad \tilde{V}^h \geq 0 \quad \text{in } \Omega^h. \quad (4.51)$$

Thus, V^h and $\tilde{V}^h$ define positive perturbations of the unitarily equivalent Hamiltonians H_0^h and $\tilde{H}_0^h$ given by (4.18) and (4.19) respectively. The spectra of H_0^h and $\tilde{H}_0^h$ are bounded from below by the norm $\|U\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)}$ and we can state

$$\inf \{\varepsilon_i^h\}_{i \in \mathbb{N}} \geq -\|U\|_{L^\infty}. \quad (4.52)$$

Due to the definition of the source term (4.5), V^h and $\tilde{V}^h$ are generated by those energy levels ε_i^h placed below the cut off ε_S of the characteristic function f . In order to study the semiclassical behaviour of our system, we are interested into the spectral properties of the Hamiltonians

$$H^h = -h^2 \Delta + U^h + V^h, \quad D(H^h) = H^2 \cap H_0^1(\Omega) \quad (4.53)$$

and

$$\tilde{H}^h = -\Delta + U + \tilde{V}^h, \quad D(\tilde{H}^h) = H^2 \cap H_0^1(\Omega^h) \quad (4.54)$$

in the spectral interval $[-\|U\|_{L^\infty}, \varepsilon_S)$, as $h \rightarrow 0$. In particular, a uniform bound for the number of eigenvalues $\varepsilon_i^h \in [-\|U\|_{L^\infty}, \varepsilon_S)$ as $h \rightarrow 0$ is required. Let us denote with $\{e_i^h\}_{i \in \mathbb{N}}$ the point spectrum of the unitarily equivalent Hamiltonians H_0^h and $\tilde{H}_0^h$. As noticed above, the operators H^h and $\tilde{H}^h$ are obtained as positive perturbations of H_0^h and $\tilde{H}_0^h$ through the Poisson potentials V^h and $\tilde{V}^h$ respectively. Then, the minimax principle implies that

$$e_i^h \leq \varepsilon_i^h \quad \forall i \in \mathbb{N}. \quad (4.55)$$

On the other hand, as it follows from Lemma 4.2.1, the eigenvalues $e_i^h \in [-\|U\|_{L^\infty}, \varepsilon_S)$ converge to eigenvalues of the operator $H_0 = -\Delta + U$ on $\mathbb{R}^d$ as $h \rightarrow 0$. Previous remarks lead to the following result (see also Remark 4.2.2 for more details).

Lemma 4.5.1. *There exists a finite natural N_0 such that $\forall h \in (0, h_0]$*

$$\#(\sigma(H_0^h) \cap [-\|U\|_{L^\infty}, \varepsilon_S)) \leq N_0 \quad (4.56)$$

$$\#(\sigma(H^h) \cap [-\|U\|_{L^\infty}, \varepsilon_S)) \leq N_0 \quad (4.57)$$

where $\sigma(H)$ denotes the spectrum of H .

We focus our attention on the Schrödinger-Poisson problem at the classical scale. To this concern we recall the variational formulation of this problem given in [11] for dimensions $d \leq 3$. Rephrasing the results of this work for our system, we can state that the solution to the equation (4.4)(4.5)(4.7) is equivalent to the minimization problem

$$\inf_{V \in H_0^1(\Omega)} J(V); \quad J(V) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla V(x)|^2 dx + \text{Tr} [F(H^h(V))] , \quad (4.58)$$

where F is the positive function

$$F(x) = \int_x^{+\infty} f(s) ds , \quad (4.59)$$

while the Hamiltonian $H^h(V)$ is given by

$$H^h(V) = -h^2 \Delta + U^h + V, \quad D(H^h(V)) = H^2 \cap H_0^1(\Omega). \quad (4.60)$$

Moreover, the function $J(V)$ is Fréchet- C^∞ w.r.t. V , strictly convex and coercive, that is α -convex, on $H_0^1(\Omega)$ and (4.58) admits a unique solution in this space. The following Proposition is a direct consequence of this result.

Proposition 4.5.1. *The solutions to the Schrödinger-Poisson problem (4.4)(4.5)(4.7) are bounded in $H_0^1(\Omega)$ uniformly with respect to h .*

Proof. From the variational formulation recalled above, the solution V^h is the minimum of the convex map $J(V)$, therefore we have

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla V^h(x)|^2 dx + \text{Tr} [F(H^h(V^h))] \leq J(0) = \text{Tr} [F(H^h(0))] ,$$

where $H^h(V^h)$ simply coincides with the Hamiltonian H^h , while $H^h(0)$ can be identified with H_0^h defined in (4.18). The relation

$$\text{Tr} [F(H^h(V^h))] = \sum_{i \leq N_0} F(\varepsilon_i^h) \geq 0 ,$$

with N_0 given in Lemma 4.5.1, implies

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \leq 2Tr [F(H_0^h)] . \quad (4.61)$$

The explicit expression of the r.h.s. here is

$$Tr [F(H_0^h)] = \sum_{i \leq N_0} F(e_i^h) .$$

The result easily follows by combining (4.61) with the inequality

$$\sum_{i \leq N_0} F(e_i^h) \leq N_0 \sup_{x \in [-\|U\|_{L^\infty}, \varepsilon_S)} F < \infty .$$

■

From equation (4.4) we have

$$\|n[V^h]\|_{H^{-1}(\Omega)} \leq \|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} . \quad (4.62)$$

The forthcoming Corollary is a straightforward consequence of (4.62) and Proposition 4.5.1.

Corollary 4.5.2. *The charge density $n[V^h]$ is bounded in $H^{-1}(\Omega)$ uniformly with respect to h .*

Next we use the assumption (4.16) and Lemma 4.2.1 to get uniform upper bound for the first spectral point of H^h as $h \rightarrow 0$.

Lemma 4.5.3. *For h_0 small enough, the condition*

$$\varepsilon_1^h < \varepsilon_S \quad (4.63)$$

holds for all $h \in (0, h_0]$.

Proof. We use a reductio ad absurdum argument. Let $\bar{h} \in (0, h_0]$ be such that $\varepsilon_1^{\bar{h}} \geq \varepsilon_S$. It follows from (4.2) and from the definition (4.5) that the corresponding charge density, $n[V^{\bar{h}}]$, and, then, the Poisson potential $V^{\bar{h}}$ are null in Ω . In these conditions the Hamiltonians $H^{\bar{h}}$ and $H_0^{\bar{h}}$ coincide and we have

$$\varepsilon_1^{\bar{h}} = e_1^{\bar{h}} \geq \varepsilon_S . \quad (4.64)$$

On the other hand, as it follows from Lemma 4.2.1, we have $e_1^h \rightarrow \inf \sigma(H_0)$ when $h \rightarrow 0$. Then from the assumption (4.16), the condition

$$e_1^{\bar{h}} < \varepsilon_S \quad (4.65)$$

definitely holds for $\bar{h} \rightarrow 0$, which is in contradiction with (4.64). ■

4.6 Semi-classical limit in the case $d = 1$

We are now going to obtain the asymptotic proprieties of the Shrödinger-Poisson system (4.4) - (4.7) for $d = 1$. In this framework, the Sobolev spaces where the solution is define are more regular than in the case $d = 2, 3$, studied in Chapter 5. It gives strong convergence results for the potential, see also [1] and [2]. We have then enough regularity to obtain, in the non linear case, a result of convergence of the spectrum in the idea of Lemma 4.2.1, see also [13]. This allows to determine exactly the limit of the Shrödinger-Poisson system (4.4) - (4.7) when $h \rightarrow 0$.

Such a limit gives an approximation of the solution of our problem considered on an unbounded domain, and the approximation is in agreement with the complete resolution, it was the aim of Chapter 3.

In the one dimensional case, the domain of interest is $\Omega = (0, L)$ where $L > 0$ and the Shrödinger-Poisson system (4.4) - (4.7) can be written as follows : find $V^h \in H^1(0, L)$ such that

$$\begin{cases} (-h^2 \frac{d^2}{dx^2} + U^h + V^h - \varepsilon_i^h) \Psi_i^h = 0, & (0, L) \\ -\frac{d^2}{dx^2} V^h = \sum_{i \geq 1} f(\varepsilon_i^h) |\Psi_i^h|^2, & (0, L) \\ \Psi_i^h(0) = \Psi_i^h(L) = 0, \quad V^h(0) = V^h(L) = 0 \end{cases} \quad (4.66)$$

with $\|\Psi_i^h\|_{L^2(0, L)} = 1$.

Due to (4.2), only a finite number of eigenvectors contributes to the density and therefore $n[V^h] = \sum_{i \geq 1} f(\varepsilon_i^h) |\Psi_i^h|^2$ belongs to $L^1(0, L)$ as a finite sum of L^1 functions. Then, taking into account the embedding $H^1(0, L) \subset C(0, L)$ in dimension 1, the accurate function space for the potential is :

$$BV_0^2(0, L) := \{V \in C(0, L); \quad V'' \in \mathcal{M}_b(0, L), \quad V(0) = V(L) = 0\}$$

where $\mathcal{M}_b(0, L)$ denotes the set of bounded mesures on $(0, L)$. The space $BV_0^2(0, L)$ with the norm :

$$\|V\|_{BV} := \|V\|_{C(0, L)} + \|V''\|_m$$

is a Banach space. Here $\|\mu\|_m = |\mu|(0, L)$ is the strong norm of the bounded mesure μ which is equal to the L^1 norm when $\mu \in L^1(0, L)$.

The result on this space which will be useful in this work is the following (voir [13]) : $\forall \alpha \in (0, 1)$ we have the continuous injections

$$BV_0^2(0, L) \subset W^{1, \infty}(0, L), \quad BV_0^2(0, L) \subset C^{0, \alpha}(0, L) \quad (4.67)$$

where the second injection is compact. Getting the continuous injection $BV_0^2(0, L) \subset W^{1, \infty}(0, L)$ doesn't present real difficulties, the distribution function of a bounded mesure being regular. The second injection is a consequence of the compact embedding $W^{1, \infty}(0, L) \subset C^{0, \alpha}(0, L)$.

We can already give some apriori estimates for the potential and the density.

Proposition 4.6.1. *The density $(n[V^h])_{h \in (0, h_0]}$ is bounded in $\mathcal{M}_b(0, L)$. The potential $(V^h)_{h \in (0, h_0]}$ is bounded in $W^{1, \infty}(0, L)$ and relatively compact in $C^{0, \alpha}(0, L)$ for any $\alpha \in (0, 1)$.*

Proof. We look first for an estimation on the density. Using the normalization condition (4.12), we have :

$$\begin{aligned} \|n[V^h]\|_m &= \int_0^L n[V^h] dx = \sum_{i \geq 1} f(\varepsilon_i^h) \|\Psi_i^h\|_{L^2(0,1)}^2 \\ &\leq N^h \sup_{x \in [-\|U\|_\infty, \varepsilon_S)} f(x) \end{aligned}$$

where N^h denotes the number of eigenvalues of H^h below ε_S . According to Lemma 4.5.1, we have $N^h = \mathcal{O}(1)$ when h tends to 0 and the density is bounded in $\mathcal{M}_b(0, L)$. Concerning the potential V^h , the H_0^1 bound provided by Proposition 4.5.1 with $d = 1$, and the continuous embedding $H_0^1(0, L) \subset C(0, L)$ implies

$$\|V^h\|_{C(0, L)} \leq C, \quad \forall h \in (0, h_0]$$

Then, it follows from the Poisson equation $-(V^h)'' = n[V^h]$ and the bound on the density that

$$\|(V^h)''\|_m = \|n[V^h]\|_m \leq C, \quad \forall h \in (0, h_0]$$

We obtain that $(V^h)_{h \in (0, h_0]}$ is bounded in $BV_0^2(0, L)$ and (4.67) allows to conclude. ■

The density $(n[V^h])_{h \in (0, h_0]}$ being bounded in $\mathcal{M}_b(0, L)$, it is relatively compact in the weak* topology. Therefore, we deduce from Proposition 4.6.1 that for any $0 < \alpha < 1$, it is possible to extract from any infinite set $S \subset (0, h_0]$, which has 0 as an accumulation point, a countable subset D such that $0 \in \overline{D}$ and :

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} (n[V^h] - \mu, \varphi) = 0, \quad \forall \varphi \in C([0, L]) \quad (4.68)$$

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \|V^h - V_0\|_{0, \alpha} = 0, \quad (4.69)$$

for some $\mu \in \mathcal{M}_b(0, L)$ and $V_0 \in C^{0, \alpha}(0, L)$. Here, $\|\cdot\|_{0, \alpha}$ is the usual norm on the Hölder space $C^{0, \alpha}(0, L)$. Then we have the following result on the convergence of the spectrum of H^h :

Lemma 4.6.1. *Consider $0 < \alpha < 1$, $D \subset (0, h_0]$ s.t. $0 \in \overline{D}$ and $V_0 \in C^{0, \alpha}(0, L)$, verifying (4.69). If $\theta = V_0(x_0)$ and N_1 is the greatest integer such that $e_{N_1} + \theta < 0$, then :*

- $\theta \geq 0$ and $N_1 \geq 1$
- For $i = 1, \dots, N_1$

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \varepsilon_i^h = e_i + \theta$$

- For $i \geq N_1 + 1$

$$\liminf_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \varepsilon_i^h \geq 0$$

The proof of this lemma is similar to the one of Lemma 4.2.1 where the nonlinearity have to be considered but without the technical difficulty of eventual multiple eigenvalues, as we will notice in Remark 4.6.2.

Proof. To compare ε_i^h with the asymptotic Hamiltonian on the whole space :

$$H_\theta = -\Delta + U + \theta, \quad D(H_\theta) = H^2(\mathbb{R})$$

we will work at the quantum scale defined in (4.9) and verifying $\Omega^h \rightarrow \mathbb{R}$. In other words, we consider the nonlinearity $\tilde{V}^h$ and the normalized eigenfunctions $\tilde{\Psi}_i^h$ of the operator $\tilde{H}^h$ corresponding to the eigenvalues ε_i^h , where $\tilde{H}^h$ is given by (4.54).

The spectrum of H_θ is equal to

$$\sigma(H_\theta) = \{e_1^\theta, \dots, e_N^\theta\} \cup [\theta, +\infty[$$

where $e_i^\theta := e_i + \theta$.

The $W^{1,\infty}$ bound obtained in Proposition 4.6.1 implies that there exists a constant C such that $\forall h \in (0, h_0]$:

$$|\tilde{V}^h(x) - \tilde{V}^h(y)| \leq Ch|x - y|, \quad \forall x, y \in \Omega^h \quad (4.70)$$

and the condition (4.69) gives :

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} |\tilde{V}^h(0) - \theta| = 0 \quad (4.71)$$

The previous equations are important in our nonlinear framework. Indeed, they asymptotically enable to consider $\tilde{V}^h$ as a constant on a domain outside which the modes of interest are exponentially decaying.

Note that $\theta \geq 0$ is a direct consequence of (4.51) and (4.71).

- Set $\varepsilon \in (-\|U\|_{L^\infty}, 0)$ and define :

$$N^h = \#(\sigma(H^h) \cap (-\infty, \varepsilon]) \quad (4.72)$$

We introduce the family : $u_i^h = \chi^h \tilde{\Psi}_i^h \in D(H_\theta)$, for $i = 1, \dots, N^h$, where $\chi^h(x) = \chi(hx + x_0)$ and $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ is s.t. : $\chi = 1$ on $B(x_0, \frac{R}{2})$ and $\chi = 0$ on $\mathbb{R} \setminus B(x_0, R)$ for a radius $R > 0$ verifying $B(x_0, R) \subset \Omega$.

As seen in the proof of Lemma 4.2.1, the exponential decay (4.39) for $\tilde{\Psi}_i^h$ implies that it is enough to estimate $(H_\theta - \varepsilon_i^h)u_i^h$ to get

$$d(\varepsilon_i^h, \sigma(H_\theta)) 1_{i \leq N^h} \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} 0, \quad (4.73)$$

Now we have

$$(H_\theta - \varepsilon_i^h)u_i^h = -(\Delta \chi^h) \tilde{\Psi}_i^h - 2\nabla \chi^h \cdot \nabla \tilde{\Psi}_i^h - \chi^h(\tilde{V}^h - \theta) \tilde{\Psi}_i^h.$$

The function χ^h being regular and supported where the eigenfunction is exponentially decaying, we have :

$$\|(\Delta\chi^h)\tilde{\Psi}_i^h + 2\nabla\chi^h \cdot \nabla\tilde{\Psi}_i^h\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq Ce^{-\frac{\gamma}{h}}$$

for $C, \gamma > 0$. Then, we define $R^h = R \ln \frac{1}{h}$. For h_0 small enough, we have $B_{R^h} \subset \Omega^h$. Proposition 4.6.1 implies that the potential $\tilde{V}^h$ is bounded in $L^\infty(\Omega^h)$, therefore, we can apply estimate (4.39) to write :

$$\begin{aligned} \left\| \chi^h(\tilde{V}^h - \theta)\tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 &\leq \|\chi\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)}^2 \left(\int_{B_{R^h}} |(\tilde{V}^h - \theta)\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx + \int_{\Omega^h \setminus B_{R^h}} |(\tilde{V}^h - \theta)\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx \right) \\ &\leq C \left(\|\tilde{V}^h - \theta\|_{L^\infty(B_{R^h})}^2 + \int_{\Omega^h} |e^{c_0|x|}\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx e^{-2c_0R^h} \right) \\ &\leq C \|\tilde{V}^h - \theta\|_{L^\infty(B_{R^h})}^2 + \mathcal{O}(e^{-2c_0R^h}) \end{aligned}$$

On the other hand, we deduce from equations (4.70) and (4.71) that $\forall x \in B_{R^h}$

$$|\tilde{V}^h(x) - \theta| \leq |\tilde{V}^h(x) - \tilde{V}^h(0)| + |\tilde{V}^h(0) - \theta| \leq Ch \ln \frac{1}{h} + o(1)$$

when $h \rightarrow 0$, $h \in D$. Here, the asymptotics $o(1)$ doesn't depend on x and therefore

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \chi^h(\tilde{V}^h - \theta)\tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\mathbb{R})} 1_{i \leq N^h} = 0.$$

We remark then that a function $\alpha(h)$ independant of i can be found such that $\alpha(h) \rightarrow 0$ when $h \rightarrow 0$ and

$$\|(H_\theta - \varepsilon_i^h)u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R})} 1_{i \leq N^h} \leq \alpha(h) \quad \forall h \in D. \quad (4.74)$$

and (4.73) follows.

According to Lemma 4.5.3, we have $\varepsilon_1^h < \varepsilon_S$, therefore the application of (4.73) with $\varepsilon = \varepsilon_S$ implies $e_1^\theta < 0$ and $N_1 \geq 1$. This provides the first point of the Lemma.

• Let's make the opposite comparison : we now show that the e_i^θ for $i = 1, \dots, N_1$ are near the spectrum of $\tilde{H}^h$.

Define ϕ_i , $i = 1, \dots, N_1$, as the eigenvectors of H_θ . As noticed in section 4.4, we can use the Agmon distance associated to the potential $(U - e_{N_1})$ to get an estimate similar to (4.39) valid on the whole space :

$$\int_{\mathbb{R}} |e^{c_0|x|}\phi_i|^2 dx + \int_{\mathbb{R}} |e^{c_0|x|}\nabla\phi_i|^2 dx \leq C \quad (4.75)$$

Then, if we set $v_i^h = \chi^h\phi_i \in D(\tilde{H}^h)$, for $i = 1, \dots, N_1$, we have :

$$(\tilde{H}^h - e_i^\theta)v_i^h = -(\Delta\chi^h)\phi_i - 2\nabla\chi^h \cdot \nabla\phi_i + \chi^h(\tilde{V}^h - \theta)\phi_i.$$

Using (4.75), the same computations than in the previous point lead to

$$d(e_i^\theta, \sigma(\tilde{H}^h)) \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} 0. \quad (4.76)$$

In what follows, we consider $\varepsilon \in (e_{N_1}^\theta, 0)$ and N^h the corresponding integer given by relation (4.72).

From Lemma 4.5.1, we have $N^h = \mathcal{O}(1)$. Then, taking into account the results (4.73) and (4.76) above, we can already deduce that the following statement holds : for all $\delta > 0$ small, $\exists h_1$ s.t. $\forall h \in D \cap (0, h_1]$ we have, even if the numerotation of the eigenvalues has to be changed, for $k = 1, \dots, N_1$

$$\varepsilon_1^h, \dots, \varepsilon_{N_k}^h \in [e_k^\theta - \delta, e_k^\theta + \delta] \quad (4.77)$$

where $N_k \geq 1$ is an integer depending on h such that $\sum_{k=1}^{N_1} N_k = N^h$. This implies $N^h \geq N_1$ and if we obtain $N^h \leq N_1$, $\forall h \in D \cap (0, h_1]$, the proof will be completed.

- Consider $I = [-||U||_{L^\infty}, \varepsilon]$ and $a > 0$ small enough so that

$$\sigma(H_\theta) \cap ((I + B(0, 2a)) \setminus I) = \emptyset.$$

Let E be the vector space spanned by $u_1^h, \dots, u_{N^h}^h$ and F the spectral subspace associated to $\sigma(H_\theta) \cap I$. From the estimate (4.28), the matrix $M = ((u_i^h, u_j^h)_{L^2(\mathbb{R})})_{1 \leq i, j \leq N^h}$ verifies

$$M = I + o(1)$$

when $h \rightarrow 0$ and the u_i^h are linearly independant. Then, equation (4.74) and Theorem 4.3.7 give

$$d(E, F) \leq \left(\frac{N^h}{\lambda_{\min}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\alpha(h)}{a}, \quad \forall h \in D$$

where $\lambda_{\min}$ is the smallest eigenvalue of M . As we already noticed, $N^h = \mathcal{O}(1)$ and therefore :

$$d(E, F) \leq C\alpha(h) \leq \frac{1}{2}$$

for all $h \in D \cap (0, h_1]$ with h_1 small enough. Then, Lemma 4.3.6 gives $N^h \leq N_1$. ■

Remark 4.6.2. For $\theta \geq 0$, an eigenvector of $H_\theta = -\Delta + U + \theta$, $H_\theta = H^2(\mathbb{R})$, corresponding to an eigenvalue $e_i + \theta$, $1 \leq i \leq N$, verifies :

$$-y'' = e_i y, \quad |x| \geq L$$

and tends to 0 when $|x|$ tends to $+\infty$. One of the two solutions of the previous equation is unbounded on $|x| \geq L$ and therefore $e_i + \theta$ is of multiplicity one.

In what follows, we give, for a set D verifying (4.68) and (4.69), the limit problem when $h \rightarrow 0$. Then the unicity of the limit allows to determine the asymptotics of the solution of (4.66) when $h \rightarrow 0$.

Proposition 4.6.2. *Consider $0 < \alpha < 1$, $D \subset (0, h_0]$ s.t. $0 \in \overline{D}$, $\mu \in \mathcal{M}_b(0, L)$ and $V_0 \in C^{0,\alpha}(0, L)$ verifying (4.68) and (4.69). Then, we have*

$$\mu = \sum_{i \geq 1} f(e_i + V_0(x_0)) \delta_{x_0} \quad (4.78)$$

and the potential V_0 is solution of the problem

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2} V_0 = \mu, & (0, L) \\ V_0(0) = V_0(L) = 0 \end{cases} \quad (4.79)$$

Proof. Set $\theta = V_0(x_0)$ and take $\varepsilon \in (e_{N_1} + \theta, 0)$ such that $\varepsilon > \varepsilon_S$, where N_1 is the integer defined in Lemma 4.6.1. Then, from Lemma 4.6.1, we have for some constant $h_1 > 0$:

$$\#(\sigma(H^h) \cap (-\infty, \varepsilon]) = N_1, \quad \forall h \in D \cap (0, h_1]$$

and the density can be written as follows :

$$\sum_{i=1}^{N_1} f(\varepsilon_i^h) |\Psi_i^h|^2$$

where $\varepsilon_i^h < \varepsilon$. Using the normalization (4.12) and Lemma 4.3.2, we get that $|\Psi_i^h|^2 dx$ is of mass 1 and concentrates around x_0 . It implies that for $i = 1, \dots, N_1$

$$\int_{\Omega} |\Psi_i^h|^2 \varphi \, dx \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} \varphi(x_0), \quad \forall \varphi \in C([0, L]). \quad (4.80)$$

(more details will be given in the proof of Theorem 5.2.1). In other words, $(|\Psi_i^h|^2 dx)_{h \in D}$ converges, for the weak* topology on the space of bounded measures on $(0, L)$, to a Dirac function at $x_0 : \delta_{x_0}$.

We note that Lemma 4.6.1 also gives for $i = 1, \dots, N_1$:

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \varepsilon_i^h = e_i + \theta$$

Then, from the unicity of the limit (4.68), we get the result (4.78) using the convergence (4.80) and the continuity of f . We recall that we made the convention $e_i = 0$ for $i \geq N + 1$.

On the other hand, the convergence (4.68), (4.69) is also valid in $\mathcal{D}'(0, L) : \forall \varphi \in C_0^\infty(0, L)$

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} (n[V^h] - \mu, \varphi) = 0, \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} (V^h - V_0, \varphi) = 0$$

From the Poisson equation $-\frac{d^2}{dx^2} V^h = n[V^h]$, $\forall h \in (0, h_0]$ and the continuity of the derivative on $\mathcal{D}'(0, L)$, we get

$$-\frac{d^2}{dx^2} V_0 = \mu, \quad \mathcal{D}'(0, L)$$

As a consequence of (4.69), the potential V^h tends to V_0 strongly in $C^{0,\alpha}(0, L)$, then the boundary conditions appearing in the problem (4.79) follows from

$$V_0(x) = \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} V^h(x)$$

for $x = 0$ and $x = L$. ■

Theorem 4.6.3. *The nonlinearity $(V^h)_{h \in (0, h_0]}$ is bounded in $W^{1,\infty}(0, L)$ and tends, strongly in $C^{0,\alpha}(0, L)$, $\forall \alpha \in (0, 1)$, to the potential V_0 given by*

$$V_0(x) = \begin{cases} \left(\sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) \right) \left(1 - \frac{x_0}{L} \right) x, & 0 < x \leq x_0 \\ \left(\sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) \right) \frac{x_0}{L} (L - x), & x_0 < x < L \end{cases} \quad (4.81)$$

where $\{e_i\}_{1 \leq i \leq N}$ is the discrete spectrum of H_0 , $e_{i \geq N+1} = 0$ and θ is the unique solution of the nonlinear equation $\theta = x_0 \left(1 - \frac{x_0}{L} \right) \sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta)$.

The density $(n[V^h])_{h \in (0, h_0]}$ tends to the measure

$$\mu = \sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) \delta_{x_0}. \quad (4.82)$$

in the weak* topology on $\mathcal{M}_b(0, L)$.

Proof. The $W^{1,\infty}(0, L)$ bound for the potential was already obtained in Proposition 4.6.1.

Now, let α be a constant in $(0, 1)$.

Consider $D \subset (0, h_0]$ s.t. $0 \in \overline{D}$, $\mu \in \mathcal{M}_b(0, L)$ and $V_0 \in C^{0,\alpha}(0, L)$ verifying (4.68) and (4.69). Then, applying Proposition 4.6.2, the potential V_0 verifies the problem (4.78)(4.79), and it can be computed explicitly as a function of $\theta := V_0(x_0)$ by solving the following transmission problem :

$$\begin{cases} -(V_0)'' = 0, & (0, x_0) \cup (x_0, L) \\ V_0(0) = V_0(L) = 0 \end{cases}$$

with the jump conditions :

$$\begin{cases} V_0(x_0^-) = V_0(x_0^+) \\ V_0'(x_0^+) - V_0'(x_0^-) = -(\sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta)) \end{cases}$$

The formula (4.81) for V_0 follows. Then, equation (4.81) considered at $x = x_0$ implies that the value θ of the potential V_0 at x_0 , is solution of :

$$\theta - x_0 \left(1 - \frac{x_0}{L} \right) \sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) = 0 \quad (4.83)$$

According to the first point in Lemma 4.6.1, we have $V_0(x_0) \geq 0$ and we are interested in non negative solutions of (4.83). If we call $G(\theta)$ the l.h.s. of this equation, we remark that G is a continuous, strictly increasing function on $[0, +\infty)$ and such that $\lim_{\theta \rightarrow +\infty} G(\theta) = +\infty$. Therefore, it defines a bijection from $[0, +\infty)$ to $[G(0), +\infty)$. We have $G(0) = -x_0(1 - \frac{x_0}{L}) \sum_{i \geq 1} f(e_i) < 0$ and $G(\varepsilon_S - e_1) = \varepsilon_S - e_1 > 0$ by the assumption (4.16). We deduce that there exists a unique value $\theta \geq 0$ solving (4.83), moreover, it verifies $\theta \in (0, \varepsilon_S - e_1)$.

It follows that the function V_0 (resp. μ) verifying (4.69) (resp. (4.68)) is given in an unique way by (4.81) (resp. (4.82)) where θ is the positive solution of (4.83). This gives the convergence results announced in our theorem.

Indeed, suppose that the convergence doesn't occure. Then, there exists a function $\varphi_0 \in C([0, L])$, a constant $\varepsilon > 0$ and a set $S \subset (0, h_0]$ s.t. $0 \in \overline{S}$ verifying :

$$\|V^h - V_0\|_{0,\alpha} + |(n[V^h] - \mu, \varphi_0)| \geq \varepsilon, \quad \forall h \in S \quad (4.84)$$

By applying Proposition 4.6.1, we can extract a $D \subset S$ s.t. $0 \in \overline{D}$ and (4.68), (4.69) are verified for some functions $\tilde{\mu} \in \mathcal{M}_b(0, L)$ and $\tilde{V}_0 \in C^{0,\alpha}(0, L)$. Then, according to the previous uniqueness result $\tilde{\mu} = \mu$ and $\tilde{V}_0 = V_0$ and we get a contradiction comparing (4.68), (4.69) with (4.84). ■

Remark 4.6.4. In the proof of Theorem 4.6.3 above, we have shown that the solution θ of (4.83) is in the interval $(0, \varepsilon_S - e_1)$. The condition $\theta \geq 0$ implies that the sum $\sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta)$ is finite. Although the bound $\theta < \varepsilon_S - e_1$ has no impact on the proof, it gives that $\sum_{i \geq 1} f(e_i + \theta) > 0$, and therefore, that the limit potential V_0 and density μ are not trivial. We deduce that Theorem 4.6.3 provides a non trivial approximation of the solution V^h of the problem (4.66), in dimension $d = 1$, in the semi-classical limit $h \rightarrow 0$. It is not the case anymore in dimension $d = 2$ and 3 as it will appear in Chapter 5.

Bibliography

- [1] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells I. Prépublication IRMAR, 07-02 (2007), to appear in Ann. I.H.P. An. Non Linéaire.
- [2] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells II. Prépublication IRMAR, 07-03 (2007), to appear in J. Math. Soc. of Japan.
- [3] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, Y. Patel. Computing the steady states for an asymptotic model of quantum transport in resonant heterostructures. Journal of Computational Physics, **219**(2), 644-670, 2006.
- [4] M. Dimassi, J. Sjöstrand, Spectral Asymptotics in the semi-classical limit, Cambridge University Press, 1999.
- [5] Golub, Van-Loan, Matrix Computation, Johns Hopkins University Press (1983).
- [6] B. Helffer, Semi-Classical Analysis for the Schrödinger Operator and Applications, Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, vol.13.
- [7] B. Helffer, J. Sjöstrand, Multiple wells in the semi-classical limit I, Comm. In PDE, **9**(4), 337-348, 1984.
- [8] P.D. Hislop, I.M. Sigal, Introduction to Spectral Theory with Applications to Schrödinger Operators. Springer, 1991.
- [9] G. Jona-Lasinio, C. Presilla, J. Sjöstrand. On Schrödinger equations with concentrated nonlinearities. Ann. Phys., **240**(1), 1-21, 1995.
- [10] J. Kastrup et al. Self-oscillations of domains in doped GaAs-Al-As superlattices. Phys. Rev. B, **52**(19), 13761-13764, 1995.
- [11] F. Nier, A variational formulation of Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$, Comm. Part. Diff. Eq. **18**(7-8), 1125-1147, 1993.
- [12] F. Nier, Accurate WKB approximation for a 1D problem with low regularity, Serdica Mathematical Journal, **34**(1) 113-126, 2008.
- [13] Y. Patel, Développement de modèles macroscopiques pour des systèmes quantiques hors équilibre. PhD Thesis, University of Rennes I, 2005.
- [14] C. Presilla, J. Sjöstrand. Transport properties in resonant tunneling heterostructures. J. Math. Phys., **37**(10), 4816-4844, 1996.36.
- [15] M. Reed, B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics Vol. IV : Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1978.

- [16] B. Simon, Trace Ideals and their Applications, Cambridge University Press, London, 1979.

Chapitre 5

Semi-classical limit of the Schrödinger-Poisson system in dimension $d = 2$ and 3

The work presented here was done in common with

A. Mantile¹, F. Nier²

and a very similar version of this chapter was accepted in the journal Asymptotic Analysis with the title

Double scale analysis of a Schrödinger-Poisson system with quantum wells and macroscopic nonlinearities in dimension 2 and 3.

5.1 Introduction

In this Chapter, we consider the Schrödinger-Poisson problem introduced in section 4.1 for $d = 2$ and $d = 3$. A first step in the extension of this analysis to the multidimensional case consists in a good understanding of the thermodynamical equilibrium where the occupation numbers of the quantum states are given by a decreasing function of the energy.

We recall that the partition function f is such that only the quantum states confined in the well have an effect on the nonlinearity. This provides asymptotically a strict separation of the quantum and macroscopic scales with some nonlinear spectral renormalization which depends on the dimension $d = 2$ or $d = 3$.

¹IRMAR, UMR - CNRS 6625, Université Rennes 1, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex, France.

²IRMAR, UMR - CNRS 6625, Université Rennes 1, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex, France.

We will use the same nonlinear apriori estimates, semiclassical and spectral techniques used in Chapter 4. The outline of this Chapter is the following. We end this section by stating our results. In section 5.2, asymptotic estimates for the nonlinear problem are given. The Section 5.3 studies the possible asymptotic nonlinear system in dimension $d = 3$ and ends the proof of the main result in this case. The analysis of the bidimensional problem is completed in Section 5.4, with a different renormalization process. In Appendix 5.A, some standard results are adapted to our case, and in Appendix 5.B, some details are given about the asymptotic nonlinear system in dimension $d = 3$.

Results

The aim of this analysis is to understand the asymptotic behaviour of the unitarily equivalent systems (4.4) - (4.7) and (4.10) as $h \rightarrow 0$. This in order to provide a simplified modelling for the nonlinearities produced by charged particles confined in quantum wells ($d = 3$), wires ($d = 2$) or layers ($d = 1$). Such a program has been carried out in [2], [3] and [11] with efficient numerical applications in [4] for out-of-equilibrium 1D problem. A variation of it provides the result of Theorem 4.6.3, for the present 1D-Dirichlet problem with $\Omega = (0, L)$, that we recall there : the Poisson potential V^h is uniformly bounded in $W^{1,\infty}(\Omega)$ and converges in $C^{0,\alpha}(\Omega)$, $\alpha \in (0, 1)$, to V_0 defined by

$$V_0(x) = \begin{cases} \left(\sum_{i \geq 1} f(e_i + \beta) \right) \left(1 - \frac{x_0}{L} \right) x, & 0 < x \leq x_0, \\ \left(\sum_{i \geq 1} f(e_i + \beta) \right) \frac{x_0}{L} (L - x), & x_0 < x < L, \end{cases}$$

where $\{e_i, i \geq 1\}$ is the point spectrum of H_0 and β is the unique solution to the nonlinear equation $\beta = x_0 \left(1 - \frac{x_0}{L} \right) \sum_{i \geq 1} f(e_i + \beta)$.

Hence for the 1D problem, the nonlinear effect produced at the quantum scale remains visible at the macroscopic scale in the limit $h \rightarrow 0$. This is no more the case in dimension $d > 1$. Indeed, due to the different behaviour of the Green function of the Laplace operator in dimension $d = 2$ and $d = 3$, the potential at the classical scale V^h is expected to converge to 0 as $h \rightarrow 0$, although a simple ad absurdum argument shows that some nonlinearity still affects asymptotically the spectrum of the quantum Hamiltonian. The complete description of this requires the analysis of the asymptotic behaviour of both V^h and $\tilde{V}^h$. Again the differences of the Green functions of the Laplace operator in dimension $d = 2$ and $d = 3$ require different kind of arguments and lead to different results : a renormalization of the logarithmic divergence has to be introduced in dimension 2, not in dimension 3.

Our main results, whose proofs are given in Sections 3 and 4, gather the asymptotic informations for the 3D and 2D cases.

Theorem 5.1.1. *Let $d = 3$ and let V^h (resp. $\tilde{V}^h$) solve (4.4)(4.5)(4.7) (resp. (4.10))*

1. *The potential at the classical scale, V^h , converges strongly to 0 in $H_0^1(\Omega)$:*

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O}(h^{1/2}) .$$

2. *By fixing the threshold ε_S associated with f , there exists a unique $(A, W) \in (0, +\infty) \times \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ such that $\varepsilon_S = \inf \sigma(-\Delta + U + W)$ and*

$$\begin{cases} [-\Delta + U + W] \chi = \varepsilon_S \chi, & \text{with } \chi \in H^2(\mathbb{R}^3), \|\chi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1, \\ -\Delta W = A |\chi|^2 . \end{cases} \quad (5.1)$$

3. *With above notations, the potential at the quantum scale $\tilde{V}^h$ satisfies*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - W\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} = 0 .$$

4. *There exists $h_1 > 0$ such that the eigenvalues ε_i^h are larger than ε_S and $f(\varepsilon_i^h) = 0$ for all $i \geq 2$ and all $h \leq h_1$. The particle density at the quantum scale, $h^{-1} \sum_{i \in \mathbb{N}} f(\varepsilon_i^h) |\tilde{\Psi}_i^h|^2 = h^{-1} f(\varepsilon_1^h) |\tilde{\Psi}_1^h|^2$ for $h \leq h_1$, satisfies*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|1_{\Omega^h} h^{-1} f(\varepsilon_1^h) |\tilde{\Psi}_1^h|^2 - A |\chi|^2\|_{L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)} = 0 .$$

Remark 5.1.2. The third statement prevents $V^h(x) = \tilde{V}^h(\frac{x-x_0}{h})$ from converging to 0 in the L^∞ -norm.

Theorem 5.1.3. *Let $d = 2$ and let V^h (resp. $\tilde{V}^h$) solve (4.4)(4.5)(4.7) (resp. (4.10))*

1. *The potential at the classical scale, V^h , converges strongly to 0 in $H_0^1(\Omega)$*

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{|\ln h|}\right) .$$

2. *Take the threshold ε_S associated with f and $e_1 = \inf \sigma(-\Delta + U)$ and set $\theta = \varepsilon_S - e_1$. Then the potential $\tilde{V}^h$ at the quantum scale satisfies*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\tilde{V}^h - \theta\|_{L^\infty(\{|x| \leq -\kappa \ln h\})} = 0$$

for any fixed $\kappa > 0$.

3. *There exists $h_1 > 0$ such that the eigenvalues ε_i^h are larger than ε_S and $f(\varepsilon_i^h) = 0$ for all $i \geq 2$ and all $h \leq h_1$. The particle density at the quantum scale, $\sum_{i \in \mathbb{N}} f(\varepsilon_i^h) |\tilde{\Psi}_i^h|^2 = f(\varepsilon_1^h) |\tilde{\Psi}_1^h|^2$ for $h \leq h_1$, satisfies*

$$\begin{aligned} \left\| 1_{\Omega^h} f(\varepsilon_1^h) |\tilde{\Psi}_1^h|^2 \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \mathcal{O}(|\ln h|^{-1}) , \\ \lim_{h \rightarrow 0} |\ln h| \left\| 1_{\Omega^h} f(\varepsilon_1^h) |\tilde{\Psi}_1^h|^2 \right\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} &= \lim_{h \rightarrow 0} |\ln h| f(\varepsilon_1^h) = 2\pi\theta . \end{aligned}$$

Remark 5.1.4. Contrarily to the 3D case, the total charge in the quantum well converges to 0 but still has a spectral effect due to the logarithmic divergence of the Green function of the Laplace operator.

5.2 Asymptotic estimates in dimension $d = 2, 3$

We give some preliminary results related to the asymptotic behaviour for $h \rightarrow 0$ of the charge density and the eigenvalues related to the Schrödinger-Poisson problem. In this Section our investigation is confined to the 2D and the 3D case. The classical or the quantum scale pictures will be alternatively adopted depending on the strategies of the proofs.

First, we focus our attention on the Schrödinger-Poisson problem at the classical scale. We use results of section 4.5 and the estimates in Lemma 4.3.2 to get asymptotic proprieties for the spectral points of H^h as $h \rightarrow 0$.

Theorem 5.2.1. *The spectral points $\varepsilon_{i \leq N_0}^h$ fulfill the condition*

$$\liminf_{h \rightarrow 0} \varepsilon_i^h \geq \varepsilon_S. \quad (5.2)$$

In particular, for $i = 1$ we have

$$\lim_{h \rightarrow 0} \varepsilon_1^h = \varepsilon_S. \quad (5.3)$$

Proof. We work in the classical scale. Since $(|\Psi_1^h|^2)_{h \in (0, h_0]}$ is a family of probability measures it is weakly relatively compact in the set of bounded non negative Radon measures on Ω with total mass ≤ 1 . We first check that it converges to δ_{x_0} with the help of exponential decay estimates. From Lemma 4.5.3, it is known that $\varepsilon_1^h < \varepsilon_S$ for all $h \in (0, h_0]$. Thus we can apply the estimates (4.27) to write

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} |\Psi_1^h|^2 \varphi \, dx \right| &\leq \int_{\text{supp } \varphi} |\varphi| e^{-2\phi/h} |e^{\phi/h} \Psi_1^h|^2 \, dx \\ &\leq \|\varphi\|_{L^\infty} \|e^{\phi/h} \Psi_1^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \sup_{x \in \text{supp } \varphi} e^{-2\phi/h} \leq C \|\varphi\|_{L^\infty} \sup_{x \in \text{supp } \varphi} e^{-\phi/h} \end{aligned}$$

for any $\varphi \in L^\infty(\Omega)$, while $\phi(x)$ is the Agmon distance from the support of the potential well defined by the relation (4.29). When $\text{supp } \varphi$ is a compact set in $\Omega \setminus \{x_0\}$, the inequality (4.37) says that there exists $c_\varphi > 0$ such that

$$\left| \int_{\Omega} |\Psi_1^h|^2 \varphi \, dx \right| \leq C \|\varphi\|_{L^\infty} e^{-c_\varphi/h}, \quad (5.4)$$

holds for $h > 0$ small enough. By taking the limit as $h \rightarrow 0$, we get

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left| \int_{\Omega} |\Psi_1^h|^2 \varphi \, dx \right| = 0$$

for all continuous function $\varphi \in C^0(\overline{\Omega})$ with $\text{supp } \varphi \subset \Omega \setminus \{x_0\}$. Hence the probability measure $|\Psi_1^h|^2$ converges in the narrow sense to δ_{x_0}

$$\int_{\Omega} |\Psi_1^h|^2 \varphi \, dx \xrightarrow{h \rightarrow 0} \varphi(x_0), \quad \forall \varphi \in C^0(\overline{\Omega}). \quad (5.5)$$

As a consequence of Corollary 4.5.2, the charge density : $n[V^h] = \sum_{i \leq N_0} f(\varepsilon_i^h) |\Psi_i^h|^2$ is uniformly bounded in $H^{-1}(\Omega)$ as $h \rightarrow 0$. Let $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ with ε_0 small enough, and consider the test function

$$\varphi_\varepsilon(x) = \chi(x) \phi_\varepsilon \left(\frac{|x - x_0|}{2R} \right), \quad x \in \Omega,$$

where $R = \sup_{x \in \Omega} |x - x_0|$, $\chi \in C_0^\infty(\Omega)$ such that $\chi(x_0) = 1$, and

$$\phi_\varepsilon(u) = \left(\ln \frac{1}{\varepsilon} \right)^\alpha 1_{[0, \varepsilon]}(u) + \left(\ln \frac{1}{u} \right)^\alpha 1_{(\varepsilon, \frac{1}{2}]}(u),$$

with $0 < \alpha < \frac{d-1}{2}$. This function is continuous on $\overline{\Omega}$ and in dimension $d = 2$ or 3 there exists $C_\Omega > 0$ such that

$$\forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_0], \quad \|\varphi_\varepsilon\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C_\Omega.$$

We get

$$f(\varepsilon_1^h) \int_{\Omega} |\Psi_1^h|^2 \varphi_\varepsilon \, dx \leq \|n[V^h]\|_{H^{-1}(\Omega)} \|\varphi_\varepsilon\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C'_\Omega.$$

Taking into account the condition : $\varphi_\varepsilon(x_0) = \left(\ln \frac{1}{\varepsilon} \right)^\alpha$, the previous relation leads us to : $\limsup_{h \rightarrow 0} f(\varepsilon_1^h) \leq C'_\Omega |\ln \varepsilon|^{-\alpha}$, for any $\varepsilon > 0$, which implies

$$\lim_{h \rightarrow 0} f(\varepsilon_1^h) = 0.$$

Finally, making use of $\varepsilon_i^h \geq \varepsilon_1^h$ and $f' \leq 0$, we get

$$\lim_{h \rightarrow 0} f(\varepsilon_i^h) = 0. \tag{5.6}$$

■

Remark 5.2.2. The informations given in the previous Theorem can be used to obtain some insight about the singularity of the Poisson potential V^h in the limit $h \rightarrow 0$. Indeed, due to relation (5.6), the charge density converges to zero in the weak* topology of $H^{-1}(\Omega)$. Moreover, we know from Proposition 4.5.1 that the sequence of Poisson potentials V^h is uniformly bounded in $H_0^1(\Omega)$ and, up to extraction, weakly convergent in this space. From the equation

$$-\Delta V^h = n[V^h],$$

and the continuity of $-\Delta$ on the space of distributions $\mathcal{D}'$, we obtain that V^h is weakly convergent to zero in $H_0^1(\Omega)$. Fixing $p \in [1, 6)$ in dimension $d = 3$ or $p \in [1, +\infty)$ in dimension $d = 2$, the previous result and the compact injection $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$ (e.g. in [5]), give the convergence $V^h \rightarrow 0$ in the strong L^p -norm sense. However, the asymptotic condition (5.3) implies that, in the limit $h \rightarrow 0$, the Poisson potential produces a non null spectral perturbation of the limit Hamiltonian – given by H_0 (4.14) at the quantum scale. For this reason we expect that $V^h \not\rightarrow 0$

in $L^\infty(\Omega)$.

Furthermore, we have some strong convergence for the density : using the normalization (4.12) of the eigenfunctions, we can write

$$\|n[V^h]\|_{L^1(\Omega)} \leq \sum_{i \leq N_0} f(\varepsilon_i^h)$$

and, applying (5.6), we obtain that $n[V^h] \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0$ strongly in $L^1(\Omega)$ (and therefore strongly in the space of bounded measures $\mathcal{M}_b(\Omega)$).

We now return to the quantum scale setting. Let us denote with A_i^h

$$A_i^h = h^{2-d} f(\varepsilon_i^h). \quad (5.7)$$

With this notations, the charge density at the quantum scale is described by

$$\rho^h = \sum_{i \leq N_0} A_i^h \left| \tilde{\Psi}_i^h \right|^2, \quad h \in (0, h_0], \quad (5.8)$$

and our system writes as

$$\begin{cases} \left(-\Delta + U + \tilde{V}^h \right) \tilde{\Psi}_i^h = \varepsilon_i^h \tilde{\Psi}_i^h, & \text{in } \Omega^h \\ -\Delta \tilde{V}^h = \rho^h, & \text{in } \Omega^h \\ \tilde{V}^h|_{\partial\Omega^h} = 0, \quad \tilde{\Psi}_i^h|_{\partial\Omega^h} = 0 \end{cases}; \quad h \in (0, h_0]. \quad (5.9)$$

Lemma 5.2.3. *The coefficients $A_{i \leq N_0}^h$ show the following properties :*

- In dimension $d = 3$: the set $\{A_{i \leq N_0}^h, h \in (0, h_0]\}$ is uniformly bounded w.r.t. h .
 - In dimension $d = 2$: the set $\{A_{i \leq N_0}^h \ln \frac{1}{h}, h \in (0, h_0]\}$ is uniformly bounded w.r.t. h .
- where $(0, h_0]$ is a suitable right neighbourhood of the origin.

Proof. First notice that, if $\varepsilon_i^h \geq \varepsilon_S$, we have : $A_i^h = 0$ and the statement is trivial. Thus, we can assume in what follows : $\varepsilon_i^h < \varepsilon_S$. This allows us to apply the estimates (4.39) and (4.40) to the eigenvectors $\tilde{\Psi}_{i \leq N_0}^h$ in the limit $h \rightarrow 0$. Let B_r denotes the ball of radius r centered in the origin of $\mathbb{R}^d$; for $h \rightarrow 0$, the condition : $B_r \subset \Omega^h$ definitely holds, and we can write

$$1 = \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)}^2 = \int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx + \int_{\Omega^h \setminus B_r} e^{-2c_0|x|} |e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h|^2 dx.$$

Corollary 4.3.5 gives an estimate for the r.h.s. of this expression

$$\int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx + \int_{\Omega^h \setminus B_r} e^{-2c_0|x|} |e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h|^2 dx \leq \int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx + C e^{-2c_0 r}.$$

Fixing r such that $Ce^{-2c_0r} \leq \frac{1}{2}$, which is always possible for h_0 close enough to the origin, the previous relations implies

$$\int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx \geq \frac{1}{2}, \quad \forall h \in (0, h_0]. \quad (5.10)$$

This relation can be used to get an estimate for the potential $\tilde{V}^h$ inside B_r . Indeed, from Lemma 4.5.3, we have

$$\varepsilon_S > \varepsilon_1^h, \quad \forall h \in (0, h_0].$$

Moreover, it follows from the relation

$$\varepsilon_1^h = \left(\tilde{\Psi}_1^h, \tilde{H}^h \tilde{\Psi}_1^h \right)_{L^2(\Omega^h)},$$

that

$$\varepsilon_S > \varepsilon_1^h \geq -\|U\|_{L^\infty} + \left(\inf_{x \in B_r} \tilde{V}^h \right) \int_{B_r} |\tilde{\Psi}_1^h|^2 dx \geq -\|U\|_{L^\infty} + \frac{1}{2} \inf_{x \in B_r} \tilde{V}^h,$$

which implies

$$\inf_{x \in B_r} \tilde{V}^h \leq C, \quad (5.11)$$

with $C > 0$.

Let us denote with I_{B_r} the characteristic function of the ball B_r and with W^h the solution to the following problem

$$\begin{cases} -\Delta W^h = \rho_r & \text{in } \Omega^h \\ W^h|_{\partial\Omega^h} = 0 \end{cases}$$

with

$$\rho_r = I_{B_r} \sum_{i \leq N_0} A_i^h |\tilde{\Psi}_i^h(x)|^2.$$

Notice that

$$\rho^h \geq \rho_r \quad \text{on } \Omega^h.$$

Therefore, by applying the maximum principle to the equation

$$\begin{cases} -\Delta (\tilde{V}^h - W^h) = \rho^h - \rho_r & \text{in } \Omega^h, \\ (\tilde{V}^h - W^h)|_{\partial\Omega^h} = 0, \end{cases}$$

we get $\tilde{V}^h \geq W^h$ in Ω^h . The strategy of our proof is to show that the lower bound on B_r for W^h depends on the sum $\sum_{i \leq N_0} A_i^h$ in the 3-D case, or $\ln \frac{1}{h} \sum_{i \leq N_0} A_i^h$ in the 2-D case. We will consider the 3-D and the 2-D cases separately.

Let $d = 3$. In order to obtain a lower bound for the function W^h , we compare W^h with $G * \rho_r$, where $G = \frac{1}{4\pi|x|}$ is the Green kernel of the Laplacian in $\mathbb{R}^3$ while $*$ denotes the convolution operation. The difference $W^h - G * \rho_r$ solves the problem

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \text{in } \Omega^h, \\ u|_{\partial\Omega^h} = -G * \rho_r|_{\partial\Omega^h}. \end{cases} \quad (5.12)$$

Recalling that $G * \rho_r$ is a positive function, the maximum principle applied to (5.12) leads to

$$(W^h - G * \rho_r) \geq - \sup_{x \in \partial\Omega^h} (G * \rho_r) \quad \text{in } \Omega^h,$$

from which we have

$$W^h \geq G * \rho_r - \sup_{x \in \partial\Omega^h} (G * \rho_r) \quad \text{in } \Omega^h. \quad (5.13)$$

- For $x \in \partial\Omega^h$ we have : $|x| \sim \mathcal{O}(\frac{1}{h})$ as $h \rightarrow 0$. Take $R = d(B(x_0, R), \partial\Omega)$ in the classical scale. Then at the quantum scale, the inequality

$$|x - y| \geq \frac{R}{h}, \quad \forall y \in B_r, \quad (5.14)$$

holds for any $h \in (0, h_0]$. Using (5.14) we get

$$\begin{aligned} G * \rho_r|_{\partial\Omega^h} &= \frac{1}{4\pi} \sum_{i \leq N_0} A_i^h \int_{B_r} \frac{1}{|x - y|} |\tilde{\Psi}_i^h(y)|^2 dy \Big|_{\partial\Omega^h} \\ &\leq \frac{h}{4\pi R} \sum_{i \leq N_0} A_i^h \int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h(y)|^2 dy \leq \frac{h}{4\pi R} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right). \end{aligned} \quad (5.15)$$

- For $x, y \in B_r \rightarrow \frac{1}{|x - y|} \geq \frac{1}{2r}$. From this condition and (5.10) it follows

$$G * \rho_r|_{B_r} \geq \frac{1}{8\pi r} \sum_{i \leq N_0} A_i^h \int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h(y)|^2 dy \geq \frac{1}{16\pi r} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right). \quad (5.16)$$

Making use of (5.13), (5.15) and (5.16), and assuming $h \rightarrow 0$, we get

$$\begin{aligned} W^h|_{B_r} &\geq \frac{1}{16\pi r} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right) - \frac{h}{4\pi R} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right) = \frac{1}{16\pi r} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right) \left(1 - \frac{4r}{R} h \right) \\ &\geq \frac{1}{32\pi r} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Recalling that $\tilde{V}^h \geq W^h$ on Ω^h , it follows from the last inequality that

$$\tilde{V}^h|_{B_r} \geq \frac{1}{32\pi r} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right), \quad \forall h \in (0, h_0]. \quad (5.18)$$

Combining this condition with (5.11) we get a uniform bound for $\sum_{i \leq N_0} A_i^h$ as $h \in (0, h_0]$. This concludes the proof in the 3-D case.

The 2-D case follows essentially the same line. Nevertheless, it is worthwhile to notice that the Green kernel of the 2-D Laplacian, $G(x) = -\frac{1}{2\pi} \ln|x|$, does not have a fixed sign. Therefore, relation (5.13) will be replaced by

$$W^h \geq G * \rho_r + \inf_{x \in \Omega^h} (-G * \rho_r) \quad \text{in } \Omega^h,$$

while (5.15) and (5.16) respectively by

$$\begin{aligned} -G * \rho_r|_{\partial\Omega^h} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{i \leq N_0} A_i^h \int_{B_r} \ln|x-y| |\tilde{\Psi}_i^h(y)|^2 dy \Big|_{\partial\Omega^h} \geq \frac{1}{2\pi} \ln \frac{R}{h} \sum_{i \leq N_0} A_i^h \int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h(y)|^2 dy \\ &\geq \frac{1}{4\pi} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right) \left(\ln R + \ln \frac{1}{h} \right), \end{aligned}$$

and

$$G * \rho_r|_{B_r} \geq \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{2r} \sum_{i \leq N_0} A_i^h \int_{B_r} |\tilde{\Psi}_i^h(y)|^2 dy \geq \frac{1}{4\pi} \left(\sum_{i \leq N_0} A_i^h \right) \ln \frac{1}{2r}.$$

■

Remark 5.2.4. The previous result confirms the relation (5.6) obtained in the proof of Theorem 5.2.1. Moreover, it allows to establish a precise asymptotic order for $f(\varepsilon_{i \leq N_0}^h)$ when $h \rightarrow 0$

- In dimension 3 : $f(\varepsilon_{i \leq N_0}^h) = \mathcal{O}(h)$.
- In dimension 2 : $f(\varepsilon_{i \leq N_0}^h) = \mathcal{O}\left(\left(\ln \frac{1}{h}\right)^{-1}\right)$.

The next Lemma characterizes the compactness of the family $\tilde{\Psi}_{i \leq N_0}^h$ as $h \rightarrow 0$. In what follows ε denotes a negative constant and $\mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}$ denotes the characteristic function

$$\mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(x, \lambda) = \begin{cases} 1 & \text{for } x \in \Omega^h \text{ and } \lambda < \varepsilon, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (5.19)$$

Lemma 5.2.5. *For $i \leq N_0$, $\varepsilon \in (-\|U\|_{L^\infty}, 0)$ and $h \in (0, h_0]$, with $h_0 > 0$ small enough, the following properties hold :*

- In dimension $d = 3$, the family $\left(\mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right)_{h \in (0, h_0]}$ is relatively compact in $L^p(\mathbb{R}^3)$ with $p \in [1, 6)$.
- In dimension $d = 2$, the family $\left(\mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right)_{h \in (0, h_0]}$ is relatively compact in $L^p(\mathbb{R}^2)$ with $p \in [1, +\infty)$.
- Hence in both cases $\left(\left| \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right|^2 \right)_{h \in (0, h_0]}$ is relatively compact in $L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^d)$.

Proof. Fix p as follows : $p \in [1, 6)$ in dimension $d = 3$, $p \in [1, +\infty)$ in dimension $d = 2$. Due to definition (5.19), we can restrict our investigation to the case $\varepsilon_i^h < \varepsilon$. From Corollary 4.3.5, we have

$$\left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^p(\Omega^h)} \leq \|e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h\|_{L^p(\Omega^h)} \leq C, \quad \forall h \in (0, h_0].$$

Thus, the family $\left(\mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h\right)_{h \in (0, h_0]}$ is uniformly bounded in $L^p(\mathbb{R}^d)$. Moreover, for any bounded domain $B \subset \mathbb{R}^d$, it follows, again from Corollary 4.3.5, that

$$\begin{aligned} \left\| \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{H^1(B)} &\leq \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{H^1(\Omega^h)} \\ &\leq \left\| e^{c_0|\cdot|} \nabla \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} + \left\| e^{c_0|\cdot|} \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} \leq C \end{aligned}$$

for all $h \in (0, h_0]$. By the compactness of the injection of $H^1(B) \hookrightarrow L^p(B)$, $\left\{ \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right\}_{h \in (0, h_0]}$ is relatively compact in $L^p(B)$. Next, consider the L^p -norm of $\mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h$ on $\mathbb{R}^d \setminus B$

$$\begin{aligned} \left\| \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^p(\mathbb{R}^d \setminus B)}^p &= \int_{\Omega^h \setminus B} e^{-p c_0|x|} \left| e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h \right|^p dx \\ &\leq \left(\int_{\Omega^h} \left| e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h \right|^p dx \right) \sup_{x \in \mathbb{R}^d \setminus B} e^{-p c_0|x|} \leq C' \sup_{x \in \mathbb{R}^d \setminus B} e^{-p c_0|x|}. \end{aligned}$$

For any $\eta > 0$, there exists a bounded domain B_η such that

$$\forall h \in (0, h_0], \quad \left\| \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^p(\mathbb{R}^d \setminus B_\eta)} < \eta.$$

This and the relative compactness on any bounded B due to Sobolev embeddings provide the relative compactness on the whole space $\mathbb{R}^d$ (see Corollary IV.26 in [5]).

The third point follows from the Hölder inequality

$$\left\| |f|^2 - |g|^2 \right\|_{L^p(\mathbb{R}^d)} \leq \|f - g\|_{L^{2p}(\mathbb{R}^d)} \left(\|f\|_{L^{2p}(\mathbb{R}^d)} + \|g\|_{L^{2p}(\mathbb{R}^d)} \right)$$

with $p = 1$ or $p = 2$. ■

5.3 The asymptotic problem in the 3-D case

5.3.1 Asymptotic behaviour of the Poisson potential and the limit Poisson problem

As already noticed in Remark 5.2.2, the role played by the Poisson potential at the classical scale, V^h , presents an ambiguous interpretation. Indeed, it strongly converges to zero in L^p , $p < 6$, as $h \rightarrow 0$, producing, at the same time, a non null spectral perturbation of the limit Hamiltonian, corresponding to the spectral shift : $\varepsilon_S - e_1$ (see the condition (5.3)). This ambiguity disappear when the problem is considered at the quantum scale. In this Section we will show that, in the 3-D case, the Poisson potential at the quantum scale has a non trivial asymptotic behaviour described by a limit equation of Schrödinger-Poisson kind. The strategy of our proof consists in exploiting the boundedness of the coefficients A_i^h and the relative compactness properties of the eigenvectors $\tilde{\Psi}_i^h$, with $\varepsilon_i^h < 0$, to extract a converging

sequence of charge densities. Then, as an intermediate result, a limit Schrödinger-Poisson equation is obtained, modulo an extraction, by using standard estimates (see (5.22) and (5.23) below) and the elliptic regularity of the limit Hamiltonian. In the end, a uniqueness result for this asymptotic problem will ensure the convergence of the whole family as $h \rightarrow 0$. The intermediate arguments will often be written with the notation

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} g(h) = \gamma$$

where D denotes a well chosen, countable or not, subset $D \subset (0, h_0]$ such that $0 \in \overline{D}$. For example the relative compactness stated in Lemma 5.2.3 and Lemma 5.2.5 can be used as follows : out of any infinite subset $S \subset (0, h_0]$ with $0 \in \overline{S}$, such a countable subset D can be extracted so that

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \|1_{\Omega^h} \rho^h - \rho\|_{L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)} = 0, \quad (5.20)$$

$$\text{with } \rho = \sum_{i \leq N_0} A_i |\chi_i|^2, \quad A_i = \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} A_i^h \geq 0 \quad \text{and} \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h - \chi_i \right\|_{L^2 \cap L^4(\mathbb{R}^3)} = 0. \quad (5.21)$$

where ε is a constant in $[\varepsilon_S, 0)$.

Proposition 5.3.1. *Let G be the Green function of the Laplace operator in $\mathbb{R}^3$. For a set D such that the conditions (5.21)-(5.20) are verified, the potential at the quantum scale $1_{\Omega^h} \tilde{V}^h$ satisfies*

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - G * \varrho \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} = 0.$$

Proof. We start recalling a standard estimate. Let $f \in L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)$ and consider the convolution $G * f$, whose Fourier Transform is

$$\mathcal{F}(G * f)(k) = \frac{\mathcal{F}f(k)}{k^2}$$

$\mathcal{F}f$ denoting the Transform of f . From the Young-Housdorff inequality, we know that $\mathcal{F}f \in L^2 \cap L^\infty(\mathbb{R}^3)$, which implies, using standard estimates, that

$$\left\| \frac{\mathcal{F}f(k)}{k^2} \right\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \leq C \left(\|f\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} + \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \right).$$

Then, we get

$$\|G * f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \leq C \left(\|f\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} + \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \right). \quad (5.22)$$

Moreover, from the above condition $\frac{\mathcal{F}f(k)}{k^2} \in L^1(\mathbb{R}^3)$ and the Riemann-Lebesgue Lemma, we also obtain that the convolution $G * f$ belongs to the space $C_\infty(\mathbb{R}^3)$ of continuous functions vanishing at ∞

$$G * f \in C_\infty(\mathbb{R}^3). \quad (5.23)$$

The Poisson potential can be expressed by the action of the inverse Dirichlet-Laplacian on $\rho^h : \tilde{V}^h = (-\Delta_{\Omega^h}^D)^{-1} \rho^h$, and the difference $\tilde{V}^h - G * \rho$ is bounded in Ω^h by

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{V}^h - G * \rho \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} &\leq \left\| G * \rho - (-\Delta_{\Omega^h}^D)^{-1} \rho \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} + \\ &+ \left\| G * (\rho - 1_{\Omega^h} \rho^h) - (-\Delta_{\Omega^h}^D)^{-1} (\rho - \rho^h) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} + \left\| G * (\rho - 1_{\Omega^h} \rho^h) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

The maximum principle, applied to the equation

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \text{in } \Omega^h \\ u|_{\partial\Omega^h} = G * f|_{\partial\Omega^h} \end{cases}$$

with $f \in L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)$, leads us to the estimate

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega^h)} \leq \sup_{x \in \partial\Omega^h} |G * f|.$$

If u is identified with the functions $G * \rho - (-\Delta_{\Omega^h}^D)^{-1} \rho$ and $G * (\rho - 1_{\Omega^h} \rho^h) - (-\Delta_{\Omega^h}^D)^{-1} (\rho - \rho^h)$ appearing at the r.h.s of (5.24), the previous estimates gives

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{V}^h - G * \rho \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} &\leq \sup_{x \in \partial\Omega^h} |G * \rho| + \sup_{x \in \partial\Omega^h} |G * (\rho - 1_{\Omega^h} \rho^h)| + \left\| G * (\rho - 1_{\Omega^h} \rho^h) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} \\ &\leq \sup_{x \in \partial\Omega^h} |G * \rho| + 2 \left\| G * (\rho - 1_{\Omega^h} \rho^h) \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)}. \end{aligned}$$

Applying the properties (5.23) to $G * \rho$ and (5.22) to $G * (\rho - 1_{\Omega^h} \rho^h)$, it follows from the conditions $\Omega^h \rightarrow \mathbb{R}^3$ and (5.20) that

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \tilde{V}^h - G * \rho \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} = 0. \quad (5.25)$$

In the exterior domain $\mathbb{R}^3 \setminus \Omega^h$, we have

$$\left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - G * \rho \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \Omega^h)} = \left\| G * \rho \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \Omega^h)} \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0, \quad (5.26)$$

where (5.23) has been once more implemented.

From (5.25) and (5.26) it finally follows that

$$\left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - G * \rho \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} = \max \left\{ \left\| G * \rho \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \Omega^h)}, \left\| \tilde{V}^h - G * \rho \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} \right\} \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} 0$$

which concludes the proof. ■

Concerning the problem at the classical scale, we can actually strengthen the result referred in Remark 5.2.2.

Corollary 5.3.1. *Under the assumptions of Proposition 5.3.1, the solution of the Schrödinger-Poisson problem at the classical scale, (4.4)(4.5)(4.7), strongly converges to 0 in $H_0^1(\Omega)$ as $h \rightarrow 0$ with*

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O}(h^{\frac{1}{2}}).$$

Proof. The Poisson potentials at the classical and quantum scales are related by the change of variables : $\Omega \rightarrow \Omega^h$ and the relation (4.11). In 3D, we have

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = h^{1/2} \|\tilde{V}^h\|_{H_0^1(\Omega^h)}. \quad (5.27)$$

Projecting the Poisson equation for $\tilde{V}^h$ (the second one in (5.9)) over $\tilde{V}^h$ itself, the norm $\|\tilde{V}^h\|_{H_0^1(\Omega^h)}^2$ is estimated by

$$\|\tilde{V}^h\|_{H_0^1(\Omega^h)}^2 = \sum_{i \leq N_0} A_i^h \int_{\Omega^h} |\tilde{\Psi}_i^h|^2 \tilde{V}^h dx \leq \|\tilde{V}^h\|_{L^\infty(\Omega^h)} \sum_{i \leq N_0} A_i^h.$$

As it follows from Lemma 5.2.3 and Proposition 5.3.1, the coefficients A_i^h are bounded and the family of potentials $(1_{\Omega^h} \tilde{V}^h)_{h \in D}$ converges in $L^\infty(\mathbb{R}^3)$ as $h \rightarrow 0$. Therefore we have

$$\|\tilde{V}^h\|_{H_0^1(\Omega^h)} \leq C, \quad h \in D \quad (5.28)$$

and, combining (5.27) and (5.28),

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O}(h^{\frac{1}{2}}), \quad h \in D.$$

This concludes the proof. ■

Next we investigate the limit shape of the family of Schrödinger-Poisson problems when h belongs to a subset D verifying the conditions (5.21) and (5.20).

Proposition 5.3.2. *Under the assumptions of Proposition 5.3.1, the following limits hold*

$$\liminf_{h \rightarrow 0} \varepsilon_i^h > \varepsilon_S \quad \text{for } i > 1, \quad (5.29)$$

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} A_1^h = A, \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \|1_{\Omega^h} \tilde{\Psi}_1^h - \chi\|_{L^2 \cap L^4(\mathbb{R}^3)} = 0, \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \|1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - G * A |\chi|^2\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} = 0, \quad (5.30)$$

where A and χ solve the problem

$$\begin{cases} [-\Delta + U + W] \chi = \varepsilon_S \chi, & \|\chi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1, \\ \varepsilon_S = \inf \sigma(-\Delta + U + W), \\ -\Delta W = A |\chi|^2. \end{cases} \quad (5.31)$$

Proof. Let N_1 be defined by

$$N_1 = \max \left\{ i \mid \liminf_{h \rightarrow 0} \varepsilon_i^h = \varepsilon_S \right\}. \quad (5.32)$$

Due to the result of Theorem 5.2.1, we know that $N_1 \geq 1$. Rephrasing the argument used at the beginning of this Section, it is possible to find a set $D \subset (0, h_0]$, $0 \in \bar{D}$, such that the conditions (5.20) - (5.21) are verified and

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \varepsilon_{i \leq N_1}^h = \varepsilon_S. \quad (5.33)$$

In what follows, the constant ε , appearing in (5.21), is strictly greater than ε_S . If we choose h_0 small enough, this condition and the previous limit imply : $\varepsilon_i^h < \varepsilon$, for all $h \in D$. Set $i \leq N_1$, $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. According to (5.33), and to the results of Lemma 5.2.5 and Proposition 5.3.1, the following limit holds

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left(\left[-\Delta + U + \tilde{V}^h - \varepsilon_i^h \right] \varphi, 1_{\Omega^h} \tilde{\Psi}_i^h \right)_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \left([-\Delta + U + G * \rho - \varepsilon_S] \varphi, \chi_i \right)_{L^2(\mathbb{R}^3)},$$

with

$$\rho = \sum_{i \leq N_0} A_i |\chi_i|^2, \quad A_i = \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} A_i^h \geq 0 \quad \text{and} \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h - \chi_i \right\|_{L^2 \cap L^4(\mathbb{R}^3)} = 0.$$

Moreover, in this limit, the support of the test function φ is definitely included in Ω^h and the scalar product at the l.h.s. can be written as

$$\left(\left[-\Delta + U + \tilde{V}^h - \varepsilon_i^h \right] \varphi, 1_{\Omega^h} \tilde{\Psi}_i^h \right)_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \left(\varphi, \left[-\Delta + U + \tilde{V}^h - \varepsilon_i^h \right] \tilde{\Psi}_i^h \right)_{L^2(\Omega^h)} = 0,$$

where (4.10) has been taken into account. Previous relations and the elliptic regularity of the problem lead us to the following equation

$$[-\Delta + U + G * \rho] \chi_i = \varepsilon_S \chi_i \quad \text{with } i = 1, \dots, N_1 \quad (5.34)$$

in $L^2(\mathbb{R}^3)$. The normalization and orthogonality properties of the eigenvectors $1_{\Omega^h} \tilde{\Psi}_{i \leq N_1}^h$ are preserved for $h \rightarrow 0$ and, in this limit, we have

$$\|\chi_i\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = 1, \quad (5.35)$$

$$(\chi_i, \chi_j)_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \delta_{ij}. \quad (5.36)$$

The equations (5.34)-(5.35) define χ_i as an eigenvector related to the eigenvalue ε_S of the limit Hamiltonian $H = -\Delta + U + G * \rho$. Let us focus our attention on the case $i = 1$. Due to the characterization

$$\tilde{\Psi}_1^h \geq 0 \quad \text{a.e. on } \Omega^h$$

of the fundamental mode of $\tilde{H}^h$, and using the convergence of $1_{\Omega^h} \tilde{\Psi}_1^h \rightarrow \chi_1$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$, it follows that : $\chi_1 \geq 0$ a.e. in $\mathbb{R}^3$. Recalling that the unique non negative eigenvector

coincides with the fundamental mode, we can identify χ_1 with the fundamental mode of H and ε_S with its first eigenvalue. Then, the non degeneracy of the first energy level ε_S and the linear independence of the vectors χ_i (see relation (5.36)) forces $N_1 = 1$. We conclude that the energy levels $\varepsilon_{i>1}^h$ definitely overcome the threshold ε_S as $h \rightarrow 0$; therefore, the unique contribution to the charge density in the limit $h \rightarrow 0$, comes from the term : $A_1^h \left| \tilde{\Psi}_1^h \right|^2$ and, for a set D verifying (5.21)-(5.20), the limit problem writes as (5.31). ■

5.3.2 The limit equation

The limit Schrödinger-Poisson equation obtained above essentially depends from the convergence of the charge density expressed by the conditions (5.20)-(5.21). The purpose, in what follows, is to analyze the uniqueness of this limit. In particular we will prove that any family of densities $(\rho^h)_{h \in D}$, fulfilling the convergence conditions (5.20)-(5.21), lead to the same limit equation (5.31) which will be shown to have a unique solution verifying (5.30). Our strategy consists in proving that the fundamental energy of the nonlinear limit Hamiltonian

$$-\Delta + U + A G * |\chi|^2$$

can be determined as an implicit function of the coupling parameter A . Then, making use of its monotonicity properties, we are able to prove that there exists a unique setting $\{A, \chi, W\}$ given by (5.30).

Let us denote with $H(W)$ the selfadjoint operator

$$H(W) = -\Delta + U + W, \quad D(H(W)) = H^2(\mathbb{R}^3). \quad (5.37)$$

We consider the functional $K_a : \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$

$$K_a(W) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} (\nabla W)^2 dx - a \varepsilon(W), \quad a \geq 0, \quad (5.38)$$

$$\varepsilon(W) = \inf \sigma(H(W)), \quad (5.39)$$

where $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ is the homogeneous Sobolev space of real functions defined as the completion of $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ with respect to the scalar norm

$$\|W\|_{\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla W|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

This is an Hilbert space for the scalar product $(u, v)_{\dot{H}^1} = \int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla v dx$ and it is included in $L^6(\mathbb{R}^3)$. A simple Fourier decomposition $\hat{W}(\xi) = \hat{W}(\xi)1_{|\xi| \leq 1}(\xi) + \hat{W}(\xi)1_{|\xi| > 1}(\xi) = \hat{W}_1(\xi) + \hat{W}_2(\xi)$ leads to

$$W = W_1 + W_2, \quad \hat{W}_1 \in L^1(\mathbb{R}^3), \quad W_2 \in L^2(\mathbb{R}^3), \quad (5.40)$$

$$\text{with } \left\| \hat{W}_1 \right\|_{L^1} + \|W_2\|_{L^2} \leq C \|W\|_{\dot{H}^1}. \quad (5.41)$$

A direct application of Lemma 5.4.5 implies

Lemma 5.3.2. *The map $\varepsilon(W)$ defined by (5.39) belongs to $C^0(\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}), (-\infty, 0])$ and is analytic in the open set*

$$S = \left\{ W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}), \varepsilon(W) < 0 \right\}. \quad (5.42)$$

Proof. First note that the potential U , involved in the definition of $H(W) = -\Delta + U + W$ and $\varepsilon(W) = \inf \sigma(H(W))$, belongs to $\dot{H}^1(\mathbb{R})$. Hence Lemma 5.4.5 can be used either with $H_0 = -\Delta + U$ or $H_0 = -\Delta$ while replacing W with $W' = U + W$. For $W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3)$, the decomposition (5.40)(5.41) allows to write for any $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$

$$\begin{aligned} \|W_1 \psi\|_{L^2} &\leq \|W_1\|_{L^\infty} \|\psi\|_{L^2} \leq C \|W\|_{\dot{H}^1} \|\psi\|_{L^2} \\ \|W_2 \psi\|_{L^2} &\leq \|W_2\|_{L^2} \|\psi\|_{L^\infty} \leq \|W\|_{\dot{H}^1} [\delta \|\Delta \psi\|_{L^2} + C_\delta \|\psi\|_{L^2}] \end{aligned}$$

where the last inequality is a consequence of the interpolation inequality $\|\psi\|_{L^\infty} \leq C \|\Delta \psi\|_{L^2}^a \|\psi\|_{L^2}^{1-a}$ for $a = \frac{d}{4} < 1$, in dimension $d \leq 3$. The function W_1 is bounded with $\lim_{x \rightarrow \infty} W_1(x) = 0$ while $(1 - \Delta)^{-1} W_2$ belongs to the space $\mathcal{L}^2(L^2(\mathbb{R}^3))$ of Hilbert-Schmidt operator according to [16]. Hence $W = W_1 + W_2$ is a relatively compact perturbation of $(-\Delta)$ in $\mathbb{R}^3$. All the conditions of Lemma 5.4.5 are satisfied. ■

Corollary 5.3.3. *Let $\psi(W)$ denote the first normalized eigenvector of the Hamiltonian $H(W)$. The $H^2(\mathbb{R}^3)$ -valued map $W \mapsto \psi(W)$ is real analytic on S .*

Proof. As in Lemma 5.3.2, the conditions of Lemma 5.4.5 are satisfied. Then, the L^2 -analyticity is a consequence of the Kato-Rellich theorem (see [15]-Theorem XII.8) applied there. The H^2 -analyticity comes from the eigenvalue equation $-\Delta \psi(W) = \varepsilon(W) \psi(W) - (U + W) \psi(W)$. ■

We will use the previous result to investigate the minimization problem

$$\inf_{W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})} K_a(W) \quad (5.43)$$

with K_a given by (5.38)-(5.39).

Proposition 5.3.3. *The map (5.38)-(5.39) admits a unique global minimum in $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ noted W_a . In particular, if $W_a \in S$, it is the unique solution of the Schrödinger-Poisson problem*

$$\begin{cases} -\Delta W_a = a |\psi_a|^2 \\ H(W_a) \psi_a = \varepsilon_a \psi_a \end{cases} \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \quad (5.44)$$

with $\varepsilon_a = \varepsilon(W_a)$, $\psi_a = \psi(W_a)$.

Proof. The map $K_a(W)$ can be explicitly written as

$$K_a(W) = \frac{1}{2} \|W\|_{\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})}^2 - a \varepsilon(W), \quad a \geq 0. \quad (5.45)$$

It follows from Lemma 5.3.2 that $K_a(W)$ is continuous on $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$. Moreover $-\varepsilon(W)$, defined as the supremum of affine maps, is convex. Therefore the sum : $K_a(W) = \frac{1}{2} \|W\|_{\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})}^2 - a\varepsilon(W)$ defines an α -convex (with $\alpha = 1$) continuous map on $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$. Hence the minimization problem admits a unique solution $W_a \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$.

In particular, if the minimum W_a is attained in the set S – where $K_a(W)$ is differentiable – then (5.43) is equivalent to the Euler equation $d_W K_a(W_a) = 0$ explicitly given by

$$\int_{\mathbb{R}^3} \nabla W_a \cdot \nabla V - a d_W \varepsilon(W_a) \cdot V = 0 \quad \forall V \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}), \quad (5.46)$$

with $d_W \varepsilon(W_a) \cdot V$ denoting the action on V of the differential map $d_W \varepsilon$ evaluated in W_a . This term can be expressed as

$$d_W \varepsilon(W_a) \cdot V = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_a|^2 V. \quad (5.47)$$

Equation (5.44) is a direct consequence of (5.46), (5.47) and the density of $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ in $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$. ■

In what follows we consider the regularity properties, w.r.t. the variable a , of the maps W_a , ε_a and ψ_a introduced in the above Proposition.

Lemma 5.3.4. *Let W_a denotes the minimum of the functional $K_a(W)$. With the notation of the Proposition 5.3.3, the maps $a \mapsto W_a$ and $a \mapsto \varepsilon_a$ are continuous in $\mathbb{R}^+$, and the maps $a \mapsto W_a$, $a \mapsto \psi_a$ and $a \mapsto \varepsilon_a$ are analytic in the domain $a \in \Sigma$*

$$\Sigma = \{a \in \mathbb{R}^+ \mid \varepsilon_a < 0\}. \quad (5.48)$$

Proof. Let us consider the continuity problem at first. As already noticed in the proof of Proposition 5.3.3, K_a is a continuous α -convex map with $\alpha = 1$. This implies

$$K_a(W) - K_a(W_a) \geq \frac{1}{4} \|W - W_a\|_{\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})}^2, \quad \forall W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}). \quad (5.49)$$

Let us now fix $a_0 \in \mathbb{R}^+$ and consider the difference $W_a - W_{a_0}$ when a belongs to a small neighbourhood of a_0 . From the above estimate, we have

$$\frac{1}{4} \|W_a - W_{a_0}\|_{\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})}^2 \leq K_{a_0}(W_a) - K_{a_0}(W_{a_0}) \leq |K_a(W_a) - K_{a_0}(W_{a_0})| + |a_0 - a| |\varepsilon_a|. \quad (5.50)$$

Here we notice that for $W = 0$, the value $K_a(0)$ is defined by the first eigenvalue of the Hamiltonian $-\Delta + U$ and belongs to the bounded interval $(0, a \|U\|_{L^\infty}]$. Therefore, for any $a \in \mathbb{R}^+$, the infimum value of the map K_a is bounded by $a \|U\|_{L^\infty}$. This circumstance implies

$$a |\varepsilon_a| \leq K_a(W_a) \leq a \|U\|_{L^\infty}. \quad (5.51)$$

The map $a \mapsto K_a(W_a)$ is non negative and concave as the infimum of non negative affine maps, $K_a(W_a) = \inf_{W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})} -\varepsilon(W)a + \frac{1}{2} \|W\|_{\dot{H}^1}^2$. Therefore, it is continuous and previous relations lead us to

$$\lim_{a \rightarrow a_0} \|W_a - W_{a_0}\|_{\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})}^2 = 0. \quad (5.52)$$

The continuity of the map $a \mapsto \varepsilon_a$ is a direct consequence of this result and the continuity of $\varepsilon(W)$ (Lemma 5.3.2).

Next we investigate the analyticity problem. Owing to the continuity of ε_a , Σ is an open and non empty set, with $0 \in \Sigma$ as a consequence of the condition (4.16). Let $a \in \Sigma$; as remarked in the proof of Proposition 5.3.3, the corresponding minimum $W_a \in S$ satisfies the Euler equation

$$d_W K_a(W_a) = 0. \quad (5.53)$$

Let I_a and I_{W_a} denote two open neighbourhoods of a and W_a in Σ and S respectively. For a differentiable function f from $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ to $\mathbb{R}$ and for $W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$, $\nabla_{\dot{H}^1} f(W) \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ denotes the gradient of f which represents the scalar product on $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ of the differential $df(W) : \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$. Due to Lemma 5.3.2, the map $K_\alpha : I_a \rightarrow I_{W_a}$ is analytic and $\nabla_{\dot{H}^1} K_\alpha(W) = W - \alpha \nabla_{\dot{H}^1} \varepsilon(W)$ is well defined and analytic on I_{W_a} . We introduce the map $F : I_a \times I_{W_a} \rightarrow \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$

$$F(\alpha, W) = W - \alpha \nabla_{\dot{H}^1} \varepsilon(W).$$

From (5.53), we have

$$F(a, W_a) = 0,$$

moreover

$$d_W F(a, W_a) = I - a \nabla_{\dot{H}^1}^2 \varepsilon(W_a) \in \mathcal{L}(\dot{H}^1, \dot{H}^1).$$

The convexity of $-\varepsilon(W)$ implies

$$-(\nabla_{\dot{H}^1}^2 \varepsilon(W_a) V, V)_{\dot{H}^1} \geq 0$$

This ensures the coercivity of the continuous symmetric bilinear form $(V, V') \mapsto (d_W F(a, W_a) V, V')_{\dot{H}^1}$. Therefore, from Lax-Milgram Theorem, we know that $d_W F(a, W_a)$ is invertible and an implicit function technique (e.g. in [13]) can be implemented to state that there exists an open neighbourhood of a , U_a , and an analytic map $\alpha \mapsto W_\alpha$ from U_a to I_{W_a} such that

$$F(\alpha, W_\alpha) = 0, \quad \forall \alpha \in U_a.$$

The function $W_\alpha \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ solves the Euler equation (5.53) and, by Proposition 5.3.3, is the unique minimum of K_α ; moreover it is real analytic w.r.t. $\alpha \in U_a$. The analyticity of the maps $a \mapsto \varepsilon_a$ and $a \mapsto \psi_a$ easily follows from this result and those obtained in Lemma 5.3.2 and Corollary 5.3.3. ■

Lemma 5.3.5. *The analytic function ε_a , $a \in \Sigma$, defined in Lemma 5.3.4, is strictly increasing.*

Proof. We recall that ε_a is defined as the composite map $\varepsilon(W_a)$ where W_a is the minimum of the functional $K_a(W)$. We can apply the rule of derivation of composite maps (e.g. in [1]) and the relation (5.47) to write

$$\varepsilon'_a = d_W \varepsilon(W_a) \cdot W'_a = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_a|^2 W'_a, \quad (5.54)$$

W'_a denoting the variation of W_a . Differentiating the minimum condition (5.46) w.r.t. a and using (5.47) we obtain the equation

$$\int_{\mathbb{R}^3} \nabla W'_a \cdot \nabla V - \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_a|^2 V - a \frac{d}{da} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_a|^2 V = 0 \quad \forall V \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3), \quad (5.55)$$

where the last term at the l.h.s. can be rewritten as

$$\frac{d}{da} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_a|^2 V = \frac{d}{da} d_W \varepsilon(W_a) \cdot V = d_W^2 \varepsilon(W_a) \cdot (V, W'_a). \quad (5.56)$$

Setting $V = W'_a$ in (5.55) and using the relations (5.54)-(5.56), we obtain the following representation of ε'_a

$$\varepsilon'_a = \int_{\mathbb{R}^3} \nabla W'_a \cdot \nabla W'_a - a d_W^2 \varepsilon(W_a) \cdot (W'_a, W'_a).$$

The r.h.s. of this expression defines the second differential of $K_a(W)$ evaluated in the point W_a and acting on the couple (W'_a, W'_a) . From the convexity of this map, we know that

$$d_W^2 K_a(W_a) \cdot (V, V) \geq 0 \quad \forall V \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$$

and the condition $\varepsilon'_a \geq 0$ follows. This condition, together with the analyticity of ε_a lead us to the statement of the Lemma. ■

We conclude this Section giving the proof of Theorem 5.1.1.

Proof of Theorem 5.1.1. We start considering the second statement of the Theorem. Making use of the notations introduced above, the solution to (5.1) identifies with a couple (A, W_A) fulfilling the minimization problem

$$\inf_{W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})} K_A(W), \quad (5.57)$$

and the condition

$$\varepsilon_A = \varepsilon_S, \quad (5.58)$$

where ε_S is the fixed datum. In Proposition 5.3.2, it has been shown that there exists at least one setting $(A, G * A |\chi|^2)$ – where A and χ are defined as a limit in (5.30) – solving this problem. Due to the Lemmas 5.3.4 and 5.3.5, the function $a \mapsto \varepsilon_a$ is continuous on $\mathbb{R}^+$, strictly increasing on the subset $\Sigma \subset \mathbb{R}^+$ and null outside Σ (since W_a is a H_0 -relatively compact)

$$\varepsilon_a|_{\mathbb{R}^+ \setminus \Sigma} = 0.$$

Moreover, from the definition (4.14) and the assumption (4.16), it is known that : $\varepsilon_0 = e_1 < \varepsilon_S$. The previous characterization of ε_a forces the solution, A , to the equation

$$\varepsilon_A = \varepsilon_S$$

to be unique and strictly positive. Then, the uniqueness of the couple (A, W_A) follows from the uniqueness of the minimum of $K_A(W)$.

The third statement relies on an ad absurdum argument. If $1_{\Omega^h} \tilde{V}^h$ does not converge to the potential W determined by the unique solution to (5.1), then we can find a set $S \subset (0, h_0]$, $0 \in \bar{S}$, such that

$$\left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - W \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} > c, \quad \forall h \in S.$$

for some positive constant c . On the other hand, it is possible to extract a subset $D \subset S$, $0 \in \bar{D}$, such that (5.20) and (5.21) are verified. According to Proposition 5.3.1, Proposition 5.3.2 and the previous uniqueness result, the following limit holds

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h - W \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} = 0,$$

which contradicts the initial assumption.

The first statement of the Theorem is a consequence of the third one and Corollary 5.3.1. Finally, the fourth statement is an application of Proposition 5.3.2, once the third statement holds true. ■

5.4 The asymptotic problem in the 2-D case

The analysis of the asymptotic behaviour of the Poisson potential in the 2-D case needs a different approach w.r.t. the one followed in the previous Section. This is essentially due to the fact that the singularity of the integral kernel of $(-\Delta)^{-1}$, in dimension 2, prevents us to use the estimate (5.22) and a global Fourier analysis approach in the study of the problem. Let consider the rescaled density r^h

$$r^h = \sum_{i \leq N_0} B_i^h \left| \mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon_S}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h \right|^2, \quad (5.59)$$

where, due to the results of Lemma 5.2.3, the coefficients

$$B_i^h = |\ln h| A_i^h \quad (5.60)$$

are uniformly bounded w.r.t. $h \in (0, h_0]$. It is possible to extract out of any $S \subset (0, h_0]$, $0 \in \bar{S}$, a subset $D \subset S$, $0 \in \bar{D}$, such that

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} B_i^h = B_i. \quad (5.61)$$

It is worthwhile to stress that the convergence conditions (5.61) contain the existence of a uniform bound for B_i^h and B_i w.r.t. h

$$B_i^h, B_i \leq C, \quad \forall h \in D.$$

This property, together with the normalization condition $\left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)} = 1$, will be extensively used in what follows. As already noticed (see the proof of Lemma 5.2.5),

the family $\left(\mathbb{I}_{\Omega^h, \varepsilon_S}(\cdot, \varepsilon_i^h) \tilde{\Psi}_i^h\right)_{h \in (0, h_0]}$ is bounded in $L^2 \cap L^4(\mathbb{R}^2)$ uniformly w.r.t. the parameter h . Then, due to the definition (5.59), the rescaled density $(r^h)_{h \in (0, h_0]}$ is bounded in $L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^2)$. Moreover, it follows from relation

$$1_{\Omega^h} \rho^h = \left(\ln \frac{1}{h}\right)^{-1} r^h, \quad (5.62)$$

that

$$\|1_{\Omega^h} \rho^h\|_{L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^2)} = \mathcal{O}(|\ln h|^{-1}) \quad (5.63)$$

as $h \rightarrow 0$. The above result proves that, unlike the 3-D case, if any non null limit potential exists, it will not satisfy a Poisson problem.

In this analysis, we consider the Poisson potential $\tilde{V}^h$ defined, in terms of the rescaled density, by the equation

$$\begin{cases} -\Delta \tilde{V}^h = \left(\ln \frac{1}{h}\right)^{-1} r^h & \text{in } \Omega^h, \\ \tilde{V}^h|_{\partial\Omega^h} = 0. \end{cases} \quad (5.64)$$

Our strategy consists into a direct estimate of the L^∞ -norm of the contribution to $\tilde{V}^h$ given by the source term in a region of size $\mathcal{O}(\ln \frac{1}{h})$. The size $\mathcal{O}(\ln \frac{1}{h})$ appears naturally since it is small enough to apply the multipole expansion of the $(-\Delta)^{-1}$ -Green kernel on $\partial\Omega^h$, and big enough to exploit the exponential decay of the eigenfunctions outside a region of this size. In particular, exploiting the compensation between the logarithmic singularity of the Laplacian's Green function and the scaling factor $(\ln \frac{1}{h})^{-1}$ appearing in (5.64), we are able to obtain an explicit asymptotic picture of the Poisson potential, as $h \rightarrow 0$, both at the classical and the quantum scales.

In what follows B_r and $B(x, r)$ denote the balls of radius r centered, respectively, in the origin and in the point x of $\mathbb{R}^2$. Moreover, we fix R and R' such that the following inclusions hold

$$B_{\frac{R}{h}} \subset \Omega^h \subset B_{\frac{R'}{h}}. \quad (5.65)$$

Finally, setting $R^h = \kappa \left(\ln \frac{1}{h}\right)$ for some $\kappa > 0$, the inclusions

$$B_{R^h} \subset B_{\frac{R}{h}} \subset \Omega^h \quad (5.66)$$

hold for all $h \in (0, h_0]$ when h_0 is chosen small enough, depending on κ and R . Next, we consider the decomposition

$$\phi_1^h = r^h I_{B_{R^h}}, \quad \phi_2^h = r^h (1 - I_{B_{R^h}}), \quad (5.67)$$

where $I_{B_{R^h}}$ is the characteristic function of the ball B_{R^h} and r^h is given by (5.59). The Poisson potential $\tilde{V}^h$ can be written as

$$\tilde{V}^h = W_1^h + W_2^h, \quad (5.68)$$

with

$$\begin{cases} -\Delta W_j^h = (\ln \frac{1}{h})^{-1} \phi_j^h & \text{in } \Omega^h, \\ W_j^h|_{\partial\Omega^h} = 0. \end{cases} \quad (5.69)$$

The next Lemmas give an asymptotic characterization as $h \rightarrow 0$ of the fields $W_{j=1,2}^h$ and W^h .

Lemma 5.4.1. *For any $\kappa > 0$, the function W_2^h , defined by (5.59), (5.67) and (5.69) tends uniformly to 0 on Ω^h as $h \rightarrow 0$ with the following asymptotic order*

$$\|W_2^h\|_{L^\infty(\Omega^h)} = \mathcal{O}(h^\gamma) \quad (5.70)$$

for some constant $\gamma > 0$.

Proof. Let us introduce the auxiliary function

$$\tilde{W}_2^h = \left(\ln \frac{1}{h}\right)^{-1} G * \phi_2^h, \quad (5.71)$$

where G denotes the Green kernel of the Laplacian in $\mathbb{R}^2$: $G(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \ln |x - y|$. The difference $W_2^h - \tilde{W}_2^h$ satisfies the equation

$$\begin{cases} -\Delta (W_2^h - \tilde{W}_2^h) = 0 & \text{in } \Omega^h, \\ W_2^h - \tilde{W}_2^h|_{\partial\Omega^h} = -\tilde{W}_2^h|_{\partial\Omega^h}, \end{cases}$$

and, due to the maximum principle, we get

$$\|W_2^h\|_{L^\infty(\Omega^h)} \leq \|W_2^h - \tilde{W}_2^h\|_{L^\infty(\Omega^h)} + \|\tilde{W}_2^h\|_{L^\infty(\Omega^h)} \leq \|\tilde{W}_2^h\|_{L^\infty(\partial\Omega^h)} + \|\tilde{W}_2^h\|_{L^\infty(\Omega^h)}.$$

For R' compliant with condition (5.65), previous inequality gives

$$\|W_2^h\|_{L^\infty(\Omega^h)} \leq 2\|\tilde{W}_2^h\|_{L^\infty(B_{\frac{R'}{h}})}. \quad (5.72)$$

In the next estimate the values of $\tilde{W}_2^h$ over $B_{\frac{R'}{h}}$ are considered. Let $x \in B_{\frac{R'}{h}}$; according to the explicit definitions of $\tilde{W}_2^h$, ϕ_2^h and r^h , the uniform boundedness of

the coefficients $B_{i \leq N_0}^h$ and the decay estimate (4.40), we have

$$\begin{aligned}
 |\tilde{W}_2^h(x)| &= \left| \frac{|\ln h|^{-1}}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \ln |x-y| \phi_2^h(y) dy \right| \leq \frac{|\ln h|^{-1}}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \int_{\mathbb{R}^2 \setminus B_{R^h}} |\ln |x-y|| \left| 1_{\Omega^h} \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \\
 &\leq \frac{|\ln h|^{-1}}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h e^{-2c_0 R^h} \int_{\mathbb{R}^2 \setminus B_{R^h}} |\ln |x-y|| \left| 1_{\Omega^h} e^{c_0|y|} \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \\
 &\leq C \frac{e^{-2c_0 R^h}}{|\ln h|} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left[\|\ln |x-y|\|_{L^2(B(x,1))} \left\| e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^4(\Omega^h)}^2 \right. \\
 &\quad \left. + \int_{\mathbb{R}^2 \setminus (B(x,1) \cup B_{R^h})} |\ln |x-y|| \left| 1_{\Omega^h} e^{c_0|y|} \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \right] \\
 &\leq C \frac{e^{-2c_0 R^h}}{|\ln h|} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left[1 + \ln \frac{2R'}{h} \int_{\mathbb{R}^2 \setminus (B(x,1) \cup B_{R^h})} \left| 1_{\Omega^h} e^{c_0|y|} \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \right] \\
 &\leq C \frac{e^{-2c_0 R^h}}{|\ln h|} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left[1 + \ln \frac{2R'}{h} \|e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h\|_{L^2(\Omega^h)}^2 \right] \\
 &\leq C e^{-2c_0 R^h} (|\ln h|^{-1} + 1),
 \end{aligned}$$

where at each step C is a suitable positive constant. Combining this estimate with (5.72), it easily follows that

$$\|W_2^h\|_{L^\infty(\Omega^h)} = \mathcal{O}(e^{-c_0 \kappa |\ln h|})$$

as $h \rightarrow 0$. ■

Let us introduce the function

$$\tilde{W}_1^h = \left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} G * \phi_1^h \quad (5.73)$$

and the constant

$$\theta = \frac{1}{2\pi} \sum_{i \leq N_0} B_i, \quad (5.74)$$

where, G denotes the Green kernel of the Laplacian in $\mathbb{R}^2$: $G(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \ln |x-y|$, while B_i are the limits (5.61) of the coefficients B_i^h .

Lemma 5.4.2. *For any $\kappa > 0$, let W_1^h and $\tilde{W}_1^h$ be defined by (5.59), (5.67), (5.69) and (5.73), and assume R , R' and h_0 satisfy the conditions (5.65) and (5.66). For a set D such that the condition (5.61) is verified, the following limits hold*

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}})} = 0, \quad (5.75)$$

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} = 0, \quad (5.76)$$

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \tilde{W}_1^h \right\|_{L^\infty(B_{Rh})} = 0. \quad (5.77)$$

Proof. Take the function $\tilde{W}_1^h$

$$\tilde{W}_1^h(x) = -\frac{(\ln \frac{1}{h})^{-1}}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \int_{B_{Rh}} \ln |x - y| \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy$$

on the set $B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}}$. Let (r, ϑ) and (r', ϑ') denote the polar coordinates of the points x and y respectively. For $x \in B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}}$ and $y \in B_{Rh}$, the ratio $\frac{r'}{r}$ is estimated by : $\frac{r'}{r} \leq \frac{\kappa}{R} h (\ln \frac{1}{h})$, and the multipole expansion

$$\ln |x - y| = \ln r - \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{k} \left(\frac{r'}{r} \right)^k [\cos k\vartheta \cos k\vartheta' + \sin k\vartheta \sin k\vartheta']$$

is uniformly convergent as $\frac{\kappa}{R} h (\ln \frac{1}{h}) < 1$. Moreover, the remainder term : $\ln |x - y| - \ln r$ is of order $\mathcal{O}(h \ln \frac{1}{h})$. According to this expansion, the values of $\tilde{W}_1^h$ over the set $B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}}$ can be expressed as follows

$$\tilde{W}_1^h(x) \Big|_{x \in B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}}} = -\frac{(\ln \frac{1}{h})^{-1}}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \ln |x| \int_{B_{Rh}} \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy + \mathcal{O}(h).$$

Replace $\ln |x|$ with

$$\ln |x| = \left(\ln \frac{1}{h} \right) \left(1 + \left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \ln h |x| \right).$$

When x belongs to a domain of size $\sim \frac{1}{h}$, the quantity $\ln h |x|$ is uniformly bounded as $h \rightarrow 0$. Therefore we get

$$\tilde{W}_1^h(x) \Big|_{x \in B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}}} = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \int_{B_{Rh}} \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy + \mathcal{O} \left(\left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \right).$$

Making use of this expression, the norm $\left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}})}$ admits the estimate

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}})} &\leq \left| \frac{1}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \int_{B_{Rh}} \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy - \theta \right| + \mathcal{O} \left(\left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \right) \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left| B_i^h \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(B_{Rh})}^2 - B_i \right| + \mathcal{O} \left(\left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \right). \end{aligned}$$

Taking into account the exponential decay of the eigenfunctions $\tilde{\Psi}_i^h$ with $\varepsilon_i^h < \varepsilon_S$ and the limit conditions $B_i^h \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} B_i$, we have

$$\begin{aligned} \left| B_i^h \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(B_{R^h})}^2 - B_i \right| &\leq B_i^h \left| \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(B_{R^h})}^2 - 1 \right| + |B_i^h - B_i| \\ &= B_i^h \left| \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(B_{R^h})}^2 - \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \right| + |B_i^h - B_i| = B_i^h \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2 \setminus B_{R^h})}^2 + |B_i^h - B_i| \\ &\leq B_i^h e^{-2c_0 R^h} \left\| e^{c_0 |\cdot|} \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 + |B_i^h - B_i|. \end{aligned}$$

These inequalities lead us to (5.75).

Let us consider (5.76). The function $W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta)$ is the unique solution to the problem

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 & \text{in } \Omega^h, \\ u|_{\partial\Omega^h} = -(\tilde{W}_1^h + \theta)|_{\partial\Omega^h}. \end{cases}$$

Using the Maximum Principle and (5.75), we get

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} \leq \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(\partial\Omega^h)} \leq \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R'}{h}} \setminus B_{\frac{R}{h}})} = 0.$$

Concerning the last limit, (5.77), we notice that, for any $x \in B_{R^h}$, the following estimate holds

$$\begin{aligned} |\tilde{W}_1^h(x)| &\leq \frac{(\ln \frac{1}{h})^{-1}}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \int_{B_{R^h}} |\ln |x - y|| \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \\ &\leq C \left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left(\left\| \ln |x - y| \right\|_{L^2(B(x,1))} \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^4(\Omega^h)}^2 \right. \\ &\quad \left. + \int_{B_{R^h} \setminus B(x,1)} |\ln |x - y|| \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \right) \\ &\leq C \left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left(1 + \ln(2R^h) \int_{B_{R^h} \setminus B(x,1)} \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \right) \\ &\leq C \left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left(1 + \ln(2R^h) \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)}^2 \right), \end{aligned}$$

C denoting, at each step, a suitable positive constant. The relevant term at the r.h.s. of this expression is the product : $(\ln \frac{1}{h})^{-1} \ln(2R^h)$, which, due to the definition of R^h , is proportional to an infinitesimal of type $\frac{1}{x} \ln x$ with $x = 2\kappa (\ln \frac{1}{h})$ as $h \rightarrow 0$. This concludes the proof. ■

The results of previous Lemmas will help us to characterize the asymptotic shape of the Poisson potential $\tilde{V}^h$ as $h \rightarrow 0$.

Proposition 5.4.1. *For a set D such that the condition (5.61) is verified with $h_0 > 0$ small enough, the family of potentials $\left(1_{\Omega^h} \tilde{V}^h\right)_{h \in D}$ is bounded in $\mathbb{R}^2$ and uniformly convergent on any compact domain to the constant potential θ defined by (5.74). More precisely, for any $\kappa > 0$, setting $R^h = \kappa \left(\ln \frac{1}{h}\right)$, the family $\left(\tilde{V}^h\right)_{h \in D}$ satisfies the limit*

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \tilde{V}^h - \theta \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} = 0. \quad (5.78)$$

Proof. Set $\kappa > 0$, $R^h = \kappa \left(\ln \frac{1}{h}\right)$. Let R and h_0 satisfy the condition (5.66). The decomposition (5.68) and the results of the Lemmas 5.4.1 and 5.4.2, give the following auxiliary estimates

– Consider the difference $\tilde{V}^h - \theta$ on B_{R^h}

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{V}^h - \theta \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} &\leq \left\| W_1^h - \theta \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} + \left\| W_2^h \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} \\ &\leq \left\| W_1^h - \theta \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} + \left\| W_2^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} = \left\| W_1^h - \theta \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} + \mathcal{O}(h^\gamma) \\ &\leq \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} + \left\| \tilde{W}_1^h \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} + \mathcal{O}(h^\gamma) \\ &\leq \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} + \left\| \tilde{W}_1^h \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} + \mathcal{O}(h^\gamma) \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} 0 \end{aligned}$$

from which we get

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \tilde{V}^h - \theta \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} = 0. \quad (5.79)$$

– Consider $1_{\Omega^h} \tilde{V}^h$ on $\mathbb{R}^2 \setminus B_{\frac{R}{h}}$

$$\begin{aligned} \left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus B_{\frac{R}{h}})} &= \left\| \tilde{V}^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} \leq \left\| W_1^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} + \left\| W_2^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} \\ &\leq \left\| W_1^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} + \left\| W_2^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} = \left\| W_1^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} + \mathcal{O}(h^\gamma) \\ &\leq \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} + \left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} + \mathcal{O}(h^\gamma) \\ &\leq \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} + \left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(\Omega^h \setminus B_{\frac{R}{h}})} + \mathcal{O}(h^\gamma) \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} 0 \end{aligned}$$

which gives

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus B_{\frac{R}{h}})} = 0. \quad (5.80)$$

– Finally we consider $\tilde{V}^h$ on $B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h}$

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{V}^h \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h})} &\leq \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} + \left\| \tilde{W}_1^h + \theta \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h})} + \left\| W_2^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} \\ &\leq \left\| W_1^h - (\tilde{W}_1^h + \theta) \right\|_{L^\infty(\Omega^h)} + C + \left\| \tilde{W}_1^h \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h})} + \left\| W_2^h \right\|_{L^\infty(\Omega^h)}. \end{aligned}$$

From the results of Lemma 5.4.1 and 5.4.2, we have

$$\left\| \tilde{V}^h \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h})} \leq C + \left\| \tilde{W}_1^h \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h})}, \quad h \in D.$$

Set $x \in B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h}$; proceeding as in Lemma 5.4.2, the inequality

$$\begin{aligned} \left| \tilde{W}_1^h(x) \right| &\leq \frac{(\ln \frac{1}{h})^{-1}}{2\pi} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \int_{B_{R^h}} |\ln |x - y|| \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \\ &\leq C \left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left(\left\| \ln |x - y| \right\|_{L^2(B(x,1))} \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^4(\Omega^h)}^2 + \ln \frac{2R}{h} \int_{B_{R^h} \setminus B(x,1)} \left| \tilde{\Psi}_i^h(y) \right|^2 dy \right) \\ &\leq C \left(\ln \frac{1}{h} \right)^{-1} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} \left(1 + \ln \frac{2R}{h} \left\| \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\Omega^h)}^2 \right) \end{aligned}$$

holds, C denoting at each step a positive constant. The leading asymptotic term at the r.h.s. of this expression is the product : $(\ln \frac{1}{h})^{-1} \ln \frac{2R}{h}$ which is a constant as $h \rightarrow 0$. The above considerations allow us to conclude that $\tilde{V}^h|_{B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h}}$ is uniformly bounded for $h \in D$, i.e. it exists a positive constant C such that

$$\left\| \tilde{V}^h \right\|_{L^\infty(B_{\frac{R}{h}} \setminus B_{R^h})} \leq C \quad \forall h \in D. \quad (5.81)$$

As a direct consequence of (5.79), (5.80) and (5.81), $\left\{ 1_{\Omega^h} \tilde{V}^h \right\}_{h \in D}$ is bounded in the whole space uniformly w.r.t. h . Moreover, for any compact set $K \subset \mathbb{R}^2$, it exists $h_K \in D$ such that $K \subset B_{R^h}$ for all $h \in D \cap \{h \mid h < h_K\}$. This circumstance implies that

$$\left\| \tilde{V}^h - \theta \right\|_{L^\infty(K)} \leq \left\| \tilde{V}^h - \theta \right\|_{L^\infty(B_{R^h})} \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} 0.$$

■

Corollary 5.4.3. *Under the assumptions of Proposition 5.4.1, the family $(V^h)_{h \in D}$ converges strongly to 0 in $H_0^1(\Omega)$*

$$\left\| V^h \right\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O} \left(\frac{1}{|\ln h|} \right).$$

Proof. The Poisson potentials at the classical and quantum scales are related by the change of variables : $\Omega \rightarrow \Omega^h$ and the relation (4.11). In 2D, we have

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \|\tilde{V}^h\|_{H_0^1(\Omega^h)} . \quad (5.82)$$

Projecting the Poisson equation for $\tilde{V}^h$ (the second one in (5.9)) over $\tilde{V}^h$ itself, we can estimate the H_0^1 -norm of this function by

$$\|\tilde{V}^h\|_{H_0^1(\Omega^h)}^2 = |\ln h|^{-1} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h \int_{\Omega^h} |\tilde{\Psi}_i^h|^2 \tilde{V}^h dx \leq |\ln h|^{-1} \|1_{\Omega^h} \tilde{V}^h\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)} \sum_{\substack{i \leq N_0 \\ \varepsilon_i^h < \varepsilon_S}} B_i^h .$$

Following the result of Proposition 5.4.1, we have

$$\|1_{\Omega^h} \tilde{V}^h\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)} \leq C \quad \forall h \in D ,$$

and, due to the boundedness of the coefficients B_i^h , it follows that

$$\|V^h\|_{H_0^1(\Omega)} = \mathcal{O}(|\ln h|^{-1}) .$$

■

As shown in Proposition 5.4.1, the limit potential at the quantum scale coincides with the constant value θ on compact sets. In the following Lemma we give a numerical estimate of this quantity.

Lemma 5.4.4. *Let e_1 denotes the first eigenvalue of the Hamiltonian $H_0 = -\Delta + U$, $D(H_0) = H^2(\mathbb{R}^d)$. Under the assumptions of Proposition 5.4.1, the following conditions hold*

$$\liminf_{h \rightarrow 0} \varepsilon_i^h > \varepsilon_S \quad \text{for } i > 1 , \quad (5.83)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \varepsilon_1^h = e_1 + \theta \quad \text{and} \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} |\ln h| f(\varepsilon_1^h) = 2\pi\theta . \quad (5.84)$$

Proof. In what follows, N_1 denotes the integer

$$N_1 = \max \left\{ i \mid \liminf_{h \rightarrow 0} \varepsilon_i^h = \varepsilon_S \right\} ,$$

while $\{e_i\}_{i \leq N}$ is the point spectrum of H_0 and H_θ the operator

$$H_\theta = -\Delta + U + \theta, \quad D(H_\theta) = H^2(\mathbb{R}^2)$$

whose eigenvalues are

$$e_i^\theta = e_i + \theta, \quad i = 1, \dots, N . \quad (5.85)$$

As in the proof of Proposition 5.3.2, it is possible to find a set $D \subset (0, h_0]$ such that condition (5.61) is verified and the following limit holds

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \varepsilon_{i \leq N_1}^h = \varepsilon_S , \quad (5.86)$$

with $N_1 \geq 1$. Due to the above limit, one can set h_0 so small that $\varepsilon_{i \leq N_1}^h < \frac{\varepsilon_S}{2}$, $\forall h \in D$. This property allows us to apply the exponential estimate (4.39) for all $h \in D$.

To obtain the results stated in (5.83) and (5.84), it is enough to prove that : $N_1 = 1$ and $\varepsilon_S = e_1 + \theta$. The proof is articulated in three steps. We start showing that the eigenvalues $\varepsilon_{i \leq N_1}^h$ of the Hamiltonian $\tilde{H}^h$ asymptotically belong to the spectrum $\sigma(H_\theta)$ as $h \rightarrow 0$. Then, the limit

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \varepsilon_{i \leq N_1}^h = e_1^\theta$$

is achieved. We conclude by using a spectral approximation argument.

• Consider the vector family : $u_{i \leq N_1}^h = \chi^h \tilde{\Psi}_{i \leq N_1}^h$, where $\chi^h(x) = \chi(hx + x_0)$ and $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$ is such that : $\chi = 1$ on $B(x_0, \frac{R}{2})$ and $\chi = 0$ on $\mathbb{R}^2 \setminus B(x_0, R)$, for a radius $R > 0$ verifying (5.65). Under these assumptions, the functions $u_{i \leq N_1}^h$ are in $H^2(\mathbb{R}^2)$ and we can consider the difference : $(H_\theta - \varepsilon_i^h) u_{i \leq N_1}^h$ which is expressed by

$$(H_\theta - \varepsilon_i^h) u_i^h = -(\Delta \chi^h) \tilde{\Psi}_i^h - 2 \nabla \chi^h \cdot \nabla \tilde{\Psi}_i^h - \chi^h (\tilde{V}^h - \theta) \tilde{\Psi}_i^h.$$

The functions $\nabla \chi^h$ and $\Delta \chi^h$ are smooth and supported outside $B_{\frac{R}{2h}}$. A direct application of estimate (4.39) gives

$$\|\nabla \chi^h \cdot \nabla \tilde{\Psi}_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \|(\Delta \chi^h) \tilde{\Psi}_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq C \|\chi\|_{C^2(\mathbb{R}^2)} (h + h^2) e^{-c_0 \frac{R}{2h}} \quad \forall h \in D. \quad (5.87)$$

Next, we define $R^h = R \ln \frac{1}{h}$ and we suppose that h_0 is small enough so that (5.66) holds; using (4.39), equation (5.78) and the boundedness of $\{1_{\Omega^h} \tilde{V}^h\}_{h \in D}$ (obtained in Proposition 5.4.1) we have $\forall h \in D$

$$\begin{aligned} \left\| \chi^h (\tilde{V}^h - \theta) \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 &\leq \|\chi\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)}^2 \left(\int_{B_{R^h}} |(\tilde{V}^h - \theta) \tilde{\Psi}_i^h|^2 dx + \int_{\Omega^h \setminus B_{R^h}} |(\tilde{V}^h - \theta) \tilde{\Psi}_i^h|^2 dx \right) \\ &\leq C \left(\|\tilde{V}^h - \theta\|_{L^\infty(B_{R^h})}^2 + \int_{\Omega^h} |e^{c_0|x|} \tilde{\Psi}_i^h|^2 dx e^{-2c_0 R^h} \right) \end{aligned}$$

and

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \left\| \chi^h (\tilde{V}^h - \theta) \tilde{\Psi}_i^h \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 0.$$

Combining equations (5.87) and the result above, it is possible to find a function $\alpha(h)$ independent of i such that $\alpha(h) \rightarrow 0$ when $h \rightarrow 0$ and

$$\|(H_\theta - \varepsilon_i^h) u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq \alpha(h) \quad \forall h \in D. \quad (5.88)$$

Let us denote with $d(\lambda, \sigma(H))$ the distance of $\lambda \in \mathbb{C}$ from the spectrum of an Hamiltonian H . Using a classical inequality for self-adjoint operators, we have

$$\|u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} d(\varepsilon_i^h, \sigma(H_\theta)) \leq \|(H_\theta - \varepsilon_i^h) u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \quad (5.89)$$

Due to the exponential decay relation (4.39) and the normalization condition (4.13), the mass of $\tilde{\Psi}_i^h$ concentrates around the origin. This circumstance allows us to obtain a uniform lower bound for $\int_{B_{\frac{R}{2h}}} |\tilde{\Psi}_i^h|^2 dx$ (see e.g. (5.10) in Lemma 5.2.3), and

$$\|u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \geq \frac{1}{2}$$

for all $h \in D$ and h_0 small enough. Previous relations lead us to the following result

$$d(\varepsilon_i^h, \sigma(H_\theta)) \leq 2\|(H_\theta - \varepsilon_i^h)u_i^h\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \xrightarrow{h \rightarrow 0, h \in D} 0.$$

- The above condition and the limit (5.86), imply that $\varepsilon_S \in \sigma(H_\theta)$ and, in particular

$$\varepsilon_S = e_k^\theta \quad (5.90)$$

for some $k \geq 1$. On the other hand, following the same line as in the previous step, it is possible to show that

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} d(e_1^\theta, \sigma(\tilde{H}^h)) = 0. \quad (5.91)$$

Here it follows a brief sketch of the proof. Let $\phi_1 \in H^2(\mathbb{R}^2)$ denote the first normalized eigenvector of H_θ . Exploiting the Agmon distance on $\mathbb{R}^2$ associated with the potential $(U - \frac{e_1}{2})$ from a point x to the well ω , it is possible to recover the quantum scale decay estimate

$$\int_{\mathbb{R}^2} |e^{c_0|x|}\phi_1|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^2} |e^{c_0|x|}\nabla\phi_1|^2 dx \leq C \quad (5.92)$$

for suitable positive constants c_0 and C (this is the analogous of relation (4.28) in the whole space case, we refer to Proposition 6.4 in [6] for this point). Setting $v^h = \chi^h \phi_1$, we have $v^h \in D(\tilde{H}^h)$ and

$$(\tilde{H}^h - e_1^\theta)v^h = -(\Delta\chi^h)\phi_1 - 2\nabla\chi^h \cdot \nabla\phi_1 + \chi^h(\tilde{V}^h - \theta)\phi_1.$$

The estimate (5.92) allows to apply the same scheme as in the previous case. Therefore we have

$$\|v^h\|_{L^2(\Omega^h)} \geq \frac{1}{2} \quad \text{and} \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \|(\tilde{H}^h - e_1^\theta)v^h\|_{L^2(\Omega^h)} = 0 \quad (5.93)$$

from which the relation (5.91) directly follows.

Using the constraints (5.86) and (5.90), a direct consequence of (5.91) is

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} \varepsilon_{i \leq N_1}^h = \varepsilon_S = e_1 + \theta. \quad (5.94)$$

- Let $b = \frac{e_2^\theta - e_1^\theta}{2} > 0$. The unique spectral point of H_θ in the interval $I := [e_1^\theta - b, e_1^\theta + b]$ is e_1^θ ; moreover, H_θ has no spectrum in $\{x, 0 < d(x, I) < b\}$

$$\sigma(H_\theta) \cap ((I + B(0, b)) \setminus I) = \emptyset. \quad (5.95)$$

From the previous point, we know that $\varepsilon_{i \leq N_1}^h$ definitely belong to I when $h \in D$. Next we consider the vector space E spanned by the family $(u_i^h)_{i \leq N_1}$ and the spectral subspace F associated with $\sigma(H_\theta) \cap I$. By construction, F coincides with the first eigenspace of the operator H_θ . Using (4.39), it can be easily shown that the matrix $M = ((u_i^h, u_j^h)_{L^2(\mathbb{R}^2)})_{1 \leq i, j \leq N_1}$ verifies

$$M = I + o(1) \quad (5.96)$$

when $h \rightarrow 0$, $h \in D$. Then, from Theorem 4.3.7 and relation (5.88), the distance $d(E, F)$ (definition given by (4.41)) is estimated by

$$d(E, F) \leq \left(\frac{N_1}{\lambda_{\min}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{2\alpha(h)}{b} \quad \forall h \in D, \quad (5.97)$$

where $\lambda_{\min}$ denotes the smallest eigenvalue of M . Equation (5.96) implies

$$\lambda_{\min} = 1 + o(1) \geq \frac{1}{2} \quad \forall h \in D.$$

Using the above equation and the limit condition $\lim_{h \rightarrow 0} \alpha(h) = 0$ in (5.97), we get

$$d(E, F) < 1$$

for all $h \in D$ with h_0 small enough. Applying Lemma 4.3.6, this last condition allows us to state that the map $\Pi_F|_E : E \rightarrow F$ is injective, from which the condition $N_1 = 1$, and then (5.83) follow. For a set D such that condition (5.61) holds, the last limit $\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} |\ln h| f(\varepsilon_1^h) = 2\pi\theta$ is a simple rewriting of the definition (5.74) of θ when (5.83) is true. ■

We conclude this Section giving the proof of Theorem 5.1.3

Proof of Theorem 5.1.3. Let D , $0 \in \bar{D}$, be any set for which the condition (5.61) is verified. The constant θ related to D is defined by

$$\theta = \frac{1}{2\pi} \sum_{i \leq N_0} B_i, \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h \in D}} B_i^h = B_i. \quad (5.98)$$

Due to the relations (5.3) and (5.84), this constant is uniquely determined from the data of the problem

$$\theta = \varepsilon_S - e_1. \quad (5.99)$$

Assume now that the second statement is not true. Then there exists a constant $\kappa > 0$, a set $S \subset (0, h_0]$, $0 \in \bar{S}$ and a strictly positive constant c such that $\|\tilde{V}^h - \theta\|_{L^\infty(|x| \leq -\kappa \ln h)} \geq c$ for all $h \in S$. On the other hand, the boundedness of the coefficients stated in Lemma 5.2.3 allows us to extract a subset $D \subset S$, $0 \in \bar{D}$, such that the condition (5.61) is verified. Then the Proposition 5.4.1 brings a contradiction. We have proved ad absurdum, the second statement of Theorem 5.1.3.

The third statement is also proved by using an ad absurdum argument. Out of any infinite set $S \subset (0, h_0]$ with $0 \in \overline{S}$ which contradicts the statement, a subset $D \subset S$ with $0 \in \overline{D}$ can be extracted so that (5.61) holds. Then the relation (5.63) implies the L_2 estimate. Moreover Lemma 5.4.4 says that $\varepsilon_i^h > \varepsilon_S$ for $i \geq 2$ and h small enough and provides the asymptotic behaviour of ε_1^h and $f(\varepsilon_1^h)$ as $h \rightarrow 0$, $h \in D$. Thus the subset S cannot exist.

The first statement is a direct consequence of the second one combined with Corollary 5.4.3. ■

Acknowledgements The authors wish to acknowledge the contribution of Naoufel Ben Abdallah and Florian Méhats, whose advice and remarks aided in the completion of this study.

Appendix 5.A : Further technical tools

Here is a basic result of functional analysis which is used in Section 5.3.2.

Lemma 5.4.5. *Let H_0 be a closed self-adjoint operator on a Hilbert space $\mathcal{H}$ with $\inf \sigma(H_0) = \varepsilon_0 > -\infty$ and $\inf \sigma_{ess}(H_0) = \varepsilon_{0,ess}$. Assume that E is a real Banach space of symmetric relatively bounded perturbations with relative bound 0 of H_0 with the estimate*

$$\forall \delta > 0, \exists C_\delta > 0; \forall W \in E, \forall \psi \in D(H_0), \quad \|W\psi\| \leq \delta \|W\|_E \|H_0\psi\| + C_\delta \|W\|_E \|\psi\|.$$

Then for any $W \in E$, the operator $H_0 + W$ is self-adjoint with domain $D(H_0 + W) = D(H_0)$, bounded from below and the mapping $\varepsilon : E \ni W \rightarrow \varepsilon(W) = \inf \sigma(H_0 + W) \in \mathbb{R}$ is continuous. Moreover if any $W \in E$ is a relatively compact perturbation of H_0 , then $\sigma_{ess}(H_0 + W) = \sigma_{ess}(H_0)$ for any $W \in E$ and the mapping ε is real analytic on the open set $\{W \in E, \varepsilon(W) < \varepsilon_{0,ess}\}$.

Proof. Any $W \in E$ is a relatively bounded perturbation with bound less than 1 of H_0 . Hence $H_0 + W$ is self-adjoint with $D(H_0 + W) = D(H_0)$. The mapping ε is well defined from E to $\mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ by

$$\varepsilon(W) = \inf_{\varphi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}} \frac{(\varphi, (H_0 + W)\varphi)}{\|\varphi\|^2}$$

is concave as an infimum of affine functions. It is continuous when it is locally bounded. This is again a consequence of our accurate relative boundedness with the second resolvent formula. Write for $\lambda \in \mathbb{R}$ and $\lambda \geq 2|\varepsilon_0| + 1$

$$(H_0 + W + \lambda)^{-1} = [\text{Id} + (H_0 + \lambda)^{-1}W]^{-1} (H_0 + \lambda)^{-1}$$

with

$$\|(H_0 + \lambda)^{-1}W\| = \|W(H_0 + \lambda)^{-1}\| \leq 3\delta \|W\|_E + \frac{C_\delta}{\lambda + \varepsilon_0} \|W\|_E.$$

For $\|W\|_E \leq R$, and by taking $\lambda > 2|\varepsilon_0| + 1 + 2RC_\delta$ and $\delta = 1/(6R)$, the resolvent $(\lambda + H_0 + W)^{-1}$ exists and equals the series

$$(H_0 + W + \lambda)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k [(\lambda + H_0)^{-1} W]^k (\lambda + H_0)^{-1} \quad \text{in } \mathcal{L}(\mathcal{H}).$$

Hence $\varepsilon(W) \geq -1 - 2|\varepsilon_0| - 2RC_{1/(6R)}$ when $\|W\|_E \leq R$. This ends the proof of the continuity.

The additional relative compactness assumption with the Weyl and the Kato-Rellich theorems (see [15]-IV) yield the second statement. ■

Appendix 5.B : More about the limit problem in dimension $d = 3$

In section 5.3.2, properties of the limit problem (5.31) were given introducing its equivalent minimization problem (5.38), (5.43) that we recall below :

$$\inf_{W \in \dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})} K_a(W) \quad (5.100)$$

where

$$K_a(W) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} (\nabla W)^2 dx - a \varepsilon(W), \quad a \geq 0 \quad (5.101)$$

and

$$\varepsilon(W) = \inf \sigma(-\Delta + U + W)$$

The potential W_a was defined as the unique solution of (5.100) and the value ε_a was defined by

$$\varepsilon_a = \varepsilon(W_a) \quad (5.102)$$

Through a monotonicity argument on $a \rightarrow \varepsilon_a$, it was proven that there exists a unique value $A \geq 0$ such that

$$\varepsilon_A = \varepsilon_S$$

However, it's possible to be more precise about the behaviour of the map $a \rightarrow \varepsilon_a$. In order to simplify notations, the space $\dot{H}^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ will be noted $\dot{H}^1$.

Proposition 5.4.2. *Consider ε_a given by (5.102) and*

$$\Sigma = \{a \geq 0; \varepsilon_a < 0\}$$

then

- $\Sigma = [0, \beta)$ where $\beta > 0$ may be $+\infty$.
- In the case $\beta < +\infty$, we have $\varepsilon_a = 0$ and $\|W_a\|_{\dot{H}^1} = \|W_\beta\|_{\dot{H}^1}$ on $[\beta, +\infty)$. In the case $\beta = +\infty$, we have $\lim_{a \rightarrow +\infty} \varepsilon_a = 0$.
- The map $a \mapsto \varepsilon_a$ is a strictly increasing bijection from $[0, \beta)$ to $[e_1, 0)$.

Proof. • For $a = 0$, the solution of the minimization problem (5.100) is $W_0 = 0$. This implies $\varepsilon_0 = \varepsilon(0) = e_1 < 0$. We deduce that $0 \in \Sigma$ and the first point of the lemma is a direct consequence of the continuity of ε_a on $\mathbb{R}^+$ and the growth of ε_a on Σ , given respectively by Lemma 5.3.4 and Lemma 5.3.5.

• For all $a \geq 0$, the potential $U + W_a$ is $-\Delta$ -relatively compact and the Weyl theorem implies $\sigma_{ess}(-\Delta + U + W_a) = [0, +\infty)$. Therefore, we have the following alternative : either $-\Delta + U + W_a$ has negative eigenvalues and $\varepsilon_a < 0$, or $\inf \sigma(-\Delta + U + W_a) = 0$. Consequently, if $\beta < +\infty$, we have $\varepsilon_a = 0$ on $[\beta, +\infty)$.

On the other hand, we have $\forall a_1, a_2 \geq 0$:

$$K_{a_1}(W) - K_{a_2}(W) = -(a_1 - a_2)\varepsilon(W), \quad \forall W \in \dot{H}^1$$

and taking the infimum in $\dot{H}^1$:

$$K_{a_1}(W) - K_{a_2}(W_{a_2}) \geq -(a_1 - a_2)\varepsilon(W), \quad \forall W \in \dot{H}^1$$

Now, if we consider $a_1, a_2 \geq \beta$, the equation above taken at $W = W_{a_1}$ gives :

$$K_{a_1}(W_{a_1}) - K_{a_2}(W_{a_2}) \geq 0$$

Permuting a_1 and a_2 in the previous calculations provides the inverse inequality and thus $K_{a_1}(W_{a_1}) = K_{a_2}(W_{a_2})$. We conclude that

$$\|W_a\|_{\dot{H}^1} = \|W_\beta\|_{\dot{H}^1}, \quad \forall a \geq \beta$$

Consider then the case $\beta = +\infty$. The fundamental mode ε_a is increasing negative on $\mathbb{R}^+$ and it will exist a constant $\varepsilon \leq 0$ such that

$$\lim_{a \rightarrow +\infty} \varepsilon_a = \varepsilon$$

Supposing that $\varepsilon < 0$, we will have

$$\varepsilon_a \leq \varepsilon, \quad \forall a \geq 0 \tag{5.103}$$

In addition, as $\varepsilon_a < 0$, we can apply Proposition 5.3.3 to see that $-\Delta W_a \geq 0$ and therefore

$$W_a \geq 0, \quad \forall a \geq 0 \tag{5.104}$$

For energies verifying (5.103), the equation (5.104) allows use to use the Agmon distance related to the potential $(U - \varepsilon)$ to extend estimation (4.39) to the whole space : we get $\forall a \geq 0$

$$\int_{\mathbb{R}^d} |e^{c_0|x|}\psi_a|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} |e^{c_0|x|}\nabla\psi_a|^2 dx \leq C \tag{5.105}$$

where ψ_a denotes the normalized eigenfunction related to ε_a (such an estimate was obtained in the proof of Lemma 5.4.4 in the linear case, i.e. with $W_a = 0$). Then, according to (5.105), we have for a radius r big enough :

$$\int_{B_r} |\psi_a|^2 dx \geq \frac{1}{2}$$

and therefore

$$\begin{aligned}
 \varepsilon \geq \varepsilon_a &= ((-\Delta + U + W_a)\psi_a, \psi_a) \\
 &\geq -||U||_{L^\infty} + \int_{B_r} W_a |\psi_a|^2 dx \\
 &\geq -||U||_{L^\infty} + \frac{1}{2} \inf_{B_r} W_a
 \end{aligned} \tag{5.106}$$

Applying Proposition 5.3.3 again, we have $-\Delta W_a = a|\psi_a|^2$, which gives $\forall x \in B_r$

$$\begin{aligned}
 W_a &= \frac{a}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x-y|} |\psi_a(y)|^2 dy \\
 &\geq \frac{a}{4\pi} \int_{B_r} \frac{1}{|x-y|} |\psi_a(y)|^2 dy \\
 &\geq \frac{a}{4\pi} \frac{1}{2r} \int_{B_r} |\psi_a(y)|^2 dy \\
 &\geq a \frac{1}{16\pi r}
 \end{aligned} \tag{5.107}$$

Gathering equations (5.106) and (5.107), we obtain $\exists C, D > 0$ s.t. :

$$Ca \leq D, \quad \forall a \geq 0$$

which is impossible. It allows to conclude :

$$\lim_{a \rightarrow +\infty} \varepsilon_a = 0$$

- The last point of the Lemma is a direct consequence of previous results. ■

Proposition 5.4.2 gives the behaviour of the fundamental energy ε_a for $a \geq 0$. It says also that if β is finite, the norm $||W_a||_{\dot{H}^1}$ is constant on $a \in \mathbb{R}^+ \setminus \Sigma$, however, it gives no information about the potential on Σ . In order to complete our analysis, we give in the following proposition a result on the growth of $||W_a||_{\dot{H}^1}$ on $\Sigma \setminus$.

Proposition 5.4.3. *With the notations of Proposition 5.4.2, the potential W_a verifies*

$$||W_a||'_{\dot{H}^1} \geq 0 \tag{5.108}$$

on $\Sigma \setminus \{0\}$.

It expresses the intuitive idea that when the parameter a increases, the source term of the Poisson equation in (5.44) grows and therefore the potential also increases. **Proof.** Suppose that we

$$(K_a(W_a))' = -\varepsilon_a, \quad \forall a \in \Sigma \tag{5.109}$$

then we will have

$$\begin{aligned}
 -\varepsilon_a &= \left(\frac{1}{2} ||W_a||_{\dot{H}^1}^2 - a\varepsilon_a \right)' \\
 &= \left(\frac{1}{2} ||W_a||_{\dot{H}^1}^2 \right)' - \varepsilon_a - a(\varepsilon_a)'
 \end{aligned}$$

and

$$(\|W_a\|_{\dot{H}^1})' = \frac{a}{\|W_a\|_{\dot{H}^1}}(\varepsilon_a)' \quad (5.110)$$

where we used that $W_a \neq 0$ for any $a > 0$. Indeed, if $W_a = 0$, $\varepsilon_a = \varepsilon(0) = e_1 = \varepsilon_{a=0}$ which is in contradiction with the last point of Proposition 5.4.2. Then, the sign (5.108) of $(\|W_a\|_{\dot{H}^1})'$ follows from (5.110) and the inequality

$$(\varepsilon_a)' \geq 0$$

Therefore, the proof is completed provided we show (5.109). Define the functional J_a on H^1 by :

$$J_a(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi|^2 + (U + W_a)|\psi|^2 dx, \quad \forall \psi \in H^1.$$

Applying the minimax principle, we can write :

$$\varepsilon_a = \inf_{\psi \in H^1(\mathbb{R}^3); \|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}=1} J_a(\psi), \quad (5.111)$$

and since $\varepsilon_a < 0$ the minimum is reached at the vector ψ_a appearing in (5.44). On the other hand, $\forall a \in \Sigma$, the Poisson equation –the second one in (5.44)– implies that $W_a = aG * \psi_a^2$, where G is the Green function of the Laplacian on $\mathbb{R}^3$ and therefore :

$$\varepsilon_a = \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi_a|^2 + (U + aG * \psi_a^2)\psi_a^2 dx.$$

Derivating the previous equation with respect to the variable a , we get :

$$\varepsilon'_a = 2 \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \psi_a \cdot \nabla \psi'_a + U \psi_a \psi'_a dx + a \left(\int_{\mathbb{R}^3} (G * \psi_a^2) \psi_a^2 dx \right)' + \int_{\mathbb{R}^3} (G * \psi_a^2) \psi_a^2 dx \quad (5.112)$$

Now, we remark that the map $b : (u, v) \mapsto \int_{\mathbb{R}^3} (G * u) v dx$, appearing in (5.112), is a bilinear, symmetric form on $L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)$. It happens to be continuous by estimate (5.22) and it verifies

$$\int_{\mathbb{R}^3} (G * \psi_a^2) \psi_a^2 dx = b(\psi_a^2, \psi_a^2)$$

Moreover, as a consequence of Lemma 5.3.4, the map $a \rightarrow \psi_a^2$ is differentiable from Σ to $L^1 \cap L^2(\mathbb{R}^3)$, and $(\psi_a^2)' = 2\psi_a \psi'_a$. This allows to express the derivative :

$$\left(\int_{\mathbb{R}^3} (G * \psi_a^2) \psi_a^2 dx \right)' = 2b(\psi_a^2, (\psi_a^2)') = 4b(\psi_a^2, \psi_a \psi'_a) = 4 \int_{\mathbb{R}^3} (G * \psi_a^2) \psi_a \psi'_a dx.$$

and equation (5.112) becomes :

$$\begin{aligned} \varepsilon'_a &= 2 \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \psi_a \cdot \nabla \psi'_a + (U + aG * \psi_a^2) \psi_a \psi'_a dx + \int_{\mathbb{R}^3} G * \psi_a^2 (2a\psi_a \psi'_a + \psi_a^2) dx \\ &= dJ_a(\psi_a) \cdot \psi'_a + \int_{\mathbb{R}^3} G * \psi_a^2 (a\psi_a^2)' dx \end{aligned} \quad (5.113)$$

Then, we note that the Euler-Lagrange related to the minimization problem (5.111) is :

$$dJ_a(\psi_a).v = 2\mu \int_{\mathbb{R}^3} \psi_a v dx, \quad \forall v \in H^1$$

where $\mu = \varepsilon_a$ is the multiplier corresponding to the constraint $\|\psi\|_{L_2(\mathbb{R}^3)} = 1$. Using $\|\psi_a\|_{L_2(\mathbb{R}^3)}^2 = 1, \forall a > 0$, we have $(\|\psi_a\|_{L_2(\mathbb{R}^3)}^2)' = 0$ and :

$$dJ_a(\psi_a).\psi'_a = 2\varepsilon_a \int_{\mathbb{R}^3} \psi_a \psi'_a dx = \varepsilon_a (\|\psi_a\|_{L_2(\mathbb{R}^3)}^2)' = 0.$$

Injecting the result above in (5.113), we obtain that :

$$\begin{aligned} \varepsilon'_a &= \frac{1}{a} \int_{\mathbb{R}^3} G * a\psi_a^2 (a\psi_a^2)' dx \\ &= \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} (G * a\psi_a^2) a\psi_a^2 dx \right)' \\ &= \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} a\psi_a^2 W_a dx \right)' \end{aligned}$$

According to the variational formulation of the Poisson equation $-\Delta W_a = a|\psi_a|^2$, it follows

$$\varepsilon'_a = \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla W_a|^2 dx \right)',$$

and from the definition (5.101) of K_a :

$$\begin{aligned} \varepsilon'_a &= \frac{1}{a} (K_a(W_a) + a\varepsilon_a)' \\ &= \frac{1}{a} (K_a(W_a)' + \varepsilon_a) + \varepsilon'_a \end{aligned}$$

This provides equation (5.109). ■

Bibliography

- [1] A. Ambrosetti, G. Prodi, *A Premier of Nonlinear Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [2] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells I. Prépublication IRMAR, 07-02 (2007), to appear in *Ann. I.H.P. An. Non Linéaire*.
- [3] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells II. Prépublication IRMAR, 07-03 (2007), to appear in *J. Math. Soc. of Japan*.
- [4] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier, Y. Patel. Computing the steady states for an asymptotic model of quantum transport in resonant heterostructures. *Journal of Computational Physics*, **219**(2), 644-670, 2006.
- [5] H. Brézis, *Analyse fonctionnelle, Théories et applications*, Masson, 1983.
- [6] M. Dimassi, J. Sjöstrand, *Spectral Asymptotics in the semi-classical limit*, Cambridge University Press, 1999.
- [7] I. Ekeland, R. Temam, *Convex analysis and variational problems. Classics in Applied Mathematics*, 28. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1999.
- [8] B. Helffer, *Semi-Classical Analysis for the Schrödinger Operator and Applications*, *Lecture Notes in Mathematics*, Springer-Verlag, vol.13.
- [9] B. Helffer, J. Sjöstrand, Multiple wells in the semi-classical limit I, *Comm. In PDE*, **9**(4), 337-348, 1984.
- [10] F. Nier, A variational formulation of Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$, *Comm. Part. Diff. Eq.* **18**(7-8), 1125-1147, 1993.
- [11] F. Nier, Accurate WKB approximation for a 1D problem with low regularity, *Serdica Mathematical Journal*, **34**(1) 113-126, 2008.
- [12] L. Nirenberg, On elliptic partial differential equations, *Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa*, **13**, 116-162, 1959.
- [13] J. Pöschel, E. Trubowitz, *Inverse Spectral Theory*, Academic Press, Boston, 1987.
- [14] C. Presilla, J. Sjöstrand. Transport properties in resonant tunneling heterostructures. *J. Math. Phys.*, **37**(10), 4816-4844, 1996.36.

- [15] M. Reed, B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics Vol. IV : Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1978.
- [16] B. Simon, Trace Ideals and their Applications, Cambridge University Press, London, 1979.