Formules de courant dans les systèmes mésoscopiques

Céline Gianesello

▶ **To cite this version:**

Céline Gianesello. Formules de courant dans les systèmes mésoscopiques. Mathématiques générales [math.GM]. Université de Toulon, 2011. Français. NNT : 2011TOUL0011 . tel-00680606

HAL Id: tel-00680606
https://theses.hal.science/tel-00680606

Submitted on 19 Mar 2012

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

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

UNIVERSITÉ DU SUD TOULON VAR

ÉCOLE DOCTORALE 352

THÈSE présentée par :

Céline GIANESELLO

soutenue le : **11 novembre 2011**

pour obtenir le grade de Docteur en Mathématiques

Spécialité : Physique mathématique

FORMULES DE COURANT DANS LES SYSTEMES MESOSCOPIQUES

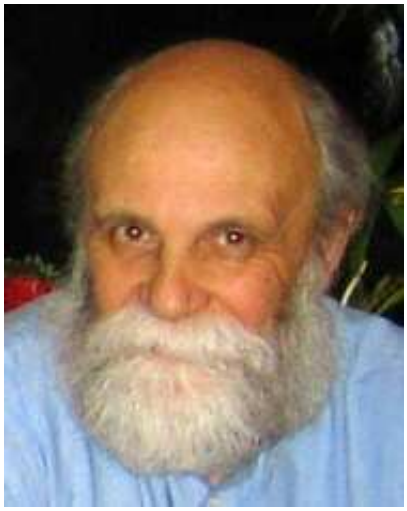
THÈSE dirigée par :

Mr Valentin ZAGREBNOV	Professeur, Centre de Physique théorique, Marseille

JURY :

Mr BENTOSELA François	Professeur, Centre de Physique théorique Marseille
Mr CORNEAN Horia	Professeur, Université d'Aalborg, Danemark
Mr EXNER Pavel	Professeur, Université technique tchèque, Prague
Mr JOYE Alain	Professeur, Université Grenoble I, Saint Martin d'Hères
Mr PILLET Claude-Alain	Professeur, Université Sud Toulon-Var, La Garde
Mr NEIDHARDT Hagen	WIAS, Berlin
Mr ZAGREBNOV Valentin	Professeur, Centre de Physique Théorique, Marseille

Remerciements



Une pensée...

Je remercie tout d'abord, et j'ai une pensée particulière pour Pierre Duclos qui a été mon Directeur de thèse d'octobre 2008 à janvier 2010. Nous nous sommes rencontrés pour la première fois durant les cours de la deuxième année de master et nous avons travaillé ensemble pendant le stage de fin d'année. J'ai tout de suite apprécié sa façon de conter les mathématiques et la physique, sa soif de connaissance et sa créativité sans limites. Ce qui était remarquable chez lui à mes yeux, c'était aussi son sens de la collaboration, sa facilité à communiquer et à se mettre à la hauteur de son interlocuteur, quelque soit sa provenance. Quelque soit le sujet, en ses mots, il devenait tout de suite passionnant. Ce fût un honneur de travailler à ses côtés pendant ce cours laps de temps. "Ce qui se s'entend bien s'énonce clairement", sa phrase culte et qui résonne dans ma tête.

Je remercie également Valentin Zagrebnov tout d'abord parce qu'il m'a permis de terminer ma thèse et s'est impliqué autant qu'il le pouvait dans cette tâche. Il m'a grandement aidé par ses conseils et ses corrections pour achever les travaux commencés avec Pierre, me permettre de faire paraitre un article et d'en achever un second. Plus personnellement, je tiens à le remercier car il a été mon professeur depuis ma première année universitaire, puis tout au long de mon cursus, lors des cours de physique mathématique, et de physique statistique notamment. J'ai grâce à lui eu envie de continuer à étudier la physique.

Dans ma vie d'étudiante, il y a deux personnes qui, par leur charisme, leur pédagogie et leur façon d'être ont été décisives : un de mes professeurs de première au lycée, M. Amouraben, et Valentin Zagrebnov. Mon amour de la physique est né de l'obtention d'un 2/20 en première ! J'ai

alors découvert les secrets de la pensée physicienne, la logique associée à cette discipline, mais aussi l'envie de me battre pour comprendre ce monde. Est ensuite venue la physique mathématique en L1, son efficacité, sa logique implacable, le monde de l'abstraction, des démonstrations et de la création.

C'est au fil des années universitaires que certaines questions sont apparues, au fil de la découverte de nouvelles disciplines, jusqu'alors insoupçonnées. L'interaction mathématique/physique et la philosophie qui en découle me passionnent, et sont à l'origine de mon orientation en doctorat de mathématiques. Les mathématiques gouvernent-elles le monde ? Sont-elles là avant la physique ou bien la physique est elle la, et l'on crée les mathématiques pour l'expliquer ? Dans ce dernier cas, comment expliquer le monde qui nous entoure de manière impartiale ? Les mathématiques ne sont-ils pas au final la traduction en langage "humain" de la nature ? Autrement dit, ne sont-ils pas l'écriture de l'observation du monde par l'Homme ? Les théoriciens jouent-ils à Dieu lorsqu'ils prévoient des phénomènes naturels à l'aide d'outils (les mathématiques) créés par eux-mêmes de toutes pièces ?

Je remercie également David Krejčiřík pour m'avoir contacté après la disparition de Pierre et m'avoir permis lui aussi de terminer un chapitre important de ma thèse en travaillant ensemble à Prague. J'ai grâce à ce voyage pu découvrir un nouveau pays, une nouvelle culture et des gens accueillant tels mes co-bureau à l'institut, Gerry, Adam et Petr, son étudiante, Helena, mais aussi des gens formidables et qui m'ont été d'une aide exceptionnelle pour mon acclimatation à la ville, je veux parler de Milena sa tante ainsi que de sa grand mère. Mille merci pour votre sympathie.

Je remercie les rapporteurs et membres du jury d'avoir accepté de participer à l'achèvement de ces trois années de travail.

Je remercie ma famille pour m'avoir soutenu pendant toute ma scolarité, ce qui n'a pas été chose facile, j'en conviens ! Les encouragements de mes parents, leur optimisme sans faille et leur croyance en moi m'ont été d'une grande aide pendant toutes ces années. Je leur dois beaucoup, et je leur en suis très reconnaissante. Depuis le début, ils m'ont poussé à aller de l'avant, ils m'ont toujours intéressée au monde qui m'entourait, m'ont inculquée la valeur du travail et de l'école.

Je remercie mes collègues de bureau et de labo, Olivier, Emmanuelle, Jordane et Ilaria pour nos discussions, leur bonne humeur et leur soutien. J'ai une pensée pour Flo qui a aussi été présent lors de mes mauvaises passes et mes pertes de confiance.

J'ai enfin une pensée particulière pour mon chéri qui termine aussi sa thèse en ce moment. Je ne serais jamais parvenue au bout de cette épreuve mouvementée sans son soutien et son optimisme. Autant après le décès de Pierre et pendant mon départ en République Tchèque que chaque jours où j'ai douté et cherché un repère. Merci pour tout, je te souhaite bon courage pour achever ton manuscrit de thèse.

Table des matières

1 Introduction **5**

2 Equilibre, état stationnaire et courant **10**
2.1 Quelques mots de physique mésoscopique 10
2.1.1 Equilibre 10
2.1.2 Hors équilibre : courant, calcul heuristique 14
2.2 Mécanique statistique quantique et théorie des algèbres d'opérateurs 15
2.2.1 Système Quantique 17
2.2.2 C* algèbre 19
2.2.3 Algèbre de von Neumann 19
2.2.4 L'espace des états d'un C*-algèbre 20
2.3 Construction d'un NESS 21
2.3.1 Branchement instantanné 21
2.3.2 Branchement adiabatique 22
2.3.3 Système sans partition initiale 22
2.4 Exemple de calcul de courant et formule de Landauer Büttiker 23
2.4.1 Le système à volume fini 25
2.4.2 Le courant dans le système tronqué 30
2.4.3 La limite de volume infini de l'état et du courant 31
2.4.4 La limite adiabatique de l'état et du courant 37

3 Courant transient et courant à l'équilibre stationnaire dans l'approche sans partition initiale : le cas discret **44**
3.1 Le modèle et le théorème principal 44
3.2 État et opérateur courant 46
3.3 Le théorème principal 47
3.4 Preuve du théorème principal 48
3.4.1 Rappel de théorie spectrale et de théorie de la diffusion 48
3.4.2 Preuve de (i) 50
3.4.3 Preuve de (ii) 52
3.4.4 Preuve de (iii) 54
3.4.5 Preuve de (iv) 55

4 Le courant circulant dans un graphe **58**
4.1 Matrice de diffusion et transmittance . . . 58
4.1.1 Matrice de transition T et matrice de diffusion S . . . 60
4.1.2 Les éléments de la matrice de transition . . . 60
4.2 Calcul de la matrice S pour le modèle δ . . . 62
4.2.1 Méthode utilisée dans [28] et références citées . . . 63
4.2.2 Deuxième méthode : matrice de diffusion pour la paire (H_g, H_0) et formule de Krein . . . 64
4.3 Courant et Formule de Landauer Büttiker . . . 65
4.3.1 Expression du courant dans le cas d'un échantillon de longueur finie . . . 65
4.4 Modèles . . . 69
4.4.1 Application au modèle nu ponctuel ($g = 0$) . . . 69
4.4.2 Application au modèle δ . . . 70
4.4.3 Application au modèle nu avec échantillon intervalle . . . 72
4.4.4 Modèle δ (échantillon intervalle) . . . 74

5 Guide d'onde quantique et graphes **76**
5.1 Introduction . . . 76
5.1.1 Matrice de diffusion et transmittance . . . 77
5.2 Le guide torsadé . . . 78
5.3 Introduction du modèle et théorème principal . . . 79
5.4 Preuves . . . 83
5.4.1 Première étape : estimation de (5.23) . . . 83
5.4.2 Deuxième étape . . . 86
5.4.3 Troisième étape . . . 86
5.5 Remarques et conclusion . . . 91

6 Annexes **93**
6.1 Généralités . . . 93
6.1.1 Guides d'onde : courbure, torsion, repère de Frenet . . . 93
6.1.2 Espaces de Sobolev et espaces à poids . . . 95
6.2 Annexe du chapitre 2 . . . 96
6.2.1 Définition . . . 96
6.2.2 Démonstration du lemme 2.4.2 . . . 97
6.2.3 Preuve du théorème 2.4.6 . . . 99
6.2.4 L'état dans la limite de volume infini . . . 102
6.2.5 Construction d'un coeur pour H . . . 105
6.2.6 Le courant dans la limite de volume infini : preuve du théorème 2.4.12 . . . 108
6.3 Annexe au chapitre 4 . . . 113
6.3.1 La formule de Landauer-Büttiker : démonstration du théorème 5.1.2 . . . 113
6.3.2 Formule de Krein et transmittance . . . 116
6.3.3 Formule de Lippmann Schwinger . . . 118
6.4 Annexe du chapitre 5 . . . 119

Chapitre 1

Introduction

Dans cette section, on discute tout d'abord du contexte historique et technologique général. Le préfixe nano est utilisé en référence à l'échelle du nanomètre. Les nanosciences s'intéressent à l'étude des systèmes de physique/ biologie/ chimie, de dimension 10^{-9} mètre. La mécanique quantique stipule que de nouveaux effets apparaissent en conséquence de l'échelle nanométrique. Les nanosciences étudient ces nouveaux phénomènes au niveau des nano-objets mais aussi l'interaction entre nano-objets. Le travail des chercheurs et techniciens en nanosciences s'étend de la création ou synthèse d'objets nanométriques à l'étude et la conception de systèmes constitués de plusieurs nano-systèmes. Les nanotechnologies quant à elles sont l'étude des procédés et des concepts des nanosciences en vue d'applications.

Depuis une vingtaines d'années, la recherche et l'ingénierie liées aux nanosciences connaissent un important essor dû aux progrès technologiques de fabrication. Les nouveaux procédés permettent la mise au point tout d'abord de nouveaux systèmes de conception et ensuite permettent l'expérimentation de plus en plus pointue et précise. Les nanotechnologies apparaissent partout dans la vie de tous les jours, et ce, grâce à la possibilité de concevoir des nano-objets et donc des nano-composants en masse, et non pas à l'unité.

Dès 1959, Richard Feynman croit en la possibilité de manipuler et de contrôler la matière à l'échelle atomique. Il déclare ceci lors de la réunion annuelle de l'Association américaine de physique. Cette dernière reste sceptique, partisane de la théorie physique traditionnelle qui stipule que la matière à l'échelle des particules est instable, mais aussi s'appuyant sur les principes de la mécanique quantique : les atomes sont des "entités floues" dont l'existence n'est donnée que par des "probabilités de présence".

Cependant, ce n'est qu'en 1989 que Don Eigler et Erhard Schweizer, physiciens au centre de recherche Almaden d'IBM en Californie, ont réussi à manipuler individuellement des atomes. L'anecdote est la suivante : le logo IBM fut gravé sur une surface de nickel par le déplacement de 35 atomes de xénon à l'aide de la pointe en tungstène d'un microscope à effet tunnel (voir [27]).

A partir de cet exploit, une ère nouvelle de l'électronique a commencé, celle de la miniaturisation et de l'électronique moléculaire. Depuis cette découverte, les laboratoires et les industries de microélectronique ont concentré leurs efforts sur la création d'objets de plus en plus petit, mais aussi sur la possibilité d'en fabriquer un nombre important avec un minimum de déchets. Les applications des nano-systèmes sont multiples, notamment dans le domaine de la microélectronique, des matériaux, de la biologie, de la photonique ou dans les technologies de l'information. Les entreprises concevant des puces électroniques mettent au point de nouveaux procédés de photolithographie et parviennent à graver sur des galettes de silicium des circuits dont les traits les

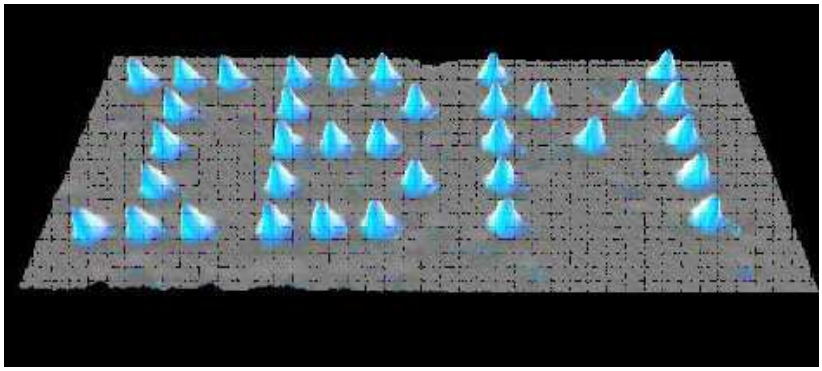


FIGURE 1.1: Expérience menée par Don Eigler et Erhard Schweizer pour IBM

plus fins atteignent quelques dizaines de nanomètres. Le domaine de la génétique utilise également cette découverte avec l'espoir d'assembler des brins d'ADN, l'idée étant de concevoir des "machines moléculaires" à l'image de ce que la nature nous offre. Serons-nous un jour capable de construire des systèmes moléculaires aussi complexes que ceux que l'on trouve naturellement ? Se pose alors la question de l'interaction de ces systèmes nanoscopiques entre eux. Si depuis la découverte de Eigler et Schweizer les réalisations de nano-objets moléculaires ont vu le jour dans les laboratoires, leur réalisation pour l'industrie et leur commercialisation n'est pas encore d'actualité.

En 2010, les russes Andre Geim et Konstantin Novoselov sont récompensés par le prix Nobel de physique pour leurs travaux en matière condensée. Ces deux professeurs à l'université de Manchester sont les découvreurs du graphène en 2004. Ils mettent en évidence les propriétés de ce nouveau matériau qui est un cristal bidimensionnel constitué d'atomes de carbone arrangés de manière hexagonale, l'empilement de graphène constituant le graphite. Ils contredisent notamment Landau et Peierls en démontrant la possibilité d'obtenir un matériau deux dimensionnel stable.

Pour reprendre les mots de Geim et Novoselov, Landau et Peierls prétendaient que des cristaux deux dimensionnels étaient instables d'un point de vue thermodynamique et ne pouvaient donc pas exister. Leur théorie a mis à jour qu'une contribution divergente des fluctuations thermiques pour des cristaux de dimensions faibles devraient mener à des déplacements d'atomes de dimensions comparables aux dimensions inter-atomiques pour des températures finies. Cet argument a été par la suite supporté et vérifié par de nombreuses expériences. En effet, les températures de fusion de films fins décroissent rapidement lorsque l'on diminue l'épaisseur du film étudié. Ces films deviennent alors instables, par exemple, ils se décomposent où se découpent en ilots, lorsque leur épaisseur n'est plus que d'une douzaine de couches d'atomes.

C'est pour cette raison que les films de couches mono-atomiques ont pendant longtemps été considérés comme une partie de structures trois dimensionnelles plus grandes et obtenues par la technique de l'épitaxie. Cette technique consiste à faire croitre "du cristal sur du cristal". Les deux cristaux sont de natures minéralogiques différentes mais possèdent des propriétés de symétrie communes de leurs réseaux cristallins. On utilise un cristal substrat comme germe cristallin de croissance et on fait croitre la couche par un apport d'élément constituant la nouvelle couche Les ions du cristal orientés remplacent les ions du cristal support durant la croissance (ce qui im-

plique qu'ils possèdent le même signe). Par exemple, l'obtention du graphène se fait en chauffant à une température de 1300˚C un échantillon de carbure de silicium. De cette manière, les atomes de silicium des couches externes s'évaporent et après un certain temps, les atomes de carbones restants se réorganisent en fines couches de graphène. Jusqu'en 2004 et la découverte du graphène ainsi que d'autres cristaux deux dimensionnels, on a donc présumé que les matériaux deux dimensionnels ne pouvaient pas exister. Ces matériaux sont apparus comme possédant des propriétés cristallines de hautes qualités.

Si l'on prend le cas du graphène, voir l'article [18] et les références qui y sont présentées, ses propriétés électroniques sont novatrices. En effet, les porteurs de charges sont capables de parcourir des milliers de distances inter-atomiques sans être diffusés. De plus, les électrons se déplacent sur le graphène à une vitesse trente fois plus élevées que sur le silicium, c'est-à-dire à 1000 km/s. Il possède une conductivité 200 fois supérieure à celle de l'acier et est six fois plus léger que ce dernier. Un ajout de graphène dans un polymère permet donc d'augmenter la dureté et la stabilité thermique de ce polymère. Les nanotubes de carbones, ceux-ci sont obtenus en enroulant des films de graphène dans une direction donnée et en reconnectant les liaisons carboniques entre elles. Il est assez surprenant de s'imaginer que dès les années 1954 et l'invention du crayon à papier, on produisait sans le savoir du graphène. En effet, l'anecdote relatée dans [18] explique que le graphite est le constituant de la mine des crayons à papier. Ainsi, lors de l'écriture sur du papier, on produit irrémédiablement des couches de graphène, et parmi celles ci, sans doute y a-t-il des couches monoatomiques.

Finalement, l'existence de telles structures cristallines a pu être justifiée théoriquement. En effet, la cristallite (matière composée de monocristaux) deux dimensionnelle obtenue est bloquée dans un état métastable car elle est extraite de structures trois dimensionnelles. C'est alors leur faible dimension (inférieure à un millimètre) ainsi que la force des liaisons inter-atomiques qui assurent que des fluctuations thermiques ne conduiront pas à des dislocations, même pour des températures élevées.

Un autre point de vue suggère que le confinement de structures trois dimensionnelles dans la troisième dimension engendre une stabilité intrinsèque des cristaux deux dimensionnels extraits. La déformation de ces structures 3D entraine un gain d'énergie élastique tout en supprimant dans le même temps les vibrations thermiques, lesquelles, au dessus d'une certaine température peuvent minimiser l'énergie libre du système.

Ce sont pour ces raisons que depuis quelques décennies, l'étude du transport quantique dans les systèmes mésoscopiques intéresse de très nombreux expérimentateurs et théoriciens. Les travaux de Landauer [47] puis Büttiker ont démontré la relation entre la conductance d'un système de mécanique quantique et le problème de diffusion qui lui est associé.

Rolf Landauer est un physicien allemand juif qui fuit l'Allemagne nazie et se réfugia aux États-Unis. Il fut diplômé en physique de l'université de Harvard et travailla pour la NASA puis sur le thème des semiconducteurs chez IBM. Il fut l'un des premier à contredire l'idée générale qui déclarait "que le moindre bit d'information (code binaire 1 ou 0) consomme de l'énergie, ce qui est une contrainte inévitable pour un ordinateur". Il rencontra Markus Büttiker, physicien suisse diplômé de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Zürich qui vint travailler également chez IBM. En effet, jusqu'aux travaux de Landauer et Büttiker, la conductance est définie comme le rapport entre le courant dans le système et la différence de potentiel. La formule de Landauer-Büttiker, très largement utilisée dans la physique, exprime alors le courant à l'aide de la transmittance, c'est-à-dire à l'aide des probabilités de diffusion ou de transmission des porteurs de charges à travers le système quantique. Les expériences de transport électronique à travers un échantillon

ont démontré l'existence de phénomènes nouveaux comme l'effet Aharonov-Bohm ou l'effet Hall quantique. Landauer et Büttiker travaillèrent alors ensemble sur ces effets.

L'importance de ces découvertes ainsi que les perspectives d'applications pour la nano-électronique ont suscité un très large engouement autant dans la recherche expérimentale que théorique. La compréhension de ces phénomènes de transport quantique soulève encore de nombreuses questions. On cherche à donner un cadre rigoureux au transport quantique dans les systèmes mésoscopiques. Pour cela il faut tout d'abord perturber un système initialement à l'équilibre thermodynamique, prouver l'existence d'un état stationnaire hors équilibre (NESS, Non Equilibrium Steady State) et ensuite calculer le courant traversant le système dans cet état. Dans un NESS, c'est la présence de forces extérieures qui permet de garder le système dans un état hors équilibre permanent. Si l'on supprime ces forces extérieures, le système est susceptible d'évoluer spontanément vers un état d'équilibre dit stable.

Dans les publications récentes aux moins deux modes opératoires différents sont considérés. Décrivons tout d'abord, de manière simplifiée le premier mode opératoire : on considère un système constitué d'un échantillon isolé et de plusieurs fils distincts et séparés. Au temps initial, les différentes composantes du système (fils+échantillon) sont chacuns séparément à l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire dans un état stable. Les fils sont à des potentiels chimiques différents. On couple alors instantanément les parties du système entre elles et on laisse évoluer le système ainsi couplé. Ce premier mode opératoire est utilisé dans des travaux comme [5] et [23]. On cherche à montrer l'existence d'un NESS, puis à calculer le courant traversant le système dans cet état. Dans le second mode opératoire, utilisé dans [16] et [21], les trois composantes du système sont déjà couplées au temps initial que l'on suppose loin dans le passé. Le système complet est dans un état d'équilibre thermodynamique stable. Le système couplé {échantillon+fils} est à un potentiel chimique identique et unique. On branche alors adiabatiquement un biais de potentiel sur les fils et on laisse ainsi évoluer le système. Il s'agit alors de montrer l'existence d'un état stationnaire hors équilibre, puis de calculer le courant traversant le système lorsque ce dernier est dans cet état. Il faut bien souligner que l'état initial du système est différent dans les deux modes opératoires : on considère dans les deux cas que le système est au temps initial dans un état de Gibbs mais les opérateurs Hamiltoniens en jeu au temps initial sont différents. En outre les dynamiques sont engendrées par des Hamiltoniens différents. Dans les deux modes opératoires, on cherche également à retrouver dans un cadre rigoureux la formule de Landauer-Büttiker

Aux vues de ces deux modes opératoires de nombreuses questions sont posées : tout d'abord, le système va-t-il évoluer vers un état NESS ? S'il existe, cet état stationnaire hors équilibre obtenu via deux modes opératoires différents est-il le même ? Le courant existe-t-il ? S'il existe, est-il le même pour les deux modes opératoires ? En effet, la question de l'existence du courant n'est pas évidente : il faut rappeler que le courant est défini comme la trace de l'opérateur courant dans le NESS ; or le NESS à volume infini n'est pas à trace et l'opérateur courant n'est pas borné au moins dans le cas des sytémes continus. Si d'un point de vue physique il est raisonnable d'espérer que ce courant existe, la preuve mathématique de ce fait reste à établir dans le cas du branchement adiabatique du biais de potentiel. La réponse est affirmative dans le cas de l'autre mode opératoire (voir [5] et [23]). S'il existe dans le second mode opératoire, est-il le même pour les deux cas ?

Il y a différentes manières de traiter le sujet et répondre à ces interrogations. Tout d'abord on peut envisager une recherche et une étude directe du NESS et du courant. On peut aussi ne regarder que la partie linéaire de l'état et du courant, montrer l'existence de la partie linéaire du

NESS et l'existence de la réponse linéaire en courant. Cette approche bien que ne permettant pas de démontrer l'existence de l'état et du courant complet, permet de donner le comportement pour les petits biais. Dans la même idée, on peut chercher à prouver l'existence de la partie quadratique de l'état et du courant. Une dernière approche est l'étude de modèles simples, pour lesquels on est capable de tout calculer plus ou moins explicitement ; en outre les résultats obtenus pour ces modèles peuvent être interprétés physiquement et confirmés (ou non) par l'expérience. On pourra alors s'inspirer de cette étude pour traiter le cas général.

Dans le cadre de cette thèse, on considère dans une première partie du travail (chapitres 2, 3 et 4 , le cas d'un branchement adiabatique du biais de potentiel sur un système unidimensionnel sans partition initial (voir section 2.3.3). On démontre que le courant complet est uniformément borné par rapport à la vitesse de branchement adiabatique (voir le théorème 2.4.13), lorsque celle-ci tend vers zéro. On démontre également l'existence de la partie linéaire de l'état (voir section 2.4 et le théorème 2.4.25) ainsi que l'existence de la réponse linéaire en courant (théorème 2.4.26). Le travail est grandement inspiré de la publication [16]. On traite cependant d'un système plus singulier, que dans [16], du moins en dimension 1. La démonstration permet de considérer des potentiels échantillon non bornés. On a également démontré l'existence de l'état complet et du courant complet dans la limite de volume infini (théorèmes 2.4.11 et 2.4.12). Une autre nouveauté est aussi en cours de recherche mais ne figure pas dans ce travail : l'étude de la partie quadratique de l'état et du courant. Enfin, on a illustré la théorie générale par des exemples élémentaires (voir section 4.4).

Dans la dernière partie (voir le chapitre 5), on s'intéresse au courant pour des systèmes en trois dimensions. On suppose que l'état stationnaire hors équilibre existe, et à partir de cela, on démontre la formule de Landauer-Büttiker. L'intérêt est d'appliquer ces résultats aux cas des guides d'ondes quantiques. Quelle est l'expression du courant dans ces guides d'onde ? Quelle est l'influence de la géométrie du guide d'onde sur le courant et donc sur les propriétés microscopiques du guide ? On traitera le cas de guides d'ondes courbés et torsadés. L'idée est bien évidemment de traiter des problèmes les plus réalistes possibles. On s'intéresse donc à des défauts propres à la fabrication et à l'utilisation faite des guides d'onde quantique.

Chapitre 2

Equilibre, état stationnaire et courant

Dans ce premier chapitre, on discute du contexte théorique. Dans une première partie, on introduit la notion de système à l'état d'équilibre à l'aide des principes de la mécanique statistique quantique et de système hors équilibre. On définit l'équilibre de Gibbs, la distribution de Fermi Dirac et certains principes comme la notion de courant et de perturbation d'un équilibre, notions qui seront nécessaires pour l'étude du NESS.

Dans une seconde partie, on introduit l'état stationnaire hors équilibre, on le définit à l'aide de la théorie des $\star-$algèbres. La partie suivante développe les différents procédés utilisés pour la construction de NESS. La partie 4 présente le procédé qui fait l'objet de cette thèse, c'est-à-dire l'approche sans partition initiale. On termine ce chapitre en définissant de manière plus rigoureuse la notion de courant et l'on traite à titre d'exemple le cas de la réponse linéaire.

2.1 Quelques mots de physique mésoscopique

2.1.1 Equilibre

L'état macroscopique d'un système est un mélange statistique d'états microscopiques ou états "purs". Ces derniers sont les états propres de l'Hamiltonien. L'état macroscopique est donc constitué d'une infinité d'états microscopiques. Dans le cas d'un système isolé, l'Hamiltonien ne dépend pas du temps, il en est donc de même pour les états purs. Ces états purs sont alors les solutions de l'équation suivante :

$$H|\varphi_l^i >= E_l|\varphi_l^i >$$

où E_l sont les énergies possibles du système. Cependant, dans un système macroscopique, même à l'équilibre macroscopique, il y a constamment des transitions entre états. Ces transitions se décrivent à l'aide de probabilités. La probabilité de transition d'un système qui est initialement dans l'état l au temps t_0 vers un état m après un temps δt est notée $P_{ml}(t_0, t_0 + \delta t)$. L'évolution d'un système macroscopique est markovienne, c'est à dire, qu'une fois que le système macroscopique a atteint un équilibre, il "oublie" la manière avec laquelle il a atteint cet équilibre. La conséquence est donc que l'évolution des sous-systèmes microscopiques sera également markovienne et donc que la probabilité de transition d'un état vers un autre sera indépendante du temps initial. Si l'on appelle p_{ml} la probabilité de transition par unité de temps de l'état m vers l'état l alors

$$P_{ml} = p_{ml}dt, \quad P_{ll} = 1 + p_{ll}dt$$

a. Système isolé

On note $P_l(t)$ la probabilité pour que le système soit dans l'état l au temps t. Dans le cas d'un système macroscopique isolé, on note dans ce cas la probabilité de transition par unité de temps p^{is}_{lm}, l'évolution dans le temps du mouvement du système à l'échelle macroscopique est donnée en mécanique statistique par l'**équation maîtresse**

$$\boxed{\frac{dP_l}{dt} = \sum_m (p^{is}_{lm} P_m(t) - p^{is}_{ml} P_l(t)),} \tag{2.1}$$

où $p^{is}_{ml} = p^{is}_{lm} \geq 0$. Ces coefficients respectent la conservation de l'énergie, c'est-à-dire qu'ils ne relient que des états l et m de même énergie :

$$p^{is}_{lm} = 0, \quad |E_l - E_m| > \delta E. \tag{2.2}$$

Remarque 2.1.1. *L'équation* (2.1) *se généralise à la description de l'évolution de tout processus markovien stationnaire ou processus aléatoire. Bien entendu, dans le formalisme de la mécanique quantique on s'intéresse aux amplitudes de probabilité, mais on démontre sous certaines hypothèses supplémentaires cette équation.*

Remarque 2.1.2. *L'équation* (2.1) *régit l'évolution dans le temps du système à l'échelle macroscopique. Elle n'est pas invariante par renversement du temps. Cela se traduit physiquement par l'irréversibilité de l'évolution du système macroscopique. Cependant, les équations quantique* ***(équation de Schrödinger)*** *ou classique régissant l'évolution d'un système à l'échelle microscopique sont, elles, invariantes par renversement du temps.*

Remarque 2.1.3. *On appelle* ***distribution micro canonique*** *la distribution des états microscopiques d'un système isolé à l'équilibre. Elle est donnée par :*

$$P^{is}_l(E) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E)} & si \quad E \leq E_l \leq E + \delta E \\ 0 & sinon \end{cases} \tag{2.3}$$

où $\Omega(E)$ désigne le nombre d'états accessibles.

b. Système en contact avec un thermostat

On appelle S le système mis en contact avec un thermostat T de température θ. Le système $\{S + T\}$ est supposé isolé, et l'énergie d'un état $E_{l,L}$ où l désigne un état microscopique du système S et L un état microscopique de T est donné par

$$E_{l,L} = E_l + E_L$$

Ainsi, l'équation d'évolution de $\{S + T\}$ isolé est de la même forme que (2.1)

$$\boxed{\frac{dP_{l,L}}{dt} = \sum_{m,M} (p^{is}_{l,L;m,M} P_{m,M} - p^{is}_{m,M;l,L} P_{l,L})} \tag{2.4}$$

et les coefficients $p^{is}_{l,L;m,M}$ satisfont à des conditions similaires à (2.2). La probabilité $P_{l,L}$ que le système $S + T$ se trouve dans l'état l est donnée par le produit

$$P_{l,L} = P^{is}_L(E_{tot} - E_l) P_l \tag{2.5}$$

où E_{tot} désigne l'énergie totale et fixée du système $S+T$ et $P_L^{is}(E_L)$ désigne la distribution micro canonique pour le thermostat Si l'on considère à présent le système S seul interagissant avec le thermostat T alors la probabilité pour que S soit dans un état l est donnée par la somme des probabilités pour que les états microscopiques du système S passe d'un état L à un état l :

$$P_l = \sum_L P_{l,L}. \tag{2.6}$$

En utilisant (2.4), (2.5) et (2.6) , l'évolution temporelle de l'état macroscopique de S est donc

$$\boxed{\frac{dP_l}{dt} = \sum_m (p^T_{l,m} P_m - p^T_{m,l} P_l),} \quad p^T_{m,l} = \sum_{L,M} p^{is}_{l,L;m,M} P^{is}_L(E_{tot} - E_l)$$

Remarque 2.1.4. *La distribution à l'équilibre des états microscopiques d'un système en contact avec un thermostat est appelée* ***distribution canonique*** *et est donnée par*

$$P_l^{can} = \frac{1}{Z} e^{-E_l/k_b\theta}, \tag{2.7}$$

avec

$$Z = \sum_l e^{-E_l/k_b\theta}.$$

c. Système en équilibre avec un réservoir de particules

On considère ici le cas d'un système S en contact thermique avec un réservoir R de taille beaucoup plus grande. Les deux systèmes peuvent échanger des particules et de l'énergie. On appelle cela la distribution **grand-canonique.** Le réservoir peut être considéré comme un réservoir de particules et un thermostat, en ce sens que l'on suppose que l'état macroscopique du système R reste inchangé au cours des échanges d'énergie et/ou de particules avec S. On suppose que ces particules sont indiscernables et que le système $S+R$ est isolé et à l'équilibre. La différence avec les deux cas évoqués précédemment réside dans le fait que dans l'approche grand-canonique les paramètres extérieurs sont l'énergie , le potentiel chimique et le volume.

Les états microscopiques du systèmes $S+R$ sont caractérisés par la donnée d'un l et d'un L. L'énergie et nombre total de particules du système total sont donc

$$\begin{aligned} E_{l,L} &= E_l + E_L \\ N_{l,L} &= N_l + N_L \end{aligned}$$

La probabilité notée P_l^G pour le système S de se trouver dans l'état (l) est donnée par la distribution grand-canonique :

$$P_l^G = \frac{1}{\Xi} e^{-(E_l - \mu N_l)/k_b\theta}, \quad \Xi := \sum_l e^{-(E_l - \mu N_l)/k_b\theta} \tag{2.8}$$

où la sommation se fait sur toutes les valeurs possibles pour N_λ et où E_λ désigne l'énergie des états individuels possibles pour chacune des particules du système.

Remarque 2.1.5. *Cette formule se généralise rigoureusement dans le cas d'un système de taille macroscopique. Soit y une variable interne et y_l la valeur qu'elle prend dans l'état l. On note $\rho(E,N,y)dEdNdy$ le nombre d'états microscopiques l dont l'énergie est E à dE près, dont le nombre de particules est N à dN près et dans laquelle la grandeur considérée prend la valeur y à dy près. Alors, la distribution de la variable interne y est donnée par :*

$$w^G(y)dE = \frac{1}{\Xi}\int_0^\infty dN \int_{E_0}^\infty dE\rho(E,N,y)e^{-(E-\mu N)/k_b\theta}$$

où

$$\Xi := \int_0^\infty dN \int_{E_0}^\infty dE \int dy\rho(E,N,y)e^{-(E-\mu N)/k_b\theta}$$

Le nombre moyen d'occupation de l'état λ vaut

$$\overline{N}_\lambda = -k_b\theta\partial_\mu \ln \Xi$$

Ce nombre moyen d'occupation est facile à calculer. Pour cela, il faut distinguer deux cas : les particules sont des fermions et les particules sont des bosons. Dans le premier cas, le nombre d'occupation ne peut prendre que les valeurs 0 ou 1, et l'expression (2.8) donne la statistique de Fermi-Dirac :

$$\boxed{\overline{N}_\lambda^{FD} = (1+e^{\beta(\varepsilon_\lambda-\mu)})^{-1}} \tag{2.9}$$

où $\beta = 1/k_b\theta$ avec θ la température et k_b la constante de Boltzman. Dans le cas de bosons, (2.8) donne la distribution de Bose :

$$\overline{N}_\lambda^{B} = (e^{\beta(\varepsilon_\lambda-\mu)}-1)^{-1} \tag{2.10}$$

d. Equilibre

On appelle P_l^{eq} les solutions de l'équation maîtresse décrivant les états d'équilibre du système, c'est-à-dire les solutions de

$$\boxed{\frac{dP_l^{eq}}{dt} = 0 \Leftrightarrow \sum_m (p_{lm}P_m^{eq} - p_{ml}P_l^{eq}),} \quad \forall l \tag{2.11}$$

A l'équilibre, la probabilité P_l^{eq} est indépendant du temps, c'est-à-dire que le **peuplement** $\sum_m p_{lm}P_m^{eq}$ de l'état l pendant un intervalle de temps dt est exactement compensé par le **dépeupleument** $\sum_m p_{ml}P_l^{eq}$ de cet état l pendant dt.

Comme on l'a vue, l'équation maîtresse est une équation du premier ordre en temps, c'est-à-dire que la donnée de la distribution initiale $P_l(t_0)$ suffit à trouver la solution unique $P_l(t)$. A partir de ce constat, on démontre que lorsque $t \to \infty$ la solution $P_l(t)$ de l'équation maitresse pour une distribution initiale quelconque converge vers la solution d'équilibre P_l^e. C'est une propriété fondamentale qui traduit le fait qu'un système macroscopique perturbé évolue **spontanément** vers son état d'équilibre et l'atteint à condition qu'on attende suffisamment longtemps. L'évolution spontanée est caractérisée d'**irréversible** (ceci est une conséquence du-dit théorème H qui stipule que l'entropie d'un système est une fonction non décroissante du temps). Le temps d'attente nécessaire pour atteindre l'équilibre est appelé **temps de relaxation**. Il dépend notamment de l'état initial, de la température, du matériau utilisé, du protocole utilisé mais aussi de la présence d'impuretés dans le système.

Dans le cas d'un système en équilibre avec un réservoir de particules, l'évolution spontanée du système s'accompagne de l'augmentation de l'entropie grand canonique et, par conséquence, d'une diminution de son grand potentiel dont l'expression est $J = -k_b\theta \ln \Xi$. En outre, après relâchement d'une contrainte, le nouvel équilibre du système sera atteint lorsque le grand potentiel sera minimal.

Remarque 2.1.6. *Dans la limite thermodynamique, c'est-à-dire dans le cas où la taille du système est suffisamment grande pour que les fluctuations y soient négligeable, les trois descriptions sont équivalentes. On peut prendre le paramètres de notre choix comme paramètre interne.*

2.1.2 Hors équilibre : courant, calcul heuristique

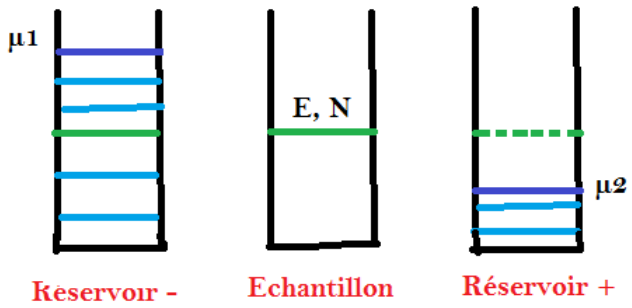


FIGURE 2.1:

On considère deux réservoirs d'électrons R_1 et R_2 de potentiel électrochimique μ_1 et μ_2 tels que $\mu_1 = \mu_2 + \delta$, $\delta > 0$. Soit N le nombre de particules dans les réservoirs 1 et 2. Soit γ_1 et γ_2 les paramètres de saut des réservoirs 1 et 2 respectivement vers l'échantillon et vice versa. On note "e" la charge de l'électron. Soit R_0 un "échantillon" à un niveau d'énergie E. Le nombre moyen d'occupation du niveau d'énergie E pour l'échantillon est donné par la fonction de Fermi Dirac notée $f_0(E)$. Le nombre d'occupation du niveau d'énergie E pour le réservoir $1, 2$ est donné par la distribution de Fermi Dirac (voir (2.9)) notée $f_{1,2}(E)$:

$$f_{1,2}(E) = f_0(E - \mu_{1,2}) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E-\mu_{1,2})}}$$

On définit les quantités de taux de changement de charges qui entrent dans les réservoirs 1 et 2, ou courant, de la manière suivante :

$$I_1(E) := e\gamma_1(f_1(E) - N), \quad \gamma_1 > 0$$

$$I_2(E) := e\gamma_2(f_2(E) - N), \quad \gamma_2 > 0$$

Dans le cas présenté ici, l'état stationnaire hors équilibre apparait lorsque

$$I_1(E) + I_2(E) = 0,$$

on en déduit :

$$N = \frac{\gamma_1 f_1(E) + \gamma_2 f_2(E)}{\gamma_1 + \gamma_2}$$

Dans le cas où $\mu_1 > \mu_2$ on obtient :

$$0 < I_1(E) = -I_2(E) = e\frac{\gamma_1\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}(f_1(E) - f_2(E))$$

2.2 Mécanique statistique quantique et théorie des algèbres d'opérateurs

Depuis les années 30, la théorie des algèbres d'opérateurs sur un espace d'Hilbert connait un développement croissant. Une de ses applications est la description des modèles de mécanique statistique quantique. On se base sur le formalisme d'Heisenberg. Soit le commutateur entre deux opérateurs A et B défini comme $[A, B] := AB - BA$. On définit les relations canoniques de commutation entre les opérateurs p_i et q_i associés respectivement au moment et la position d'une particule :

$$[p_i, p_j] = 0 = [q_i, q_j], \quad [p_i, q_j] = -i\hbar\delta_{ij}$$

On dénote $\mathsf{h} = L^2(\mathbb{R}^n)$ l'espace de Hilbert. L'évolution dans le temps $A(t)$ d'un opérateur qui a pour expression A au temps initial et qui agit sur h est donnée par

$$-i\partial_t A(t) = [H, A(t)], \quad H = E + T \tag{2.12}$$

où H est l'Hamiltonien égal à la somme entre l'énergie cinétique des particules de masse m et de moment p_i, $E = \sum_{i=}^{n} p_i^2/2m$ et l'énergie potentielle $T = V(q_1, q_2, ...q_n)$. L'équation de Schrödinger donne l'évolution de l'état du système noté $\psi \in \mathsf{h}$. L'état est représenté comme un vecteur de l'espace de Hilbert.

$$i\partial_t\psi(t; x_1, ..., x_n) = H\psi(t; x_1, ..., x_n). \tag{2.13}$$

L'unicité de la solution ψ de l'équation de Schrödinger entraine le caractère autoadjoint de l'opérateur Hamiltonien. Cette solution doit satisfaire la relation de conservation de la norme $||\psi(t, x)|| = ||\psi||$, avec ψ l'état au temps $t = 0$, elle s'exprime comme

$$\psi(t, x) = U_{-t}\psi,$$

où $U_t = e^{itH} \in \mathrm{dom}\,(H)$ un opérateur unitaire et continu, alors il satisfait

$$-i\frac{dU(t)}{dt} = U(t)H. \tag{2.14}$$

Remarque 2.2.1. *La distribution de la probabilité pour une particule d'être à la position* $(x_1, ..., x_n)$ *au temps* t *est donnée par*

$$\rho(t; x_1, ..., x_n) = |\psi(t; x_1, ..., x_n)|^2 dx_1 ... dx_n.$$

Remarque 2.2.2. *La valeur moyenne de l'observable* A *au temps* t *est* $(\psi, A(t)\psi)$.

Les principes de la mécanique quantique sont alors établis : une **observable** est un opérateur auto-adjoint A dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, un **état pur** est un vecteur de $\mathcal{H}$, la valeur moyenne de l'observable A est $(\psi, A(t)\psi)$, on détermine l'évolution dynamique du système en spécifiant pour chaque système un opérateur auto-adjoint H et en utilisant les algorithmes suivants :

$$A \mapsto A_t = ^{itH} Ae^{-itH}, \quad \text{ou} \quad \psi \mapsto \psi_t = e^{itH}\psi e^{-itH}$$

Soit $\rho(x,t) = \psi(x,t)\overline{\psi}(x,t)$ défini dans sur un domaine Ω fermé, et tel que l'intégrale de $\rho(x,t)$ dans tout l'espace soit constante au cours du temps, soit

$$\Pr\{particule \in \Omega\} = \int_\Omega dx \rho(x,t)$$

La fonction ψ (et respectivement sa conjuguée $\overline{\psi}$) est solution de l'équation de Schrödinger $i\partial_t\psi = H\psi$ (respectivement $-i\partial_t\overline{\psi} = H\overline{\psi}$). Cela n'entraine pas que en chaque point de l'espace x, ρ doive être indépendante de t. La situation est en effet analogue à celle qui existe en électromagnétisme : si, dans un système physique isolé, on a une charge répartie dans l'espace avec une densité volumique $\rho(x,t)$, la charge totale, c'est-à-dire l'intégrale de $\rho(x,t)$ sur tout l'espace, se conserve au cours du temps. Pourtant, la répartition de cette charge peut varier, ce qui donne lieu à des **courants électriques.**

En fait, on peut poursuivre cette analogie plus loin. La conservation globale de la charge électrique est basée sur une conservation locale : si la charge Q est contenue dans un volume fixe Ω varie au cours du temps, c'est que la surface fermée $\partial\Omega$ qui limite Ω est traversée par un courant électrique. Plus précisément, la variation dQ pendant le temps dt de la charge contenue dans Ω est égale à $-Idt$, où I est l'intensité du courant à travers $\partial\Omega$, c'est-à-dire le flux du vecteur densité de courant $\vec{j}(x,t)$ sortant de $\partial\Omega$. Par un raisonnement d'analyse vectorielle, on exprime la conservation locale de la charge électrique sous la forme

$$\partial_t\rho(x,t) + \vec{\nabla}\vec{j}(x,t) = 0 \tag{2.15}$$

On cherche le vecteur $\vec{j}(x,t)$, le courant de probabilité, tel qu'il satisfasse l'équation (2.15) : il y a alors conservation locale de probabilité. Tout se passe alors comme si l'on avait affaire à un fluide de probabilités, dont la densité et le mouvement sont décrits par $\rho(x,t)$ et $\vec{j}(x,t)$; si la probabilité de trouver la particule dans le volume fixe d^3x autour de x varie au cours du temps, c'est que le courant de probabilités a un flux non nul à travers la surface limitant cet élément de volume.

On suppose que la particule est soumise uniquement à l'action d'un potentiel scalaire $v(x,t)$. On définit son Hamiltonien comme suit :

$$H = -\Delta + v(r,t)$$

Soient les fonctions $\psi(x,t)$ et $\overline{\psi}(x,t)$ définies plus haut. On calcule

$$\begin{aligned} -\partial_t\rho(x,t) &= -H\overline{\psi}(x,t)\psi(x,t) + \overline{\psi}(x,t)H\psi(x,t) \\ &= \Delta\overline{\psi}(x,t)\psi(x,t) - \overline{\psi}(x,t)\Delta\psi(x,t) \\ &= \vec{\nabla}\vec{j}(x,t) \end{aligned} \tag{2.16}$$

On obtient

$$\vec{j}(x,t) = i\left(\psi(x,t)\nabla\overline{\psi}(x,t) - \overline{\psi}(x,t)\nabla\psi(x,t)\right)$$

Pour appliquer ce formalisme à la mécanique statistique on a cependant besoin d'élargir la notion d'état. On appelle ω l'état d'un **mélange statistique**, la fonctionnelle sur les observables de la forme

$$\omega(A) = \sum_i \lambda_i(\psi_i, A\psi_i), \quad \lambda_i \geq 0, \quad \sum_i \lambda_i = 1, \quad ||\psi_i|| = 1. \tag{2.17}$$

Dans le cas où tous les opérateurs bornés et autoadjoints de l'espace de Hilbert sont des observables le mélange statistique est donné par

$$\omega(A) = \mathrm{tr}\,(\rho A)$$

où ρ est un opérateur à trace positif et de trace égale à 1.

Après les travaux de von Neumann sur l'analyse des algèbres de Jordan de dimension infinie, il est apparu que la meilleure formulation de la mécanique quantique est en terme de $W^\star$ algèbres, comme faite par Murray et von Neumann. On identifie une observable quantique avec un élément auto-adjoint d'un $\star-$ algèbre d'opérateur sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, faiblement fermé et noté $\mathcal{M}$. Les états sont alors les mélanges statistiques décrits plus haut, ont les appelle **états normaux**.

Il en ressort que la représentation de Schrödinger est suffisante dans le cadre de l'étude de systèmes avec un nombre fini de particules, alors qu'il est nécessaire d'utiliser les représentations des $C^\star$ et $W^\star$ algèbres pour les systèmes avec une infinité de particules. La réalisation de cette distinction marqua un grand pas dans les applications des $\star-$ algèbres en physique mathématique. Cependant, dans les années 50 et 60, cette distinction a été très controversée. On se pose la question de la **signification physique** (et donc expérimentale) de la qualification "infinie" pour un nombre de particules. En effet, on qualifie "d'infini" un temps d'expérimentation suffisamment long devant un temps d'interaction pour une réaction physique donnée. De même, on qualifie de modèle théorique infini un système fini bien défini. C'est ce que l'on appelle, la **limite thermodynamique**. Le problème des systèmes avec un degré de liberté infini est l'identification d'un état de référence, ce fait justifie également la formulation algébrique de la mécanique quantique.

2.2.1 Système Quantique

Cette partie est basée sur les livres [2], [3] et [4]. Traditionnellement, un système quantique est complètement déterminé par son espace de Hilbert $\mathcal{H}$ et son Hamiltonien H, qui est un opérateur auto-adjoint dans $\mathcal{H}$. La description d'un système quantique à l'aide d'un espace de Hilbert convient pour les systèmes avec un nombre fini de degrés de liberté. Ceci est dû au caractère unique de cette description. Dans le cas de systèmes avec un nombre infini de degré de liberté, on doit utiliser une description basée sur l'utilisation des C*-algèbres (voir section suivante).

L'espace de Hilbert permet de déterminer l'ensemble des observables ainsi que l'ensemble des états du système. En effet, une observable est un opérateur linéaire borné dans $\mathcal{H}$ et les états sont spécifiés par une fonction propre, qui est un vecteur unitaire de $\mathcal{H}$, ou bien, de manière plus générale par une matrice densité, qui est un opérateur non négatif, linéaire et à trace noté $\rho \in \mathcal{H}$, et avec $\mathrm{tr}\,\rho = 1$. Quant à l'Hamiltonien H, il détermine la dynamique de ce système.
L'état associé à la matrice densité ρ est la fonctionnelle linéaire

$$A \mapsto \rho(A) = \mathrm{tr}\,(\rho A)$$

sur l'ensemble des observables. A toute observable auto-adjointe A, un état ρ associe une mesure de probabilité sur le spectre de A :

$$d\rho_A = \rho(E_A(da)),$$

où $E_A(.)$ désigne la projection de la mesure spectrale de A donnée par le théorème spectral. La mesure ρ_A donne la distribution de probabilité d'obtenir la mesure A. La valeur moyenne de A dans l'état ρ est

$$\int a d\rho_A(a) = \rho(A).$$

A l'aide du théorème spectral pour les opérateurs compacts, on peut récrire la matrice densité sur la base orthonormale de $\mathcal{H}$ formée pas les vecteurs propres de ρ

$$\rho = \sum_j p_j(\Psi_j, .)\Psi_j, \quad 0 \leq p_j \leq 1, \quad \sum_j p_j = 1$$

Définition 2.2.3. *Soit une matrice densité ρ, telle que $\rho^2 = \rho$ et Ψ un vecteur de $\mathcal{H}$ unitaire. Alors on appelle vecteurs d'états les états correcpondant à*

$$A \mapsto (\Psi, A\Psi).$$

Les p_j définis ci-dessus correspondent à la probabilité que le système soit dans l'état associé au vecteur d'état Ψ_j.

Comme on l'a évoqué dans l'introduction de cette section, l'évolution d'une fonction d'onde Ψ est donnée par l'équation de Schrödinger $i\partial_t \Psi_t = H\Psi_t$. L'Hamiltonien H étant auto-adjoint, la solution de cette équation est donnée par $\Psi_t = e^{-itH}\Psi$ où l'on note $Psi_0 = \Psi$ la valeur initiale de la fonction d'onde. On en déduit alors que la matrice densité évolue comme suit

$$\rho_t = e^{-itH}\rho e^{itH}$$

et satisfait l'équation d'évolution de Liouville quantique :

$$\partial_t \rho_t = i[\rho_t, H].$$

La valeur moyenne d'une observable A au temps t est ainsi donnée par

$$\rho_t(A) = \mathrm{tr}\,(\rho_t A)$$

C'est ce que l'on appelle la représentation de Schrödinger de la dynamique quantique.
En utilisant la cyclicité de la trace, on peut récrire

$$\mathrm{tr}\,(\rho_t A) = \mathrm{tr}\,(\rho A_t), \quad A_t = e^{itH}Ae^{-itH}$$

Les observables dépendent ainsi du temps et satisfont l'équation d'évolution

$$\partial_t A_t = i[H, A_t].$$

Ceci est la représentation d'Heisenberg de la dynamique quantique. Evidemment, la représentation de Schrödinger et celle d'Heisenberg de la dynamique sont équivalente, puisque $\rho_t(A) = \rho(A_t)$.

2.2.2 C* algèbre

A présent, on donne quelques éléments de théorie des algèbres. En effet, cette théorie est particulièrement utilisée dans la description de dynamique d'un système constitué de plusieurs sous-systèmes élémentaires. On se concentre sur les deux algèbres principales que sont les C*-algèbres et les algèbres de von Neumann. On peut les définir de manière abstraites, mais ils peuvent aussi se représenter comme des sous-algèbres de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, avec des topologies différentes.

Définition 2.2.4. *Une C*-algèbre $\mathcal{A}$ équipée d'une involution $A \mapsto A^\star$ et d'une norme $||.||$ satisfaisant, pour tout $A, B \in \mathcal{A}$ et pour tout $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$:*
1) $A^{\star\star} = A$
2) $(\lambda A + \mu B)^\star = \overline{\lambda} A^\star + \overline{\mu} B^\star$
3) $(AB)^\star = B^\star A^\star$
4) $||A|| > 0$*, et* $||A|| = 0$ *si et seulement si* $A = 0$*.*
5) $||\lambda A|| = |\lambda| \ ||A||$
6) $||A + B|| \leq ||A|| + ||B||$
7) $||A|| \leq ||A|| \ ||B||$
8)$\mathcal{A}$ *est complète pour la norme* $||.||$*.*
9) $||AA^\star|| = ||A||^2$

On appelle une ***-algèbre** une algèbre avec une involution comme spécifié ci-dessus et qui satisfait 1)-3). Si la condition 9) est remplacée par $||A^\star|| = ||A||$ alors l'algèbre est appelé **algèbre de Banach**. Il existe une unique norme permettant à une *-algèbre de devenir une C*-algèbre.

Une représentation d'une C*-algèbre $\mathcal{A}$ est la paire $(\mathcal{H}, \Pi)$ constituée d'un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ et d'un morphisme Π de $\mathcal{A}$ dans $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Soit Ω tout vecteur de norme 1 d'une C*-algèbre $\mathcal{A}$ de représentation $(\mathcal{H}, \Pi)$, alors

$$\omega(A) = < \Omega, \Pi(A)\Omega >$$

définit un état dans $\mathcal{A}$.

2.2.3 Algèbre de von Neumann

Une algèbre de von Neumann est une C*-algèbre agissant dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$, qui contient l'unité notée I de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ et qui est faiblement fermée.

Définition 2.2.5. *Soit $\mathcal{M}$ un sous espace de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Si on pose*

$$\mathcal{M}' = \{B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}); BM = MB \forall M \in \mathcal{M}\}$$

alors $\mathcal{M}'$ est appelé le commutnt de $\mathcal{M}$, et on a les propriétés suivantes :
1)$\mathcal{M}'$ est faiblement fermée,
2) $\mathcal{M}' = \mathcal{M}''' = \mathcal{M}^{(5)} = ...$*,*
et $\mathcal{M} \subset \mathcal{M}'' = \mathcal{M}^{(4)} = ...$

Le théorème de Sakai permet de faire le lien entre C*-algèbre et algèbre de von Neumann. Il est énoncé ci-dessous.

Théorème 2.2.6. *Une C*-algèbre est une algèbre de von Neumann si et seulement si elle est le dual d'un certain espace de Banach.*

Théorème 2.2.7. *Dans une algèbre de von Neumann notée $\mathcal{M}$, pour un état donné ω dans $\mathcal{M}$, les affirmations suivantes sont équivalentes :*
i)L'état ω est normal.
ii)Il existe un opérateur positif, à trace et noté ρ de $\mathcal{H}$ tel que $\mathrm{tr}\,\rho = 1$ *et* $\forall A \in \mathcal{M}$ *on a*

$$\omega(A) = \mathrm{tr}\,(\rho A)$$

2.2.4 L'espace des états d'un C*-algèbre

Soient $\mathcal{H}$ et h l'espace de Hilbert et l'Hamiltonien d'un fermion. On suppose que h est borné inférieurement. Soit $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$ l'espace de Fock anti-symétrique sur $\mathcal{H}$. On note $a^\star(f)$ et $a(f)$ les **opérateurs de créations et d'annihilation** pour un fermion dans un état f de $\mathcal{H}$. L'opérateur de champ correspondant est

$$\varphi(f) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a(f) + a^\star(f)),$$

et il satisfait les relations d'anti-commutation

$$\varphi(f)\varphi(g) + \varphi(g)\varphi(f) = \Re(f,g)I$$

Par la suite, le symbole $a^\diamond$ désignera soit a soit $a^\star$. Soit CAR($\mathcal{H}$) le C*-algèbre engendré par $\{a^\diamond(f), f \in \mathcal{H}\}$. Comme dans [4] on appellera cet algèbre l'algèbre de Fermi. La C*-dynamique induite par h est

$$\tau^t = e^{itd\Gamma(h)} A e^{-itd\Gamma(h)}$$

La paire $(CAR(\mathcal{H}, \tau)$ décrit un système C*-dynamique. On rappelle que l'opérateur nombre de particules dans l'espace de Fock $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$ est $N = d\Gamma(I)$. Le nombre de Fermions est conservé en ce sens que τ^t commute avec le groupe de gauge

$$\mathcal{V}^t(A) = e^{itd\Gamma(I)} A e^{-itd\Gamma(I)}$$

τ et $\mathcal{V}$ sont les groupes d'automorphismes de Bogoliubov suivants :

$$\tau^t(a^\diamond(f)) = a^\diamond(e^{ith} f), \quad \mathcal{V}^t(a^\diamond(f)) = a^\diamond(e^{it} f)$$

A tout opérateur auto-adjoint T de $\mathcal{H}$ tel que $0 \leq T \leq I$ on peut associer un état ω_T de $CAR(\mathcal{H})$ qui satisfait

$$\omega_T(a^\star(f_n)...a^\star(f_1)a(g_1)...a(g_m)) = \delta_{n,m}\mathrm{det}\{(g_i, Tf_i)\}.$$

Cet état $\mathcal{V}-$invariant est appelé **état quasi-libre** invariant de gauge dénéré par T.
Si ω est un état sur CAR($\mathcal{H}$), alors il existe un opérateur auto-adjoint, ρ, sur $\mathcal{H}$ appelé **opérateur densité** tel que $0 < \rho < \mathrm{Id}$ et

$$\omega(a^\star(g)a(f)) = (f, \rho g)$$

On note que si c est un opérateur à trace, alors on a

$$\omega(d\Gamma(c)) = \mathrm{tr}\,(\rho c)$$

Un $C^\star-$dynamique $(\mathrm{CAR}_\mathcal{V}(\mathcal{H}, \tau^t))$ équipé de l'état $\omega_{\beta\mu}$, où β est l'inverse de la température et μ le potentiel chimique, décrit un gaz libre de Fermi à l'équilibre thermique dans l'ensemble grand canonique.

Un état quasi libre ω_ρ, invariant par la jauge $\mathcal{V}$ est ergodique pour un gaz de Fermi idéal, (CAR($\mathcal{H}$,τ^t)) si et seulement si h n'a pas de valeur propre. ω_ρ est un mélange statistique si h n'a pas de spectre singulier.

Définition 2.2.8. *(i) Un opérateur borné non négatif dans $L^2(\mathbb{R})$ est appelé un **opérateur densité** ou un **état** si le produit $\rho M(\chi(a,b))$, où $M(\chi(a,b))$ est l'opérateur de multiplication induit dans $L^2(\mathbb{R})$ par la fonction caractéristique $\chi(a,b)$ sur l'intervalle (a,b).*

*(ii) Un état ρ est appelé un **état stationnaire** pour l'opérateur Hamiltonien H si ρ commute avec H, c'est-à-dire ρ appartient au commutant de l'algèbre générée par le calcul fonctionnel associé à H. Un état stationnaire est appelé **état d'équilibre** s'il appartient au bi-commutant de cet algèbre, c'est à dire si $[[\rho, H], H] = 0$, ou bien, $\rho \in \mathcal{A}''(H)$ où $\mathcal{A}(H) \approx \mathcal{A}(dE_\lambda(H)) = \mathcal{A}(dE_H(\lambda))$, $E_\lambda(H)$ étant le projecteur sur le spectre de H, et λ le paramètre spectral.*

Définition 2.2.9. *Soit $(\mathcal{O}, \tau)$ un système C*-dynamique et ω un état de référence donné. Le NESS (Non Equilibrium Steady State) ou état stationnaire hors équilibre, associé à ω et τ sont les points limite *-faible de moyennes temporelles le long de la trajectoire $\omega \circ \tau^s$. En d'autres termes, si*

$$< \omega >_t = \frac{1}{t} \int_0^t \omega \circ \tau^s \; ds$$

alors ω_+ est le NESS associé à ω et τ s'il existe un $t_\alpha \to \infty$ tel que $\forall A \in \mathcal{O}$

$$< \omega >_{t_\alpha} (A) \to \omega_+(A).$$

2.3 Construction d'un NESS

Il existe au moins trois manières différentes pour construire un état stationnaire hors équilibre.

2.3.1 Branchement instantanné

Au temps initial, $t = -\infty$ les deux systèmes considérés sont découplés, et dans des équilibres thermodynamiques individuels et différents. Ces deux systèmes sont des réservoirs infinis de particules, en ce sens où la perturbation d'un des paramètres ne modifiera pas l'état d'équilibre du système. A un certain t_0, par exemple $t_0 = 0$ on branche les deux réservoirs entre eux de manière brutale, c'est-à-dire que la modification de l'équilibre (perturbation) se fait de manière **instantanée.** On laisse ensuite le système branché évoluer jusqu'à ce qu'il atteigne le NESS. Cette méthode a été traitée notamment dans les papiers de Aschbacher, W., Jakšić, V., Pautrat, Y., Pillet, C-A., voir [5]. Dans ce travail, il est démontré l'existence d'un NESS et la formule de Landauer-Büttiker. Cette méthode est apparue dans la littérature mathématique via Ruelle, voir par exemple [57], [62]. Ce protocole a été largement étudié ces dernières années, on trouve par exemple les papiers suivants : [6, 5, 36, 62, 54, 10] ainsi que les références citées dans ces articles. Dans [35] il est démontré que la théorie était toujours valable dans le cas ou l'on prend en compte l'interaction entre les électrons. De même si le couplage du système est dépendant du temps (s'il se fait par exemple de manière adiabatique), on retrouve les mêmes résultats [23].

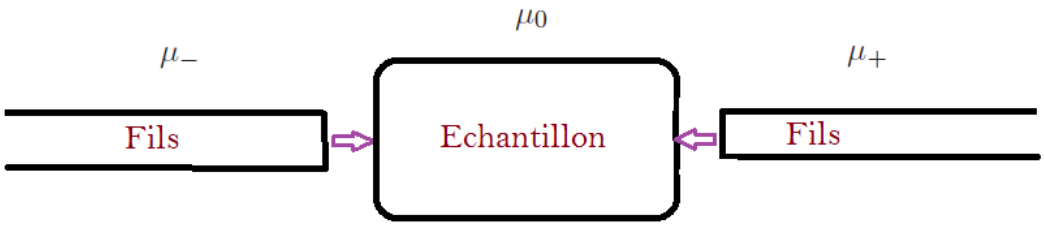


FIGURE 2.2: couplage instantanné

2.3.2 Branchement adiabatique

Dans le cas du branchement adiabatique, on procède de la même manière que précédemment, le branchement se faisant cette fois ci de manière continue et pas instantanée. A $t = -\infty$, les deux sous-systèmes sont découplés et dans des états d'équilibre individuels. A $t_0 = 0$, on branche les sous-systèmes entre eux de manière continue. Le branchement adiabatique a été étudié par H. Cornean, P. Duclos, G. Nenciu, R. Purice, voir [16] : il est traité la partie linéaire du NESS.

2.3.3 Système sans partition initiale

Ce troisième mode opératoire consiste à partir d'un système totalement couplé et à l'équilibre, c'est-à-dire, pas d'équilibre individuel, pas de partition initiale. Les sous-systèmes sont en connection au temps initial et le système entier est à l'équilibre, c'est-à-dire encore que l'état d'équilibre initial n'est pas la somme des états d'équilibre initiaux des différents réservoirs. A un certain temps $t_0 = 0$ on déclenche la variation continue de certains paramètres des sous-systèmes afin de créer une perturbation. On peut par exemple brancher une pile (de courant continu) sur les fils, ce qui aura pour conséquence la modification des potentiels électro-chimiques des fils couplés à l'échantillon. On maintient la perturbation jusqu'à un certain $t_1 > t_0$. On étudie alors la dynamique pour $t_0 > 0$ et l'existence du NESS. Cette méthode a été notamment introduite par Cini [20]. Les auteurs qui traitent de ce protocole sont moins nombreux que dans le cas de la méthode avec partition initiale, et il n'existe pas, à notre connaissance, de résultats rigoureux d'un point de vue mathématique, autres que ceux traitant le cas de la réponse linéaire, voir [16].

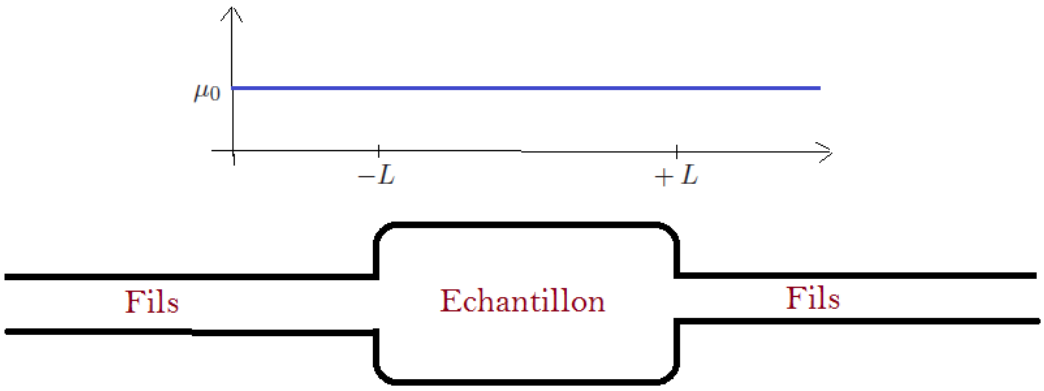


FIGURE 2.3: couplage sans partition initial : au temps initial, les fils et l'échantillon sont connecté, le tout est à l'équilibre thermodynaique

2.4 Exemple de calcul de courant et formule de Landauer Büttiker

On a vu dans la section précédente les trois manières différentes de construire un état stationnaire hors équilibre ou NESS à partir d'un système initial constitué de plusieurs parties distinctes. On appelle réservoirs ou fils les parties reliées à un échantillon (voir figure).

Bien que ces méthodes de perturbation d'un système à l'équilibre semblent très proches, en particuliers si l'on déclenche à $t = 0$ le biais de potentiel de manière subite dans le modèle couplé, leur implémentation est différente. Un des buts de cette section est d'illustrer cette dernière observation.

Dans le modèle heuristique présenté en partie 2.1.2, il s'agit d'augmenter la valeur des potentiels électrochimiques μ_1 et μ_2, c'est-à-dire leur ajouter une constante par exemple $\mu_1 + v_-$ et $\mu_2 + v_+$.

Dans cette partie, on montre que l'on est capable de construire un NESS et d'étudier le courant stationnaire dans le cadre du modèle sans partition initiale. On considère deux fils semi-infinis reliés au même échantillon au temps initial $t < 0$. L'état du système couplé est l'état d'équilibre de Gibbs pour une température et un potentiel chimique donné. Au temps $t = 0$ on allume un biais de potentiel dépendant du temps $V(t)$ afin de créer une différence de potentiel entre les deux fils. Ceci modélise le régime transient d'une pile de courant continu. Au temps $t_1 > 0$ le biais de potentiel est stabilisé et demeure constant pour les temps supérieurs à t_1. On laisse le système évoluer jusqu'à ce qu'il atteigne le NESS.

Le courant, dépendant a priori du temps, est défini comme la valeur moyenne de l'opérateur courant dans l'état $\rho(t)$. Dans le théorème (3.3.1), on démontre l'existence du courant et l'on

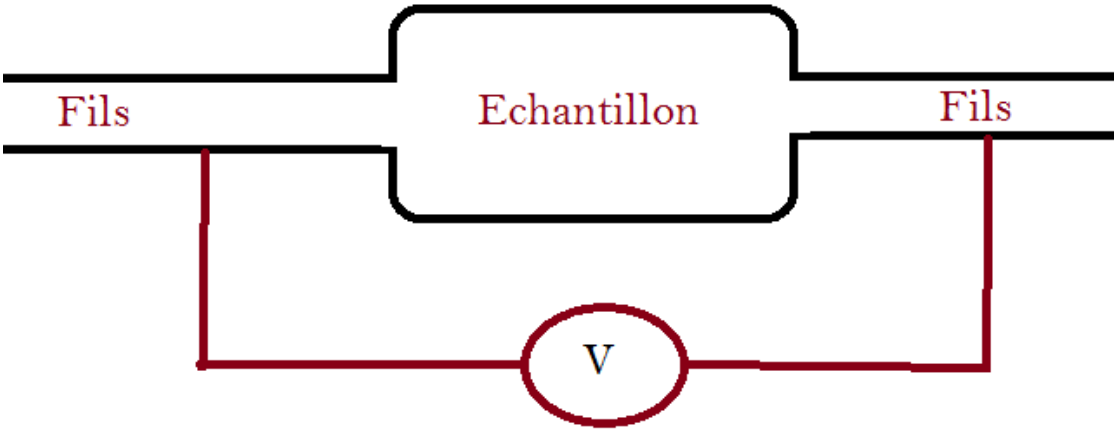


FIGURE 2.4: On perturbe l'équilibre en ajoutant sur les fils un potentiel. On crée une différence de potentiel et le système évolue.

calcule sa limite ergodique. Cette limite ne dépend pas de la façon dont on allume la perturbation (la manière de déclencher le biais de potentiel), ni du point sur le fil a partir duquel on mesure le courant. On obtient aussi une formule du type **formule de Landauer-Büttiker** pour le courant limite.

De très nombreux papiers ont eu pour but d'établir des formules de courant du type formule de Landauer-Büttiker (voir [12, 13, 7, 8]). Ainsi, de très nombreux physiciens se sont intéressés à l'approche sans partition, on citera les précurseurs [64, 65] qui associent cette approche avec le formalisme Green-Keldysh. Ils proposent de nombreuses formules de courant.

D'un point de vue mathématique, les premiers travaux visant à obtenir une formule de courant de type Landauer-Büttiker dans l'approche sans partition ont été effectués par [21] et plus tard par [22]. Ces papiers utilisent l'approximation de la **réponse linéaire.** Dans le papier [16] les résultats de [22] sont étendus au cas continu. Un des défis à relever est celui de trouver une manière d'employer ses résultats dans des calculs numériques de courant transient et qui traiteraient du cas où l'interaction entre les fermions est prise en compte (voir [51, 52, 53, 66] et les références citées).

Dans cette partie, on traite, à titre d'introduction et d'exemple la réponse linéaire. On s'intéresse à la réponse linéaire dans le formalisme de Kubo (voir 2.64 et théorème 2.4.17). On considère un système dont l'Hamiltonien initial et à l'équilibre est H_0. On perturbe le système, et l'Hamiltonien devient $H(t) = H_0 + H_1(t)$ où $H_1(t) = \sum_i E_i(t)A_i$, les $E_i(t)$ sont les facteurs perturbatifs, et les A_i désignent les observables du système. La matrice densité (voir section c. et la définition

2.4.3) ou opérateur densité, qui donne l'ensemble des états quantiques possibles au temps t pour le système étudié, est affectée par cette perturbation et sa dynamique satisfait l'équation de Liouville (voir 2.31). Soit ρ_0 la matrice densité associée à l'état d'équilibre thermodynamique initial et $\rho(t) = \rho_0 + \delta\rho(t)$ la matrice densité perturbée au premier ordre par $\delta\rho$. L'équation de Liouville donne :

$$i\partial_t \delta\rho(t) = [H_1(t), \rho_0] + [H_0, \delta\rho(t)]$$

et la solution au premier ordre de la théorie des perturbations est donc, formellement,

$$\delta\rho(t) = -i \int_{-\infty}^{t} e^{-i(t-t_1)H_0} [H_1(t_1), \rho_0] e^{i(t-t_1)H_0} \, dt_1$$

2.4.1 Le système à volume fini

a. Le système à une particule

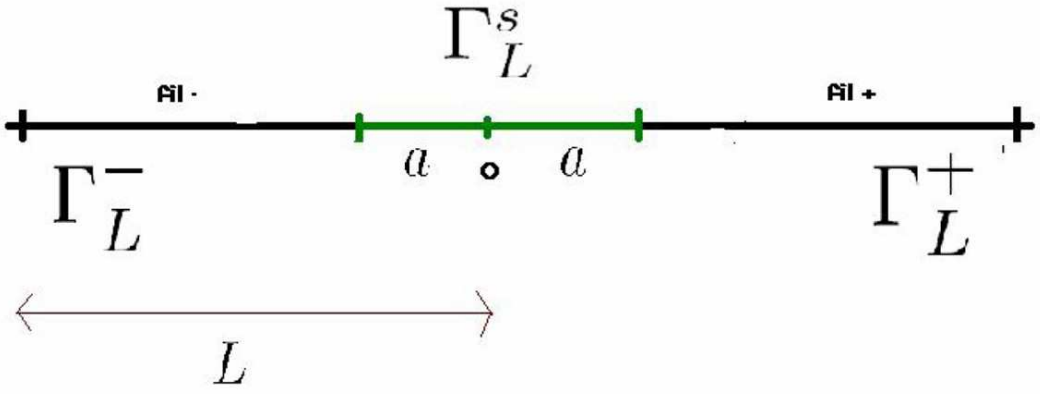


FIGURE 2.5: Configuration initiale du système

On modélise le petit système à travers lequel on fait passer le courant par un domaine noté Γ_L^s, un intervalle ouvert de $\mathbb{R}$. Sans restreindre la généralité on place ce petit système à l'origine. Il est relié à deux fils de longueur $L \in \mathbb{R}_+^*$ de part et d'autre du petit système. L'échantillon est de longueur $2a, a \in \mathbb{R}_+$. Le cas où $a = 0$ sera également traité dans une application : c'est ce que l'on appellera le "modèle ponctuel" . Les indices $\pm$ permettent de caractériser soit le fil "à gauche" (-) du petit système soit le fil à droite (+). On note $\Gamma_L^{\pm}$ l'espace des configurations sur les fils. L'espace des configurations des fils et de l'échantillon est noté Γ_L. On cherche à résoudre le problème pour un système à une particule, la justification sera donnée dans la section suivante. Le schéma a. ci-dessus représente la configuration du système. On appelle

$$H_L = H_{L,0} + V^s, \quad H_{L,0} := -\Delta \tag{2.18}$$

l'opérateur de Schrödinger à une particule, où V^s est le potentiel sur l'échantillon. On impose des conditions de Dirichlet au bord des fils. On suppose que :

$$V^s \text{ est } H_{L,0} \text{ compact au sens des formes} \tag{2.19}$$

Par conséquent le domaine de forme de H_L est $\mathcal{H}_0^1(\Gamma_L)$ [1], l'opérateur H_L est autoadjoint, borné inférieurement et purement discret sur l' espace de Hilbert $\mathcal{H}_L := L^2(\Gamma_L)$. On suppose en outre que V^s est localisé sur l'échantillon dans le sens suivant

$$\forall \chi \in \mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}),\ \chi_{|[-a,a]} = 1, \quad \chi V^s = V^s \chi \tag{2.20}$$

tel que,

$$\text{si } a \neq 0\ , \forall u \in \operatorname{dom} H_L,\ u \text{ est localement } \mathcal{H}^2 \text{ de part et d'autre de } \pm a \tag{2.21}$$

et

$$\text{si } a = 0,\ u \text{ est localement } \mathcal{H}^2 \text{ de part et d'autre de } 0. \tag{2.22}$$

Au temps initial s que l'on prend égal à moins l'infini, le système complet est supposé à l'équilibre. On introduit alors sur les fils une différence de potentiel sous la forme d'un biais de potentiel V_L. On suppose que V_L est un opérateur borné et symétrique. On veut introduire ce biais de manière infiniment lente. La vitesse de branchement est caractérisée par la fonction $\chi(\eta t)$ où $\eta \in \mathbb{R}_+$. On appelle limite adiabatique la limite η tend vers zéro. La fonction de branchement adiabatique χ est typiquement de la forme $e^{\eta t}$ et possède les propriétés suivantes :

$$\chi \in L^1(\mathbb{R}_-) \cap C^1(\mathbb{R}_-) \tag{2.23}$$

$$\chi(0) = 1 \tag{2.24}$$

$$\chi' \in L^1(\mathbb{R}_-) \tag{2.25}$$

Finalement on appelle $H_{\eta,L}(t)$ l'Hamiltonien du système fils+échantillon+ biais adiabatique :

$$H_{\eta,L}(t) = H_L + \chi(\eta t) V_L \tag{2.26}$$

$\chi(\eta t)V_L$ étant borné et symétrique, $H_{\eta,L}(t)$ est autoadjoint de même domaine que H_L.

On cherche dans cette première section à donner un statut rigoureux au problème d'évolution avec conditions initiales en moins l'infini.

b. D'une infinité de particules à une particule

On justifie dans cette section le fait que l'on ne considère que le problème à une particule. On considère des particules qui n'interagissent pas et qui sont des fermions. On se place dans l'espace fermionique de Fock $\mathcal{F}_L$ construit à partir de l'espace à une particule $\mathcal{H}_L$ défini ci-dessus. Le système à l'équilibre est dans l'état de Gibbs g_L :

$$g_L := \frac{e^{-\beta(h_L - \mu n_L)}}{\operatorname{tr}\left(e^{-\beta(h_L - \mu n_L)}\right)} \tag{2.27}$$

où h_L est l'opérateur second quantifié de H_L et n_L est l'opérateur nombre de particules c'est-à-dire le second quantifié de $1_{\mathcal{H}_L}$, où $1_{\mathcal{H}_L}$ désigne l'identité sur $\mathcal{H}_L$. Le courant est la dérivée

1. $\mathcal{H}^s(\Omega)$ et $\mathcal{H}_0^s(\Omega)$ désignent les espaces usuels de Sobolev de type L^2 sur l'ouvert Ω.

temporelle de la charge. Cette charge s'exprime comme la trace sur $\mathcal{F}_L$ de l'opérateur charge Q dans l'état $\varrho_L(t)$, où $\varrho_L(t)$ est la solution de l'équation de Liouville avec condition initiale en moins l'infini g_L. La proposition 6.2 de [21] permet d'écrire pour tout opérateur $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_L)$.

$$\mathrm{tr}_{\mathcal{F}_L}\left\{g_L d\Gamma(T)\right\} = \mathrm{tr}_{\mathcal{H}_L}\left\{f_L(H_L)T\right\} \tag{2.28}$$

où f_L est la fonction de Fermi-Dirac définie en (2.30) et $d\Gamma(T)$ désigne le second quantifié de T. En particulier, on a

$$\mathrm{tr}_{\mathcal{F}_L}\left\{\varrho_L(t) d\Gamma(Q)\right\} = \mathrm{tr}_{\mathcal{H}_L}\left\{\rho_L(t)(H_L)T\right\}. \tag{2.29}$$

A partir de maintenant, on considérera uniquement l'expression du courant avec la trace sur l'espace $\mathcal{H}_L$.

c. Matrice densité et Équation de Liouville

Dans cette section on s'intéresse à la description de l'évolution de l'observable matrice densité (où état), que l'on note $\rho_{\eta,L}(t)$. On suppose qu'au temps initial s le système est à l'équilibre, c'est-à-dire que la matrice densité est la fonction de Fermi-Dirac f_L définie comme suit :

$$f_L := f_{\mathrm{FD}}(H_L) = \frac{1}{1 + e^{\beta(H_L - \mu)}} \tag{2.30}$$

où μ est le potentiel chimique et $\beta = \frac{1}{k_b T}$ avec k_b la constante de Boltzmann et T la température. Si la condition initiale était imposée au temps s fini fixé on sait que l'évolution de l'état doit satisfaire le problème de Cauchy suivant,

$$-i\frac{d\rho_{\eta,L}(t)}{dt} + [H_{\eta,L}(t), \rho_{\eta,L}(t)] = 0 \tag{2.31}$$

$$\rho_{\eta,L}(s) = f_L. \tag{2.32}$$

On procède en deux étapes : tout d'abord, on cherche la solution de cette équation avec condition initiale en $t = s > -\infty$ puis on fait tendre s vers moins l'infini. Le théorème (2.4.6) (voir annexe) affirme l'existence et l'unicité d'une solution (au sens de la norme trace) à l'équation de Liouville (2.31). Cette unique solution, notée $\rho_{\eta,L}(t)$ satisfait la condition initiale donnée ci-dessous :

$$\lim_{t \to -\infty} \rho_{\eta,L}(t) = f_L. \tag{2.33}$$

Pour construire la solution de (2.31) on utilise le propagateur associé à l'équation de Schrödinger

$$-i\partial_t U_{\eta,L}(t,s) + H_{\eta,L}(t) U_{\eta,L}(t,s) = 0 \tag{2.34}$$

$$U_{\eta,L}(s,s) = id \tag{2.35}$$

d. Solution de l'équation de Schrödinger à une particule

Il faut dans un premier temps trouver la solution de l'équation de Schrödinger avec condition initiale en $t = s$. Pour cela on s'appuie sur le théorème X.70 de ([59]). L'opérateur $\chi(\eta t)V_L$ étant borné et H_L étant autoadjoint, le domaine de $H_{\eta,L}(t)$ est indépendant du temps. De plus, il est standard de vérifier sous les hypothèses (2.23) et (2.25) que pour tout t et s réels la quantité

$$\frac{(H_{\eta,L}(t) - H_{\eta,L}(s))}{t-s}(H_{\eta,L}(s) + i)^{-1} = \frac{(\chi(\eta t) - \chi(\eta s))}{t-s} V_L (H_{\eta,L}(s) + i)^{-1}$$

admet une extension fortement continue pour tout couple $(t,s) \in \mathbb{R}_- \times \mathbb{R}_-$. Il suit la proposition :

Proposition 2.4.1. *Il existe un unique propagateur unitaire $U_{\eta,L}(t)$ sur $\mathcal{H}_L$ tel que l'équation (2.34) avec la condition initiale (2.35) soit vérifiée au sens fort pour tout φ dans le domaine de H_L.*

e. Existence de l'opérateur d'onde

On rappelle que le propagateur unitaire $U_0(t,s) = e^{-i(t-s)H_L}$ est l'unique solution de l'équation de Schrödinger pour l'opérateur autoadjoint indépendant du temps H_L.

On définit pour tout t, s réels, un nouvel opérateur

$$\Omega_{\eta,L}(t,s) = U_{\eta,L}(t,s)U_0(t,s)^\star. \tag{2.36}$$

Cet opérateur est unitaire fortement différentiable sur domH_L et on cherche à montrer qu'il admet une limite lorsque s tend vers moins l'infini. L'évolution de cet opérateur est donnée par l'équation suivante :

$$-i\partial_s\Omega_{\eta,L}(t,s) = \Omega_{\eta,L}(t,s)\tilde{V}_{\eta,L}(s-t)\chi(\eta s) \tag{2.37}$$

où l'on a introduit le potentiel de la représentation interaction

$$\tilde{V}_{\eta,L}(s-t) = e^{i(t-s)H_L}V_L e^{-i(t-s)H_L}. \tag{2.38}$$

Lemme 2.4.2. *(i) La limite $\Omega_{\eta,L}(t) := \lim_{s\to-\infty}\Omega_{\eta,L}(t,s)$ existe et est appelée l'opérateur d'onde.*
(ii) La limite $\lim_{s\to-\infty}\Omega^\star_{\eta,L}(t,s)$ existe et est l'adjoint de l'opérateur d'onde.

Preuve : voir Annexe 6.2.2

f. La matrice densité

Définition 2.4.3. *On définit la matrice densité $\rho_{\eta,L}(t,s)$ au temps t pour un temps initial fixé $s > -\infty$ par*

$$\rho_{\eta,L}(t,s) := U_{\eta,L}(t,s)f_L U_{\eta,L}(s,t) \tag{2.39}$$

On démontre une seconde expression pour la matrice densité. Cette expression a l'avantage de posséder une limite en $s \to -\infty$ qui s'exprime avec les opérateurs d'onde. Comme f_L commute avec toute fonction de H_L, cela permet de récrire $\rho_{\eta,L}(t,s)$ de la forme suivante :

$$\rho_{\eta,L}(t,s) = U_{\eta,L}(t,s)U_0(t,s)^\star f_L U_0(t,s)U_{\eta,L}(t,s)^\star \tag{2.40}$$

Le candidat pour être la solution de l'équation de Liouville avec condition initiale en $t = -\infty$ est

$$\begin{aligned}
\rho_{\eta,L}(t) &:= s - \lim_{s\to-\infty} U_{\eta,L}(t,s)U_0(t,s)^\star f_L U_0(t,s)U_{\eta,L}(t,s)^\star \\
&= s - \lim \Omega_{\eta,L}(t,s)f_L\Omega_{\eta,L}(t,s)^\star \qquad (2.41)\\
&= \Omega_{\eta,L}(t)f_L\Omega_{\eta,L}(t)^\star, \qquad (2.42)
\end{aligned}$$

qui est bien défini d'après (2.36) et le lemme (2.4.2).

Proposition 2.4.4. *On dispose des deux expressions suivantes pour la matrice densité avec condition initiale en s égal moins l'infini :*

$$\begin{aligned}\rho_{\eta,L}(t) &= \Omega_{\eta,L}(t) f_L \Omega_{\eta,L}(t)^\star && (2.43)\\ &= U_{\eta,L}(t,0)\Omega_{\eta,L}(0) f_L \Omega_{\eta,L}(0)^\star U_{\eta,L}(0,t). && (2.44)\end{aligned}$$

Preuve : on a déjà montré (2.43), il reste à expliquer (2.44) :

$$\begin{aligned}\rho_{\eta,L}(t) &= s-\lim \Omega_{\eta,L}(t,s) f_L \Omega_{\eta,L}(t,s)^\star\\ &= s-\lim U_{\eta,L}(t,s)U_0(t,s)^\star f_L (U_{\eta,L}(t,s)U_0(t,s)^\star)^\star\\ &= s-\lim U_{\eta,L}(t,s)U_0(s,t) f_L U_0(t,s)U_{\eta,L}(s,t)\\ &= s-\lim U_{\eta,L}(t,0)U_{\eta,L}(0,s)U_0(s,0)U_0(0,t) f_L \times\\ &\times\ U_0(t,0)U_0(0,s)U_{\eta,L}(s,0)U_{\eta,L}(0,t)\\ &= U_{\eta,L}(t,0)\Omega_{\eta,L}(0) f_L \left(U_{\eta,L}(0,s)U_0(0,s)^\star\right)^\star U_{\eta,L}(0,t)\\ &= U_{\eta,L}(t,0)\Omega_{\eta,L}(0) f_L \Omega_{\eta,L}(0)^\star U_{\eta,L}(0,t) \quad \blacksquare\end{aligned}$$

g. La matrice densité satisfait l'équation de Liouville au sens fort

Proposition 2.4.5. *La matrice densité $\rho_{\eta,L}(t)$ définie en (2.43) est solution de l'équation de Liouville au sens fort sur* $\mathrm{dom}\, H_{\eta,L}$.

$$-i\frac{d\rho_{\eta,L}(t)}{dt} + [H_{\eta,L}(t), \rho_{\eta,L}(t)] = 0, \quad \lim_{t\to-\infty} \rho_{\eta,L}(t) = f_L \qquad (2.45)$$

Preuve : il faut vérifier que $\rho_{\eta,L}(t)$ satisfait l'équation de Liouville (2.31) pour la condition initiale (2.33). Tous les acteurs dans la définition de $\rho_{\eta,L}(t)$ préservent le domaine de $H_{\eta,L}(t)$. On calcule alors, pour tout vecteur du domaine de $H_{\eta,L}(t)$:

$$\begin{aligned}-i\frac{d\rho_{\eta,L}(t)}{dt} &= -i\frac{d}{dt}\left(U_{\eta,L}(t,0)\Omega_{\eta,L}(0) f_L \Omega_{\eta,L}(0)^\star U_{\eta,L}(0,t)\right)\\ &= -i\frac{dU_{\eta,L}(t,0)}{dt}.\Omega_{\eta,L}(0) f_L U_{\eta,L}(0,t) +\\ &+\ U_{\eta,L}(t,0) f_L \Omega_{\eta,L}(0)^\star \frac{dU_{\eta,L}(0,t)}{dt}\\ &= -H_{\eta,L}(t)U_{\eta,L}(t,0)\Omega_{\eta,L}(0) f_L \Omega_{\eta,L}(0)^\star U_{\eta,L}(0,t) +\\ &+\ U_{\eta,L}(t,0)\Omega_{\eta,L}(0) f_L \Omega_{\eta,L}(0)^\star U_{\eta,L}(0,t) H_{\eta,L}(t)\\ &= -[H_{\eta,L}(t), \rho_{\eta,L}(t)]. \qquad (2.46)\end{aligned}$$

On a utilisé ici le fait que $U_{\eta,L}$ est solution de (2.34) au sens fort sur $\mathrm{dom}\, H_{\eta,L}$, ainsi que

$$\begin{aligned}-i\partial_t U_{\eta,L}(t,s) = -H_{\eta,L}(t)U_{\eta,L}(t,s) \Rightarrow i\partial_t U^\star_{\eta,L}(t,s) &= -(H_{\eta,L}(t)U_{\eta,L}(t,s))^\star\\ &= -U_{\eta,L}(s,t)H_{\eta,L}(t)\end{aligned}$$

La vérification de la condition initiale en $t=-\infty$ est faite plus loin, lorsqu'on vérifie que $\rho_{\eta,L}$ est solution au sens de la norme trace. $\blacksquare$

h. Solution de l'équation de Liouville au sens de la norme trace

Le théorème (2.4.6) énoncé ci-dessous constitue le principal résultat de cette partie. f_L est à trace ; par conséquent $\rho_{\eta,L}(t)$ est à trace.

Théorème 2.4.6. *La matrice densité $\rho_{\eta,L}(t)$ défini en (2.43) est l'unique solution de l'équation de Liouville au sens de la norme trace*

Preuve : voir annexe 6.2.3.

On a établi dans cette première section l'expression de l'opérateur matrice densité. On a montré qu'elle était l'unique solution de l'équation de Liouville, au sens de la norme trace. Ces propriétés sont importantes pour la suite et pour le calcul du courant.

2.4.2 Le courant dans le système tronqué

a. Expression du courant

Maintenant que l'on a défini la matrice densité et son évolution temporelle on peut calculer le courant circulant dans le petit système. Pour définir le courant dans les fils on introduit les opérateurs "charge des fils" comme suit :

$$Q_L^{\pm} := \mathrm{e}\Pi_L^{\pm} \tag{2.47}$$

où $\Pi_L^{\pm}$ désigne l'opérateur de multiplication par 1 sur le fil $\Gamma_L^{\pm}$ et e désigne la charge de la particule. On se place dans un système d'unités tel que $\mathrm{e} = 1$. On remarque que $\Pi_L^{\pm}$ est le projecteur sur $L^2(\Gamma_L^{\pm})$.

L'expression du courant est par conséquent donnée par la formule suivante

$$j_{\eta,L}(t) = \frac{d}{dt}\mathrm{tr}(\rho_{\eta,L}(t)Q_L). \tag{2.48}$$

On utilise alors le théorème (2.4.6) et l'équation (2.31). Il suit,

$$\begin{aligned} j_{\eta,L}(t) &= \frac{d}{dt}\,\mathrm{tr}(\rho_{\eta,L}(t)Q_L) \\ &= -i\,\mathrm{tr}([H_{\eta,L}(t),\rho_{\eta,L}(t)]\,Q_L). \end{aligned} \tag{2.49}$$

On sait grâce au lemme 6.2.7 que $[H_{\eta,L}(t),\rho_{\eta,L}(t)]\,Q_L$ est à trace. Il vient

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\,([H_{\eta,L}(t),\rho_{\eta,L}(t)]\,Q_L) &= \mathrm{tr}([H_L,\rho_{\eta,L}(t)]\,Q_L) + \mathrm{tr}([\chi(\eta t)V_L,\rho_{\eta,L}(t)]\,Q_L) \\ &= \mathrm{tr}([H_L,\rho_{\eta,L}(t)]\,Q_L) \end{aligned} \tag{2.50}$$

car on a utilisé la cyclicité de la trace

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}([\chi(\eta t)V_L, \rho_{\eta,L}(t)]\, Q_L) &= \mathrm{tr}(\chi(\eta t)V_L\rho_{\eta,L}(t)Q_L - \rho_{\eta,L}(t)\chi(\eta t)V_L Q_L)\\ &= \mathrm{tr}(\chi(\eta t)V_L\rho_{\eta,L}(t)Q_L) - \mathrm{tr}(\rho_{\eta,L}(t)\chi(\eta t)V_L Q_L)\\ &= \mathrm{tr}(Q_L\chi(\eta t)V_L\rho_{\eta,L}(t)) - \mathrm{tr}(\chi(\eta t)V_L Q_L\rho_{\eta,L}(t))\\ &= -\mathrm{tr}(\rho_{\eta,L}(t)\,[\chi(\eta t)V_L, Q_L]) = 0. \end{aligned} \tag{2.51}$$

Proposition 2.4.7. *Le courant dans le système tronqué prend la forme*

$$j_{\eta,L}(t) = -i\,tr([H_L, \rho_{\eta,L}(t)]\, Q_L) \tag{2.52}$$

b. Une autre expression pour le courant

Proposition 2.4.8. *Soit $R_L = (H_L+1)^{-1}$ l'expression de la résolvante associée à l'Hamiltonien H_LLe courant dans le système tronqué s'écrit sous la forme*

$$j_{\eta,L}(t) = -i\mathrm{tr}\,((H_L+1)\rho_{\eta,L}(t)(H_L+1)[R_L, Q_L]). \tag{2.53}$$

Preuve : en introduisant R_L dans le commutateur $[H_L, \rho_{\eta,L}]$, il vient

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\,[H_L, \rho_{\eta,L}]Q_L &= \mathrm{tr}\,(H_L\rho_{\eta,L}Q_L) - \mathrm{tr}\,(\rho_{\eta,L}H_L Q_L) && (2.54)\\ &= \mathrm{tr}\,((H_L+1)\rho_{\eta,L}Q_L) - \mathrm{tr}\,(\rho_{\eta,L}(H_L+1)Q_L) && (2.55)\\ &= \mathrm{tr}\,((H_L+1)\rho_{\eta,L}(H_L+1)R_L Q_L) -\\ &- \mathrm{tr}\,(R_L(H_L+1)\rho_{\eta,L}(H_L+1)Q_L)\\ &= \mathrm{tr}\,((H_L+1)\rho_{\eta,L}(H_L+1)R_L Q_L) -\\ &- \mathrm{tr}\,((H_L+1)\rho_{\eta,L}(H_L+1)Q_L R_L) && (2.56)\\ &= \mathrm{tr}\,((H_L+1)\rho_{\eta,L}(H_L+1)[R_L, Q_L])\,. \end{aligned}$$

Pour obtenir la ligne (2.54) on utilise le fait que Q_L est borné et $H_L\rho_{\eta,L}$ est à trace, voir le lemme 6.2.7. La même propriété est invoquée pour justifier l'utilisation de la cyclicité de la trace pour la ligne de calcul (2.56). ∎

2.4.3 La limite de volume infini de l'état et du courant

Dans cette section on traite la limite de volume infini du courant, c'est-à-dire que l'on fait tendre la longueur des fils vers l'infini. On va établir dans les théorèmes 2.4.11 et 2.4.13 que l'état $\rho_{\eta,L}$ et le courant $j_{\eta,L}$ admettent des limites lorsque $L \to \infty$, $\eta > 0$

Or lorsque l'on fait tendre le volume de Γ_L vers l'infini, l'espace des états quantiques $\mathcal{H}_L$ change ; on est donc amené à donner un cadre rigoureux à ce type de limite. En outre on va utiliser pleinement le fait que dans l'expression (2.53) du courant le terme $[R_L, Q_L]$ est de rang fini (voir lemme 6.2.23) et donc à trace, une propriété qui n'est plus vraie en dimension 3.

a. Extension de l'espace des états et des opérateurs : la limite thermodynamique

Le premier problème est que l'Hamiltonien $H_{\eta,L}(t)$ est défini sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_L$ où les fils sont tronqués. On rappelle que l'espace de Hilbert pour le système tronqué est $\mathcal{H}_L =$

$\mathcal{H}^{\Gamma_L^\pm} \oplus \mathcal{H}^{\Gamma_L^s}$ où $\mathcal{H}^{\Gamma_L^\pm} = \mathcal{H}^{\Gamma_L^-} \oplus \mathcal{H}^{\Gamma_L^+}$ représente les fils à gauche $(-)$ ou à droite $(+)$ de l'échantillon. L'espace de Hilbert associé à l'échantillon est $\mathcal{H}^{\Gamma_L^s}$. On rappelle que $\Gamma_L = \Gamma_L^\pm \oplus \Gamma_L^s$ est l'espace des configurations du système tronqué. $\Gamma_L^\pm$ est l'espace des configurations associé aux fils et Γ_L^s l'espace associé à l'échantillon à travers lequel on fait passer le courant. Ainsi, lorsque L tend vers l'infini, Γ_L varie. Pour parer à ce problème on plonge l'espace des configurations du système tronqué dans un espace des configurations limite. Ce dernier est noté Γ et définit comme

$$\Gamma := \mathbb{R} := \overline{\Gamma_L \cup \Gamma_L^c}$$

où $\Gamma_L^c =]-\infty, -L-a[\cup]L+a, +\infty[$. Soit $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\infty = \mathcal{H}_L^c \oplus \mathcal{H}_L$ l'espace des états quantiques correspondant

$$\mathcal{H}_L^c := L^2(\Gamma_L^c), \quad \mathcal{H}_\infty := L^2(\Gamma).$$

Sur $\mathcal{H}$ on définit

$$\begin{aligned} \bar{H}_L &= H_L^c \oplus H_L, & H_L^c &= 0 \\ \bar{\rho}_{\eta,L} &= \rho_{\eta,L}^c \oplus \rho_{\eta,L}, & \rho_{\eta,L}^c &= 0 \\ \bar{f}_L &= f_L(\bar{H}_L) \end{aligned}$$

On appelle $\bar{\Omega}_{\eta,L}(t,s) = 1 \oplus \Omega_{\eta,L}(t,s)$ l'opérateur d'onde prolongé sur l'espace limite. On suppose à présent que le potentiel V_L est un opérateur de multiplication défini comme suit

$$V_L = v_- \Pi_L^- + v_+ \Pi_L^+, \quad \bar{V}_L = v_- \bar{\Pi}_L^- + v_+ \bar{\Pi}_L^+ \tag{2.57}$$

où $v_\pm \in \mathbb{R}$ sont des constantes. $\bar{\Pi}_L^+$ est l'opérateur $\Pi_L^\pm$ prolongé par zéro. $\bar{\Pi}_L^+$ est le projecteur sur $L^2((a, a+L))$ et $\bar{\Pi}_L^-$ est le projecteur sur $L^2((-\infty, -a))$. On a donc $\bar{Q}_L = e\bar{\Pi}_L^\pm$ où e est la charge de la particule. On choisit un système d'unités tel que $e = 1$.

En utilisant (2.43) et (2.53) on a :

Remarque 2.4.9. *(i) L'état dans l'espace des configurations limites est*

$$\bar{\rho}_{\eta,L}(t) = \bar{\Omega}_{\eta,L}(t) \bar{f}_L \bar{\Omega}_{\eta,L}(t)^\star. \tag{2.58}$$

(ii) Le courant, dans le système des configurations limites, prend la forme

$$j_\eta(t) = -i\mathrm{tr}\left((\bar{H}_L + 1)\bar{\rho}_\eta(t)(\bar{H}_L + 1)[\bar{R}_L, \bar{\Pi^\pm}_L]\right), \tag{2.59}$$

où $\bar{R}_L := (\bar{H}_L + 1)^{-1}$ est la résolvante de $\bar{H}_L$.

b. Définition des opérateurs limites

Pour exprimer la limite de l'état et du courant lorsque L tend vers l'infini on a besoin d'introduire les opérateurs

$$H := H_\infty \quad V := V_\infty \quad \text{et} \quad \Pi^\pm := \Pi_\infty^\pm. \tag{2.60}$$

qui décrivent respectivement le système échantillon+ fils, le biais de potentiel à volume infini et les projecteurs sur les fils infinis. H est défini de manière analogue à H_L. On va démontrer que $\bar{H}_L, \bar{R}_L, \bar{V}_L$, et $\bar{f}_L$ ont respectivement pour limite forte lorsque L tend vers l'infini les opérateurs que l'on notera H, R, V, f où

$$R := (H+1)^{-1}, \quad \text{et} \quad f := \frac{1}{1 + e^{\beta(H-\mu)}}. \tag{2.61}$$

Lemme 2.4.10. *Les projecteurs $\bar{\Pi}_L^{\pm}$ convergent fortement vers $\Pi^{\pm}$ lorsque L tend vers l'infini et par conséquent $\bar{V}_L$ converge fortement vers V lorsque L tend vers l'infini.*

Preuve : on utilise pour cela le lemme 3.5 du chapitre III de [37]. En effet, en tant que projecteur, $\bar{\Pi}_L^{\pm}$ est uniformément borné par rapport à L, on a $\forall u \in C_0^{\infty}(\mathbb{R})$, $\bar{\Pi}_L^{\pm} u \longrightarrow \Pi^{\pm} u$ quand L tend vers l'infini. Comme $C_0^{\infty}(\Gamma)$ est dense dans $L^2(\Gamma)$ et que $\bar{\Pi}_L^{\pm}$ converge sur le sous-espace $C_0^{\infty}(\Gamma)$ alors $\forall u \in \mathcal{H}, \bar{\Pi}_L^{\pm} u \longrightarrow \Pi^{\pm} u$. ∎

c. L'état dans la limite du volume infini

Théorème 2.4.11. *$\bar{\rho}_{\eta,L}(t)$ converge fortement lorsque L tend vers l'infini vers*

$$\rho_\eta(t) = \Omega_\eta(t) f \Omega_\eta^{\star}(t). \tag{2.62}$$

Preuve : le produit de deux opérateurs qui convergent fortement converge lui même fortement, ainsi en utilisant les lemmes 6.2.18 et 6.2.12 on a la convergence de la matrice densité $\bar{\rho}_{\eta,L}(t)$ vers la limite $\rho_\eta(t)$ définie comme suit :

$$\begin{aligned} \rho_\eta(t) &:= s - \lim_{L\to\infty} \bar{\rho}_{\eta,L} \\ &= s - \lim_{L\to\infty} \left(\bar{\Omega}_{\eta,L}(t) \bar{f} \bar{\Omega}_{\eta,L}^{\star}(t)\right) \\ &= \Omega_\eta(t) f \Omega_\eta^{\star}(t) \quad ∎ \end{aligned}$$

d. Courant dans la limite de volume infini

Théorème 2.4.12. *Le courant pour le système tronqué défini dans (2.59) converge quand L tend vers l'infini vers*

$$j_\eta^{\pm}(t) = -i \mathrm{tr}\left((H+1)\rho_\eta(t)(H+1)[R, \Pi^{\pm}]\right) \tag{2.63}$$

La démonstration du théorème précédent (voir Annexe 6.2.6) nous permet d'établir un résultat important :

Théorème 2.4.13. *Le courant $j_\eta^{\pm}(t)$ est borné uniformément par rapport à η.*

Preuve : c'est une conséquence du lemme 6.2.29 et du fait que $[R_L, \Pi_L^{\pm}]$ est indépendant de η et borné uniformément en L puisqu'il converge fortement vers $[R, \Pi^{\pm}]$. ∎

Lemme 2.4.14. *On a $[\bar{R}_L, \bar{\Pi}_L^{\pm}]$ converge dans la norme trace vers $[R, \Pi^{\pm}]$.*

Preuve : on utilise certains résultats contenus dans les énoncés et preuves des lemmes 1.23 et 1.24 de [37]. Comme on sait que $\mathrm{rg}\, i[R_L, \Pi_L^{\pm}] \leq 2$ et $\mathrm{rg}\, i[R, \Pi^{\pm}] = 2$, que $i[R_L, \Pi_L^{\pm}]$ converge fortement vers $i[R, \Pi^{\pm}]$, et $i[R_L, \Pi_L^{\pm}]$ et $[R_L, \Pi_L^{\pm}]$ sont a.a., on a que $[R_L, \Pi_L^{\pm}]$ converge en norme vers $[R, \Pi^{\pm}]$ et donc dans la norme trace puisque $\|X\|_1 \leq \mathrm{rg}\, X \|X\|$ si $\mathrm{rg}\, X < \infty$. ∎

e. La réponse linéaire

Les calculs suivants sont effectués avant l'extension de l'espace des états et des opérateurs. Les résultats obtenus sont valables après cette extension. Pour des questions de lisibilité, on ne récrira pas ces résultats pour les opérateurs prolongés.

(i) Décomposition

Lemme 2.4.15. *La matrice densité peut se réécrire sous la forme*

$$\rho_{\eta,L} = \sum_{k=0}^{\infty} \rho_{\eta,L}^{(k)} \tag{2.64}$$

où

$$\rho_{\eta,L}^{(k)} := \sum_{n+l=k} \mathcal{V}_{\eta,L}^{n} 1 \, f_L \, (\mathcal{V}_{\eta,L}^{l} 1)^{\star} \tag{2.65}$$

avec

$$\mathcal{V}_{\eta,L} 1 := -i \int_{-\infty}^{0} \chi(\eta r) \tilde{V}_{\eta,L}(r) dr \quad \blacksquare \tag{2.66}$$

Preuve : on utilise la Proposition (2.4.4), ainsi que la formule (3.12). On choisit à partir de maintenant de calculer le courant au temps $t = 0$. Le lemme (2.4.2) ainsi que (2.38) permettent d'écrire le propagateur $\Omega_{\eta,L}(t)$ et son adjoint $\Omega_{\eta,L}(t)^{\star}$ comme :

$$\Omega_{\eta,L}(0) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{V}_{\eta,L}^{k} 1$$

$$\Omega_{\eta,L}^{\star}(0) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{V}_{\eta,L}^{\star k} 1$$

Lemme 2.4.16. *Le courant complet dans le système où les fils sont tronqués et avant la limite de volume infini peut être décomposé comme :*

$$\begin{aligned} j_{\eta,L}^{\pm}(0) &= -i\mathrm{tr}\left((H_L+1)\rho_{\eta,L}(t)(H_L+1)[R_L, Q_L]\right) \\ &:= \sum_{k=0}^{\infty} j_{\eta}^{\pm,(k)} \qquad (2.67) \\ &= -i \sum_{k=0}^{\infty} tr\left((H_L+1)\rho_{\eta,L}^{(k)}(H_L+1)\left[R_L, \Pi_L^{\pm}\right]\right) \qquad (2.68) \end{aligned}$$

(ii) La partie Linéaire de l'état

Le théorème suivant donne l'expression de la partie linéaire de l'état dans l'espace où les fils sont tronqués.

Théorème 2.4.17. *La partie linéaire de l'état est donnée par :*

$$\rho_{\eta,L}^{(1)} = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} R_L(z) V_L R_L(z) - \frac{1}{2\pi} \eta \int_{-\infty}^{0} \chi'(\eta r) R_L(z) \tilde{V_L}(r) R_L(z) f_L(z) dr \tag{2.69}$$

Preuve : on remarque que :

$$\mathcal{V}_{\eta,L}1 = -(\mathcal{V}_{\eta,L}1)^\star.$$

La formule (2.65) permet alors d'écrire :

$$\rho^{(1)}_{\eta,L} = [\mathcal{V}_{\eta,L}1, f_L]\,. \tag{2.70}$$

Lemme 2.4.18. *On a l'identité suivante*

$$[\mathcal{V}_{\eta,L}1, f_L] = \frac{i}{2\pi}\int_\Gamma [\mathcal{V}_{\eta,L}1, R_L(z)]\, f_L(z)dz, \tag{2.71}$$

où Γ *est un contour fermé.*

Preuve : soit Γ un contour femé tel que l'on puisse récrire $f(H_L)$ grâce à la formule de Cauchy et sous la forme

$$f(H_L) = \frac{i}{2\pi}\int_\Gamma f_L(z)R_L(z)dz \tag{2.72}$$

où l'on définit $R_L(z) := (H_L - z)^{-1}$ comme la résolvante de l'opérateur H.

Lemme 2.4.19. *Les pôles de* $f_L(z) := (1 + e^{\beta(z-\mu)})^{-1}$ *sont*

$$\mu + \frac{i\pi}{\beta}\ mod 2\pi \tag{2.73}$$

Preuve : $e^z = 1$ si et seulement si $z \in 2\mathbb{Z}i$. Il vient alors les équivalences suivantes :

$$\begin{aligned} 1 + e^{\beta(z-\mu)} = 0 \quad &\Leftrightarrow \quad e^{\beta(z-\mu)-\pi i} = 1 \\ &\Leftrightarrow \quad \beta(z-\mu) - i\pi \in 2i\mathbb{Z} \end{aligned} \tag{2.74}$$

On choisit donc un contour assez proche de l'axe réel pour éviter les pôles de $f_L(z)$. ∎

On calcule alors le commutateur

$$\begin{aligned} & [\mathcal{V}_{\eta,L}1, R_L(z)] \\ = \ & -i\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)\left[\tilde{V}_L(r), R_L(z)\right] dr \\ = \ & -i\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)e^{irH_L}\,[V_L, R_L(z)]\,e^{-irH_L}dr \\ = \ & -i\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)e^{irH_L}\times \\ \times \ & (R_L(z)(H_L+z)V_LR_L(z) - R_L(z)V_L(H_L+z)R_L(z))\,e^{-irH_L}dr \\ = \ & -i\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)e^{irH_L}R_L(z)\,[H_L, V_L]\,R_L(z)e^{-irH_L}dr \\ = \ & R_L(z)\left(\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)\partial_r\tilde{V}_L(r)dr\right)R_L(z) \\ = \ & R_L(z)\left(-iV_L + i\eta\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)\tilde{V}_L(r)dr\right)R_L(z) \quad ∎ \end{aligned}$$

Théorème 2.4.20. *La partie linéaire de l'état dans la limite de volume infini est donnée par l'expression suivante :*

$$\rho_\eta^{(1)} = \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz R(z)\left(V - \eta\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)\tilde{V}(r)dr\right)R(z)f(z) \tag{2.75}$$

Preuve : ce théorème est la conséquence des lemmes 6.2.18, 6.2.12 et 6.2.17, ainsi que du théorème 2.4.12.

(iii) La partie linéaire du Courant
On regarde la partie linéaire du courant. On appelle ce terme

$$j_{\eta,L}^{(1)} := -i\text{tr}(J_1[R_L, \Pi_L^\pm]) \tag{2.76}$$

où

$$J_1 := (H_L+1)\mathcal{V}_{\eta,L}1 f_L(H_L+1) + (H_L+1)f_L(\mathcal{V}_{\eta,L}1)^\star(H_L+1) \tag{2.77}$$

Lemme 2.4.21. *La partie linéaire du courant dans l'espace où les fils sont tronqués prend la forme*

$$\begin{aligned} j_{\eta,L}^{(1)} &= -i\text{tr}((H_L+1)\left[\mathcal{V}_{\eta,L}1, R_L\right](H_L+1)[f_L, \Pi_L^\pm]) &(2.78)\\ &= -i\eta\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta s)\text{tr}\left(\tilde{V}_L(s)[f_L, \Pi_L^\pm]\right)ds. &(2.79)\end{aligned}$$

Preuve : on utilise la remarque :

$$\mathcal{V}_{\eta,L}1 = -(\mathcal{V}_{\eta,L}1)^\star.$$

Il vient :

$$J_1 = (H_L+1)\left[\mathcal{V}_{\eta,L}1, f_L\right](H_L+1). \tag{2.80}$$

En utilisant la cyclicité de la trace on obtient (2.78).
Afin de prouver (2.79) on calcule

$$\begin{aligned}
[\mathcal{V}_{\eta,L}1, R_L] &= -i\eta\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)\left[\tilde{V}_L(r), R_L\right]dr\\
&= -i\eta\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)e^{irH_L}\left[V_L, R_L\right]e^{-irH_L}dr\\
&= -\eta\int_{-\infty}^0 \chi(\eta r)\partial_r\left(e^{irH_L}R_LV_LR_Le^{-irH_L}\right)dr\\
&= -\left[\chi(\eta r)e^{irH_L}R_LV_LR_Le^{-irH_L}\right]_{-\infty}^0 +\\
&+ \int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)e^{irH_L}R_LV_LR_Le^{-irH_L}dr\\
&= -R_LV_LR_L + \int_{-\infty}^0 \eta\chi'(\eta r)e^{irH_L}R_LV_LR_Le^{-irH_L}dr
\end{aligned} \tag{2.81}$$

D'où

$$J_1 = -V_L + \int_{-\infty}^0 \eta\chi'(\eta r)e^{irH_L}V_Le^{-irH_L}dr \tag{2.82}$$

et le courant prend la forme

$$\begin{aligned} j^{(1)}_{\eta,L} &= -i\text{tr}(\Big\{-V_L + \int_{-\infty}^{0} \eta\chi'(\eta r)e^{irH_L}V_L e^{-irH_L}dr[R_L,\Pi_L^{\pm}]\Big\}) \\ &= i\text{tr}(V_L R_L \Pi_L^{\pm} - V_L\Pi_L^{\pm}R_L) \\ &- i\eta\text{tr}(\int_{-\infty}^{0}\chi'(\eta r)e^{irH_L}V_L e^{-irH_L}dr[f_L,\Pi_L^{\pm}]) \qquad (2.83) \\ &= -i\eta\int_{-\infty}^{0}\text{tr}(\chi'(\eta r)e^{irH_L}V_L e^{-irH_L}[f_L,\Pi_L^{\pm}])dr \qquad (2.84) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé la cyclicité de la trace en (2.83). ∎

Lemme 2.4.22. *La partie linéaire du courant dans le système des configurations limites noté* $\bar{j}^{(1)}_{\eta,L}$ *est*

$$\bar{j}^{(1)}_{\eta,L} = -i\eta\int_{-\infty}^{0} tr\left(\chi'(\eta r)e^{ir\bar{H}_L}\bar{V}_L e^{-ir\bar{H}_L}[\bar{f}_L,\bar{\Pi}_L^{\pm}]\right)dr. \qquad (2.85)$$

Théorème 2.4.23. *La partie linéaire du courant dans la limite de volume infini prend la forme suivante*

$$j^{(1)}_{\eta} = -i\eta\int_{-\infty}^{0}\chi'(\eta s)tr\left(e^{isH}Ve^{-isH}\left[f,\Pi^{\pm}\right]\right)dr. \qquad (2.86)$$

Preuve. Le théorème 2.4.23 est la conséquence des lemmes 6.2.18, 6.2.12 et 6.2.17, ainsi que du théorème 2.4.12.

2.4.4 La limite adiabatique de l'état et du courant

a. Proposition prélimiraire

On a besoin pour calculer la limite adiabatique de l'état, de démontrer la proposition suivante

Proposition 2.4.24. *Soit* H^D *l'opérateur défini de manière analogue à* H *mais avec une condition de Dirichlet supplémentaire en 0. L'opérateur d'onde* $\omega(H^D,H)$ *défini comme*

$$\omega(H^D,H) = s - \lim_{s\to-\infty} e^{isH}e^{-isH^D}P^D_{ac}(H^D) \qquad (2.87)$$

existe. Il en est de même pour son adjoint $\omega(H,H^D)^\star$.

Preuve : on utilise le théorème XI.23 de [60]. Ce théorème dit que pour montrer l'existence de l'opérateur d'onde $\omega(H^D,H)$ il suffit de montrer l'existence de la limite

$$\lim_{t\to\infty} e^{ifHs}e^{-ifH^Ds}$$

où f est une fonction admissible. On choisit pour fonction la fonction f comme suit

$$\begin{aligned} f:\mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto f(x) := \frac{1}{1+e^{\beta(x-\mu)}} \qquad (2.88) \end{aligned}$$

Cette fonction est admissible car
i) $\frac{d^2f}{dx^2} := f''(x)$ est L^1 sur tout compact de $\mathbb{R}$.
ii) $\frac{d(-f)}{dx} := f'(x)$ est strictement positive. En effet,

$$-f'(x) = \frac{\beta e^{\beta(x-\mu)}}{(1+e^{\beta(x-\mu)})^2} > 0. \tag{2.89}$$

b. La limite adiabatique de la partie linéaire de l'état

Théorème 2.4.25. *La partie linéaire de l'état dans la limite adiabatique existe et est de la forme :*

$$\rho^{(1)} = \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz R(z)f(z)VR(z) - \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma \chi'(\eta r)f(z)R(z)\omega V\omega^\star R(z). \tag{2.90}$$

où $\chi'(\eta r) = \frac{d\chi(\eta r)}{dr}$.

Preuve. A partir de la formule donnée dans le théorème (2.4.20), on calcule

$$\begin{aligned}
\rho_\eta^{(1)} &= \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz f(z)R(z)VR(z) - \\
&- \frac{1}{2\pi}\eta\int_\Gamma dz\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)f(z)R(z)e^{irH}e^{-irH^D}Ve^{irH^D}e^{-irH}drR(z) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz f(z)R(z)VR(z). \\
&. \quad \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz\int_{-\infty}^0 \chi'(r)e^{i\frac{r}{\eta}H}e^{-i\frac{r}{\eta}H^D}Ve^{i\frac{r}{\eta}H^D}e^{-i\frac{r}{\eta}H}drR(z)
\end{aligned}$$

Il vient alors

$$\begin{aligned}
\rho^{(1)} &:= \lim_{\eta\to 0} j_\eta^{(1)} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz f(z)R(z)VR(z) - \\
&- \frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0}\int_\Gamma dz\int_{-\infty}^0 \chi'(r)f(z)R(z)e^{i\frac{r}{\eta}H}e^{-i\frac{r}{\eta}H^D}Ve^{i\frac{r}{\eta}H^D}e^{-i\frac{r}{\eta}H}drR(z) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz f(z)R(z)VR(z) - \frac{1}{2\pi}\int_\Gamma dz f(z)R(z)\omega V\omega^\star drR(z) \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{2.91}$$

c. La limite adiabatique de la partie linéaire du courant

Dans la suite on va supposer que H n'a pas de spectre singulier continu. On suppose également que

H n'a pas de valeurs propres plongées dans son spectre continu.

On suppose aussi que

H a un nombre N fini de valeurs propres, de multiplicité finie

et par conséquent elles sont localisées sous son spectre essentiel. Finalement on suppose que

le spectre essentiel de H est purement absolument continu.

On appelle P_i le projecteur orthogonal correspondant à la valeur propre discrète E_i de H. On notera P_{ac} le projecteur orthogonal correspondant au spectre absolument continu de H.
On insère alors dans (2.76) la quantité

$$\sum_{i\leq N} P_i + P_{ac} = 1. \tag{2.92}$$

Cette manipulation permet de montrer que la partie discrète du spectre ne va jouer aucun rôle dans l'expression finale de la réponse linéaire du courant. On montre en effet que les termes contenant les projecteurs sur le spectre discret s'annulent. Grâce à la présence des projecteurs P_i et P_j on va pouvoir utiliser la cyclicité de la trace.
En substituant (2.92) dans (2.76) on a :

$$\begin{aligned}
j_\eta^{(1)} &= -i\eta \int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)\mathrm{tr}(e^{irH}Ve^{-irH}[f,\Pi^\pm])dr \\
&= -i\eta \int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r) \sum_{i,j\leq N} \mathrm{tr}(P_i e^{irH}Ve^{-irH}P_j[f,\Pi^\pm])dr - \\
&- i\eta \int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r) \sum_{i\leq N} \mathrm{tr}(P_i e^{irH}Ve^{-irH}P_{ac}[f,\Pi^\pm])dr - \\
&- i\eta \int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r) \sum_{j\leq N} \mathrm{tr}(P_{ac} e^{irH}Ve^{-irH}P_j[f,\Pi^\pm])dr - \\
&- i\eta \int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)\mathrm{tr}(P_{ac} e^{irH}Ve^{-irH}P_{ac}[f,\Pi^\pm])dr \\
&:= -i\eta \int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)\left(A(r)+B(r)+C(r)+D(r)\right)dr/
\end{aligned} \tag{2.93}$$

On calcule le terme $A(r)$:

$$\begin{aligned}
A(r) &= \sum_{i,j\leq N} \mathrm{tr}(P_i e^{irH}Ve^{-irH}P_j[f,\Pi^\pm]) \\
&= \sum_{i,j\leq N} e^{ir(E_i-E_j)}\mathrm{tr}(P_i V P_j[f,\Pi^\pm]).
\end{aligned} \tag{2.94}$$

Si $i=j$ alors on a

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}(P_iVP_i[f,\Pi^\pm]) &= \mathrm{tr}(VP_i[f,\Pi^\pm]P_i) \\
&= f(E_i)\mathrm{tr}(VP_i\Pi^\pm P_i - VP_i\Pi^\pm P_i) = 0
\end{aligned}$$

On peut utiliser la cyclicité de la trace grâce à la présence des projecteurs P_i.
Si $i\neq j$ alors

$$\begin{aligned}
-i\eta\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)A(r)dr &= -i\mathrm{tr}(\eta \sum_{i,j\leq N}\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)e^{i(E_i-E_j)}P_iVP_j[f,\Pi^\pm]dr) \\
&= -i\sum_{i,j\leq N}\mathrm{tr}(\widehat{1_{\mathbb{R}_-}\chi'}\left(\frac{E_j-E_i}{\eta}\right)P_iVP_j[f,\Pi^\pm]) \\
&\overset{\eta\to 0}{\to} 0
\end{aligned} \tag{2.95}$$

On a noté $\widehat{1_{\mathbb{R}_-}\chi'}\left(\frac{E_j-E_i}{\eta}\right)$ la transformée de Fourier de $1_{\mathbb{R}_-}\chi'$ en $\frac{E_j-E_i}{\eta}$. On sait par le théorème de Riemann-Lebesgue (voir théorème IX.7 de [59]) que, comme $\chi(\eta t)$ est L^1, ce terme tend vers 0 lorsque η tend vers 0 dans la topologie de la norme. Ce terme tend vers zéro également dans la norme trace. Pour obtenir (2.95) on a utilisé les propriétés suivantes :

– Pour toute fonction g de l'opérateur H :

$$\|g(H)\| = \|g\|_\infty$$

– Pour montrer que ce terme tend vers zéro dans la norme trace on utilise :

$$\left|\mathrm{tr}\left(\widehat{1_{\mathbb{R}_-}\chi'}(i\frac{(E_j-E_i)}{\eta})\right)\right| \leq \left\|\widehat{1_{\mathbb{R}_-}\chi'}\left(i\frac{(E_j-E_i)}{\eta}\right)\right\| \left\|P_iVP_j\left[f,\Pi^\pm\right]\right\|_1 \tag{2.96}$$

On calcule à présent les termes $B(r)$ et $C(r)$

$$\mathrm{tr}\left(P_ie^{irH}Ve^{-irH}P_{ac}\left[f,\Pi^\pm\right]\right) = \mathrm{tr}\left(e^{irE_i}P_iVe^{-irH}P_{ac}\left[f,\Pi^\pm\right]\right) \tag{2.97}$$

On utilise le théorème spectral pour le calcul suivant. On a

$$H_{ac} = \int_{\sigma(H_{ac})} \lambda dE_\lambda$$

où $\sigma(H_{ac})$ désigne le spectre absolument continu de H et où $\lambda \in \sigma(H_{ac})$. Ainsi, en échangeant l'intégrale avec la trace dans (2.93) il vient

$$\begin{aligned}
& \mathrm{tr}\left(\int_{-\infty}^0 \eta\chi'(\eta r)e^{irH}Ve^{-irH}P_{ac}\left[f,\Pi^\pm\right]P_i dr\right) \\
= \ & \mathrm{tr}\left(\int_{-\infty}^0 \eta\chi'(\eta r)P_iVe^{ir(E_i-H_{ac})}P_{ac}\left[f,\Pi^\pm\right]dr\right) \\
= \ & \mathrm{tr}\left(\int_{-\infty}^0 \eta\chi'(\eta r)P_iV\int_{\sigma(H_{ac})} dE_\lambda e^{ir(E_i-\lambda)}P_{ac}\left[f,\Pi^\pm\right]dr\right) \\
= \ & \mathrm{tr}\left(P_iV\int_{\sigma(H_{ac})} dE_\lambda \int_{-\infty}^0 \eta\chi'(\eta r)e^{ir(E_i-\lambda)}P_{ac}\left[f,\Pi^\pm\right]dr\right) \\
= \ & \mathrm{tr}\left(P_iV\int_{\sigma(H_{ac})} dE_\lambda \widehat{1_{\mathbb{R}_-}\chi'}\left(\frac{\lambda-E_i}{\eta}\right)\left[f,\Pi^\pm\right]\right)
\end{aligned} \tag{2.98}$$

On a utilisé en (2.98) le fait que H n'a pas de valeurs propres discrètes plongée dans le spectre continu. On a aussi supposé que ses valeurs propres discrètes sont strictement en dessous du spectre essentiel, ainsi la quantité $\lambda - E_i$ est positive et non nulle. Finalement, en utilisant comme précedemment le théorème de Riemann-Lebesgue on montre que ce terme ne contribue pas à la réponse linéaire du courant dans la limite adiabatique.
On utilise un raisonnement analogue pour montrer que le terme $C(r)$ ne contribue pas à la réponse linéaire en courant dans la limite adiabatique.
On calcule à présent le dernier terme de (2.93) :

$$D(r) = \mathrm{tr}(P_{ac}e^{irH}Ve^{-irH}P_{ac}[f,\Pi^\pm]).$$

On introduit

$$P_{ac}^D(H^D) := \Pi^- \oplus \Pi^+$$

le projecteur sur le spectre absolument continu de H^D l'Hamiltonien de Dirichlet obtenu à partir de H mais avec condition de Dirichlet. On note que

$$V = v_-\Pi^- + v_+\Pi^+ = VP_{ac}^D.$$

On utilise la proposition 2.4.24 et le théorème XI.23 de [60] : les propagateurs $\omega(-f(H),-f(H^D))$ et $\omega(-f(H),-f(H^D))^\star$ existent, et on a

$$\begin{aligned}\omega(-f(H^D),-f(H)) &= \omega(H^D,H) = \omega(-f(H^D),-f(H^D)-\Delta f)\\ \omega(-f(H^D,-f(H)))^\star &= \omega(H^D,H)^\star = \omega(-f(H^D),-f(H^D)-\Delta f)^\star\end{aligned}$$

où l'on a posé $\Delta f := f(H) - f(H^D)$. ∎

Théorème 2.4.26. *La limite adiabatique de la réponse linéaire du courant est*

$$j^\pm = iv_-tr\left(P_{ac}\omega\Pi^-\omega^\star P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^\pm\right]\right) + iv_+tr\left(P_{ac}\omega\Pi^+\omega^\star P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^\pm\right]\right) \tag{2.99}$$

Preuve : H^D commute avec V, en utilisant la définition (2.99) il suit

$$D(r) = \text{tr}(P_{ac}e^{irH}e^{-irH^D}Ve^{irH^D}e^{-irH}P_{ac}[f(H),\Pi^\pm])$$

D'où en remplaçant dans (2.93) :

$$\begin{aligned}j_\eta^\pm &= -i\eta\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)\text{tr}\left(P_{ac}e^{irH}e^{-irH^D}Ve^{irH^D}e^{-irH}P_{ac}[f(H),\Pi^\pm]\right)dr\\ j^\pm &:= -i\text{lim}_{\eta\to 0}\eta\int_{-\infty}^0 \chi'(\eta r)\text{tr}\left(P_{ac}e^{irH}e^{-irH^D}Ve^{irH^D}e^{-irH}P_{ac}[f(H),\Pi^\pm]\right)dr\\ &= -i\text{lim}_{\eta\to 0}\int_{-\infty}^0 \chi'(r)\text{tr}\left(P_{ac}e^{i\frac{r}{\eta}H}e^{-i\frac{r}{\eta}H^D}Ve^{i\frac{r}{\eta}H^D}e^{-i\frac{r}{\eta}H}P_{ac}[f(H),\Pi^\pm]\right)dr\\ &= -i\int_{-\infty}^0 \chi'(r)\text{tr}\left(P_{ac}\omega(H^D,H)V\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[f(H),\Pi^\pm]\right)dr\\ &= -i\text{tr}\left(P_{ac}\,\omega(H^D,H)V\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[f(H),\Pi^\pm]\right)\\ &= -i\text{tr}\left(P_{ac}\,\omega(H^D,H)V\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^\pm]\right).\end{aligned} \tag{2.100}$$

où en (2.100) on a utilisé que $[f(H^D),\Pi^\pm] = 0$. ∎

Lemme 2.4.27. $[\Delta f,\Pi^\pm]$ *est à trace.*

Preuve : on utilise la formule de Cauchy :

$$\Delta f = \int_\Gamma f(z)(R(z) - R^D(z))dz$$

D'où, en introduisant un contour fermé Γ qui ne contient pas les pôles de $f(z)$ (voir le lemme 2.4.19), il suit

$$\begin{aligned}\|\Delta f\|_1 &\leq \int_\Gamma dz\,|f(z)|\,\left\|(R(z)-R^D(z))dz\right\|_1 \\ &\leq \int_\Gamma dz\,|f(z)|\,C\end{aligned}$$

où C est une constante définie comme $C = 2\left\|R(z)-R^D(z)\right\|$. Cette affirmation est la conséquence du fait que $R(z)-R^D(z)$ est de rang deux (voir le lemme 6.2.23). De plus, $\int_\Gamma dz\,|f(z)|$ est bornée donc Δf est à trace.

Proposition 2.4.28. *Le courant dans le fil + se réécrit*

$$j^+ = (v_- - v_+)i\mathrm{tr}\left(P_{ac}\,\omega(H^D,H)\Pi^-\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]\right) \tag{2.101}$$

Preuve : on remarque que $\omega\left(\Pi^+ + \Pi^-\right)\omega^\star = 1$. Cela permet d'écrire :

$$\begin{aligned}j^+ &= iv_-\mathrm{tr}\left(P_{ac}\omega\Pi^-\omega^\star P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]\right) + iv_+\mathrm{tr}\left(P_{ac}\omega\Pi^+\omega^\star P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]\right) \\ &= iv_-\mathrm{tr}\left(P_{ac}\omega\Pi^-\omega^\star P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]\right) + \\ &+ iv_+\left\{\mathrm{tr}\left(P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]\right) - \mathrm{tr}\left(P_{ac}\omega\Pi^-\omega^\star P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]\right)\right\} \\ &= i(v_- - v_+)\mathrm{tr}\left(P_{ac}\omega\Pi^-\omega^\star P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]\right) \qquad (2.102)\end{aligned}$$

car

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left(P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]\right) &= \mathrm{tr}\left(P_{ac}\left[\Delta f,\Pi^+\right]P_{ac}\right) \\ &= \mathrm{tr}\left(P_{ac}\Delta f\Pi^+P_{ac} - P_{ac}\Pi^+\Delta f P_{ac}\right) \\ &= \mathrm{tr}\left(P_{ac}\Delta f\right) - \mathrm{tr}\left(\Delta f P_{ac}\right) \qquad (2.103) \\ &= \mathrm{tr}\left(P_{ac}\Delta f - P_{ac}\Delta f\right) = 0 \qquad (2.104)\end{aligned}$$

où on a utilisé la cyclicité de la trace en (2.103).

d. La formule de Landauer-Büttiker

Cette partie est consacrée à prouver le théorème suivant :

Théorème 2.4.29. *La formule de Landauer-Büttiker dans le cas d'un branchement adiabatique d'un biais de potentiel est*

$$j^\sigma = 2\pi(v_+ - v_-)\int_0^{+\infty} f'(E)\left|T_{\sigma;\sigma'}(E)\right|^2 dE \tag{2.105}$$

où $\sigma,\sigma' \in \{+,-\}$ et $T_{\sigma;\sigma'}(E)$ est la transmittance définie comme suit :

$$\left|T_{\sigma;\sigma'}(E)\right|^2 := \left|\frac{1}{f'(E)}\left\langle(\Delta f)\varphi_E^{\sigma'},\tilde{\varphi}_E^{\sigma}\right\rangle\right|^2 \tag{2.106}$$

avec $\varphi_E^\pm$ les fonctions propres généralisées associées à l'Hamiltonien H_L et $\tilde{\varphi}_E^\pm$ les fonctions propres généralisées de l'Hamiltonien de Dirichlet associé à H_L.

Preuve : on utilise la transformée de Fourier généralisée. On définit la transformation suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{F} : \text{Ran}\, P_{ac} &\longrightarrow \oplus_{\sigma\in\{\pm\}} L^2(\mathbb{R}_+) \\ f &\to ((E,\sigma) \to \langle f, \varphi_E^\sigma\rangle) \end{aligned} \tag{2.107}$$

On réécrit (2.101) comme

$$J^+ := \text{tr}\left(P_{ac}\,\Pi^-\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]\omega(H^D,H)P_{ac}\right)$$

donc $P_{ac}\,\omega(H^D,H)\Pi^-\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]P_{ac}$ est un opérateur dans Ran P_{ac}.

$$\begin{aligned} J^+ &= \text{tr}\left(\mathcal{F}P_{ac}\,\omega(H^D,H)\Pi^-\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]P_{ac}\mathcal{F}^\star\right) \\ &= \sum_{\sigma\in\{\pm\}}\int_{\sigma(H_{ac})}\left\langle P_{ac}\omega(H^D,H)\Pi^-\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]\varphi_E^\sigma,\varphi_E^\sigma\right\rangle \\ &= \sum_{\sigma\in\{\pm\}}\int_{\sigma(H_{ac})}\left\langle \omega(H^D,H)\Pi^-\omega(H^D,H)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]\varphi_E^\sigma,P_{ac}\varphi_E^\sigma\right\rangle dE \\ &= \sum_{\sigma\in\{\pm\}}\int_{\sigma(H_{ac})}\left\langle \Pi^-\omega(H^D,H_{ac})^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]\varphi_E^\sigma,\omega(H^D,H_{ac})^\star\varphi_E^\sigma\right\rangle dE \\ &= \sum_{\sigma\in\{\pm\}}\int_{\sigma(H_{ac})}\left\langle \omega(H^D,\lambda)^\star P_{ac}[\Delta f,\Pi^+]\varphi_E^\sigma,\Pi^-\tilde\varphi_E^\sigma\right\rangle dE \\ &= \int_{\sigma(H_{ac})}\left\langle [\Delta f,\Pi^+]\tilde\varphi_E^-,\omega(H^D,\lambda\tilde\varphi_E^-\right\rangle dE \\ &= \int_{\sigma(H_{ac})}\left\langle [\Delta f,\Pi^+]\varphi_E^-,\varphi_E^-\right\rangle dE \\ &= 2i\int_{\sigma(H_{ac})}\Im\big(\left\langle \Delta f\Pi^+\varphi_E^-,\varphi_E^-\right\rangle\big)dE. \end{aligned}$$

On a utilisé ici la proposition 1 du chapitre XI.3 de [60]. Grâce à l'équation de Lipmann-Schwinger (voir chapitre XI.6 (81) [60]) on a alors :

$$\begin{aligned} \Delta f\Pi^+\varphi_E^- &= \Delta f\Pi^+\left(\tilde\varphi_E^- - \lim_{\epsilon\to0^+}\left(f(H^D)-f(E)-i\epsilon\right)^{-1}\Delta f\varphi_E^-\right) \\ &= \Delta f\Pi^+\lim_{\epsilon\to0^+}\left(f(H^D)-f(E)-i\epsilon\right)^{-1}\Delta f\varphi_E^-. \end{aligned} \tag{2.108}$$

Finalement le courant devient :

$$\begin{aligned} j^+ &= 2(v_- - v_+)\int_{\sigma(H_{ac})}\Im\left\langle \Delta f\Pi^+\varphi_E^-,\varphi_E^-\right\rangle dE \\ &= 2(v_- - v_+)\int_{\sigma(H_{ac})}\Im\left\langle \Delta f\Pi^+\left(f(H^D)-f(E)-i\epsilon\right)^{-1}\Delta f\varphi_E^-,\varphi_E^-\right\rangle dE. \end{aligned} \tag{2.109}$$

On utilise pour conclure la formule de Sokhotskii-Plemelj :

$$\Im\left\langle \Delta f\Pi^+\lim_{\epsilon\to0^+}\left(f(H^D)-f(E)-i\epsilon\right)^{-1}\Delta f\varphi_E^-,\varphi_E^-\right\rangle = \frac{\pi}{f'(E)}\left|\left\langle \Delta f\varphi_E^-,\tilde\varphi_E^+\right\rangle\right|^2. \tag{2.110}$$

En substituant ce terme dans (2.109) on démontre (2.105). ∎

Chapitre 3

Courant transient et courant à l'équilibre stationnaire dans l'approche sans partition initiale : le cas discret

3.1 Le modèle et le théorème principal

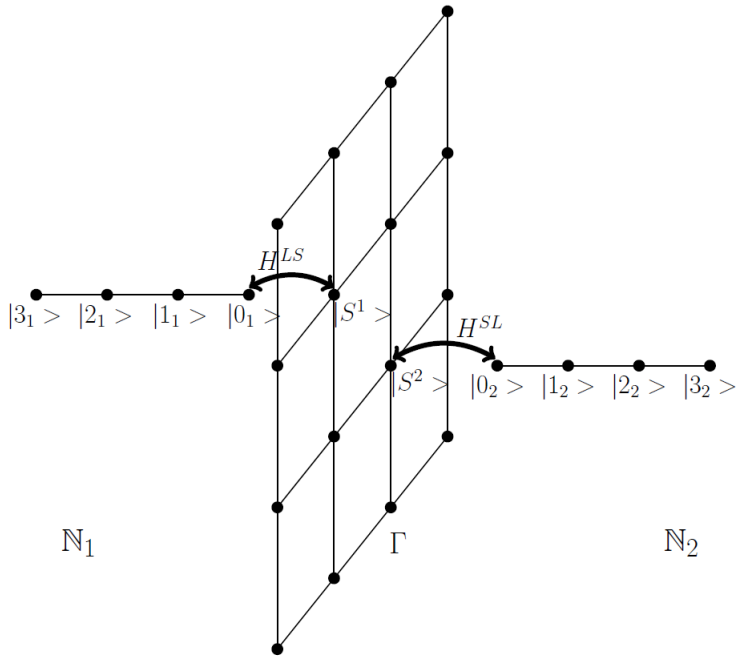


FIGURE 3.1: Un échantillon Γ couplé à deux fils de longueur semi-infinie $\mathbb{N}_1$ et $\mathbb{N}_2$. $|j_\alpha\rangle$ est l'élément de base au site j du fil α

On étudie un modèle discret sur l'espace d'Hilbert à une particule $\mathcal{H}$. *On suit les conventions physiques concernant la linéarité du produit scalaire par rapport à la seconde variable.*

Les porteurs de charge sont des fermions n'interagissant pas entre eux (électrons). Soit le sous ensemble fini de $\mathbb{Z}^2$ $\Gamma \subset \mathbb{Z}^2$. On connecte S à deux fils $\alpha = 1, 2$, discrets, "unidimensionnels" et de longueur semi-infinie. Sur les fils, les sites sont indicés par l'ensemble $\mathbb{N}_\alpha := \{0, 1, 2, ...\}$. On construit ainsi la base standard de $\mathbb{Z}$. Ainsi, $|j_\alpha >$ désigne l'élément de base au site j du fil α, voir figure ci-dessus. L'espace de Hilbert du système complet est la somme directe de l'espace représentant l'échantillon $\Gamma \subset \mathbb{Z}^2$ et les deux espaces correspondants aux fils $\{N_\alpha\}_{\alpha=1,2}$:

$$\mathcal{H} := l^2(\Gamma) \oplus l^2(\mathbb{N}_1) \oplus l^2(\mathbb{N}_2) \, . \tag{3.1}$$

On note $\{|m, n\rangle\}_{(m,n)\in\mathbb{Z}^2}$ et $\{|j_\alpha\rangle\}_{j_\alpha\in\mathbb{N}_\alpha}$ les bases correspondantes aux espaces $l^2(\mathbb{Z}^2)$ et $l^2(\mathbb{N}_\alpha)$, où $\alpha = 1, 2$.

On considère l'Hamiltonien à une particule.On choisit pour Hamiltonien associé à l'échantillon l'opérateur H^S, autoadjoint et borné. Par exemple, on choisit H^S comme la restriction à $l^2(\Gamma)$, d'un opérateur de type Harper sur un réseau avec conditions de Dirichlet sur Γ. Cependant la forme de H^S n'a pas d'importance dans la preuve du théorème principal. On note également que l'on choisit Γ fini mais arbitrairement grand.

Sur chaque fil $\alpha = 1, 2$ on définit le Laplacien discret à une dimension, agissant sur $l^2(\mathbb{N}_\alpha)$ avec conditions de Dirichlet sur $\mathbb{N}_\alpha$:

$$\begin{aligned} &(H^L_\alpha \Psi)(n) := t_L \left\{\Psi(n+1) + \Psi(n-1)\right\}, \quad n \geq 1; \quad (H^L_\alpha \Psi)(0) := t_L \Psi(1), \\ &H^L := \sum_{\alpha=1}^{2} H^L_\alpha, \end{aligned} \tag{3.2}$$

où $t_L > 0$ est la constante de saut. Dans la suite on appelle H_0 l'Hamiltonien correspondant à ces trois systèmes **déconnectés** :

$$H_0 := H^L + H^S.$$

Le couplage entre l'échantillon et les fils est décrit par l'Hamiltonien

$$H^T := \tau \sum_{\alpha=1}^{2} \{|0_\alpha\rangle\langle\mathcal{S}^\alpha| + |\mathcal{S}^\alpha\rangle\langle 0_\alpha|\} =: H^{LS} + H^{SL}. \tag{3.3}$$

où $\tau > 0$ est le paramètre de saut entre les fils et l'échantillon. L'Hamiltonien d'interaction (3.3) modélise un point quantique ou une barrière de potentiel. $|0_\alpha\rangle$ est le premier site sur le fil α et $|\mathcal{S}^\alpha\rangle$ est le site de contact $|m_\alpha, n_\alpha\rangle$ sur l'échantillon couplé au fil α.

L'Hamiltonien à une particule du système complet est

$$H := H^S + \sum_{\alpha=1}^{2} H^L_\alpha + H^T = H^S + H^L + H^{LS} + H^{SL} =: H_0 + H^T. \tag{3.4}$$

Remarque 3.1.1. *Comme il l'a été dit précédemment, les résultats peuvent être étendus à des cas d'Hamiltoniens H^L et H^T plus généraux. L'unique condition nécessaire à la démonstration du théorème est l'**absolue continuité** du spectre sur les fils, et le fait que l'opérateur couplant les fils et l'échantillon soit de **rang fini.***

3.2 État et opérateur courant

A $t < 0$ le système complet couplé (3.4) est à l'équilibre thermodynamique pour une température donnée $1/\beta \geq 0$ et un potentiel chimique μ. Puisque l'on travaille avec des fermions qui n'interagissent pas entre eux, la matrice densité à une particule et à l'équilibre est l'opérateur de Fermi-Dirac :

$$f_\mu(H) = \frac{1}{e^{\beta(H-\mu)}+1}\ ,\ \mu \in \mathbb{R}\ , \tag{3.5}$$

défini sur l'espace de Hilbert (3.1).

Au temps $t = 0$ on allume un biais de potentiel sur le fil 1. On procède de la manière suivante : on fixe un $t_1 > 0$ et on choisit une fonction réelle et continue ϕ avec la propriété suivante : $\phi(t) = 0$ si $t < 0$ et $\phi(t) = 1$ si $t > t_1$. Soit $v > 0$. On appelle $P_1 : \mathcal{H} \mapsto l^2(\mathbb{N}_1)$ la projection sur le fil 1. On définit alors le biais de potentiel dépendant du temps comme suit :

$$V_1(t) := v\phi(t)P_1\ . \tag{3.6}$$

On note $U(t)$ l'opérateur unitaire d'évolution associé à l'Hamiltonien du système avec biais $H + V_1(t)$ et satisfaisant l'équation d'évolution :

$$i\partial_t U(t) = (H + V_1(t))U(t), \quad U(0) = \mathbb{I}\ . \tag{3.7}$$

La matrice densité au temps $t > 0$ est la solution de l'équation de Liouville et s'exprime comme suit :

$$\rho(t) := U(t)f_\mu(H)U(t)^*\ . \tag{3.8}$$

On note $P_2^{(n)} : \mathcal{H} \mapsto l^2(\{n, n+1, \ldots\})$, la projection sur le second fil mais sur lequel on exclut les n premiers sites. Si $n = 0$, alors cette projection est simplement la projection sur le fil 2 notée P_2. On définit l'opérateur courant qui modélise la mesure du flux de particules chargées au site n par

$$j_n := i[H + V_1(t), P_2^{(n)}] = i[H, P_2^{(n)}]\ , \quad j_0 = i[H^T, P_2]\ . \tag{3.9}$$

Remarque 3.2.1. *L'opérateur courant est un opérateur de rang fini, il est donc à trace. C'est cette propriété qui est importante car elle simplifie les estimations ci-après et qui n'est vraie que dans le cas discret. Ce point rend ainsi le cas continu plus compliqué techniquement parlant.*

Remarque 3.2.2. *Pour obtenir* (2.48) *on a utilisé les propriétés suivantes dues aux supports des opérateurs de projection* $P_2^{(n)}$:

$$[P_1, P_2^{(n)}] = 0, \quad P_2^{(n)}P_2^{(n+1)} = P_2^{(n+1)}, \quad [H^S, P_2^{(n)}] = 0, \quad \forall n \geq 0, \tag{3.10}$$

mais aussi

$$[H^L, P_2] = 0\ ,\ [H^L, P_2^{(n)}] \neq 0, \quad [H^T, P_2^{(n)}] = 0 \quad \forall n \geq 1. \tag{3.11}$$

Ces propriétés rendent les commutateurs dans (3.9) *non triviaux et sont importantes pour l'étude de la propagation du courant (voir le point* (ii) *du théorème principal.)*

Le courant de charge traversant le second fil au temps $t > 0$ et mesuré au site n est donné par la moyenne de l'opérateur courant j_n (3.9) dans l'état quasi-libre donné par la matrice densité $\rho(t)$, c'est-à-dire :

$$I(t, n) := \mathrm{Tr}\{\rho(t)j_n\}. \tag{3.12}$$

3.3 Le théorème principal

Voici le résultat principal de cette partie :

Théorème 3.3.1. *(i) La limite ergodique suivante existe et ne dépend ni de n, t_1 et ϕ :*

$$I_\infty := \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T I(t,n)dt. \tag{3.13}$$

(ii) On fixe un $t \geq 0$. Alors le courant s'annule si on le mesure loin sur le fil 2 :

$$\lim_{n\to\infty} I(t,n) = 0. \tag{3.14}$$

(iii) On suppose que l'opérateur $H + vP_1$ ne possède qu'un nombre fini de valeurs propres. Si l'on mesure le courant très loin sur le fil 2 (mais pas infiniment loin), alors les effets d'oscillations dus au courant transient seront de plus en plus faibles et le courant défini en (3.12) *fluctuera légèrement autour de la valeur limite* (3.13)*. En d'autre termes :*

$$\lim_{n\to\infty} \limsup_{t\to\infty} |I(t,n) - I_\infty| = 0. \tag{3.15}$$

(iv) On note $\mathcal{T}_{12}^{(v)}(\lambda)$ le coefficient de transmission entre les deux fils au bais v pour le paramètre spectral λ. On établit alors la formule de courant de type Landauer-Büttiker suivante :

$$I_\infty(v) = 2\pi \int_{[-2t_L+v,2t_L+v]\cap[-2t_L,2t_L]} \{f_\mu(\lambda) - f_\mu(\lambda - v)\}\, \mathcal{T}_{12}^{(v)}(\lambda)d\lambda\,. \tag{3.16}$$

Remarque 3.3.2. *De (ii) on peut conclure que pour tout temps t fixé, la valeur du courant est une fonction du point d'observation (site n) de telle manière que lorsque l'on choisit un n de plus en plus loin sur le fil 2 $I(t,n)$ tend vers zéro. On ne peut pas espérer que $I(t,.)$ ait un support compact car cela signifierait que la progression de la charge sur le fil se fait à une vitesse finie ce qui est assurément faut compte tenu du caractère non relativiste de la dynamique sur les fils.*

D'un autre côté, le point (iii) montre que si l'on place l'appareil de mesure du courant de plus en plus loin de l'échantillon, et si l'on attend suffisamment longtemps, la valeur du courant sera alors non nulle et ses oscillations autour de la valeur du courant dans le cas où le système est dans l'état de NESS seront de plus en plus faible.

Conjecture 3.3.3. *Comme complément à la remarque 3.3.2 on fait la conjecture suivante. La progression du courant est reliée à la vitesse de phase et la vitesse de propagation de groupe des corrélations spatiales du modèle étudié est finie. Cela signifie que si l'on considère une observable A quelconque supportée sur un voisinage de l'échantillon, alors il existe des constantes C, M positives ainsi qu'une vitesse v telles que l'inégalité de type Lieb-Robinson soit vérifiée* [49] :

$$\|[A, U(t)^* P_2^{(n)} U(t)]\| \leq Ce^{-M(n-\nu t)} \tag{3.17}$$

Remarque 3.3.4. *Puisque l'on considère des fermions n'interagissant pas entre eux, les preuves des points (i) à (iv) seront basées sur les théories et techniques de diffusions à une particule. Les arguments concernant le cas à n particules ne concernent que des porteurs de charges interagissant.*

Remarque 3.3.5. *Pour les mêmes raisons, on peut complètement caractériser l'état multi-particulaire $\omega(.)$ de l'algèbre de Fermi CAR($\mathcal{H}$) (on rappelle qu'il s'agit de l'algèbre des relations canoniques d'anti-commutation) par l'opérateur matrice densité ρ défini sur $\mathcal{H}$. Si à $t = 0$ l'état $\omega(.)$ est l'état d'équilibre grand canonique sur CAR($\mathcal{H}$) d'un système de Fermi sans interaction (état d'équilibre quasi libre)* (3.4)*, alors, l'opérateur matrice densité est égal à $\rho(t = 0) = f(H)$. L'évolution donnée en* (3.7) *conserve cette propriété, c'est-à-dire qu'elle transforme cet étaten un état hors-équilibre quasi-libre* (3.8)

3.4 Preuve du théorème principal

3.4.1 Rappel de théorie spectrale et de théorie de la diffusion

On rappelle ici des éléments de théorie de la diffusion stationnaire associée à la paire d'Hamiltoniens $(H + vP_1, H_0 + vP_1)$, où $H := H_0 + H^T$. Dans le cas du modèle, le système libre correspond aux fils et le biais sur le premier fil, ainsi que l'échantillon découplé des fils. Ce système libre est décrit par l'Hamiltonien $H_0 + vP_1$. Le système couplé, quant à lui, contient aussi le terme H^T.

L'opérateur $H_0 = H^L + H^S$ possède un sous-espace absolument continu $\mathcal{H}^{ac}(H_0) = \bigoplus_{\alpha=1}^{2} l^2(\mathbb{N}_\alpha)$. Puisque l'opérateur $H - H_0$ est de rang fini, alors la théorie de la diffusion des opérateurs à trace implique que les opérateurs d'onde de Møller

$$\Omega_{\pm}^{(v)} = s - \lim_{t \to \mp\infty} e^{it(H+vP_1)} e^{-it(H_0+vP_1)} E_{\mathrm{ac}}(H_0 + vP_1)\,, \tag{3.18}$$

existe et sont complets, voir [60], [68]. Ici $E_{\mathrm{ac}}(H_0 + vP_1) = E_{\mathrm{ac}}(H_0)$ est la projection sur le sous-espace absolument continu $\mathcal{H}^{ac}(H_0 + vP_1) \subset \mathcal{H}$, ou $\mathcal{H}^{ac}(H_0) \subset \mathcal{H}$ des opérateurs correspondants. La localisation et la nature du spectre d'opérateurs comme H ont été largement étudiées dans le papier [21] ; on peut démontrer sous certaines conditions génériques qu'il y a un nombre fini de valeurs propres et qu'il n'y a jamais de spectre singulier continu.

Il est bien connu que l'ensemble des fonctions propres généralisées (normalisées) de H^L sur les fils semi-infinis $\alpha = 1, 2$ ont la forme

$$\Psi_\alpha(\lambda) = \sum_{m \geq 0} \Psi(\lambda; m) |m_\alpha\rangle, \quad \Psi(\lambda; m) = \frac{\sin(k(m+1))}{\sqrt{\pi t_L \sin(k)}}. \tag{3.19}$$

Ici, le paramètre spectral est $\lambda = \lambda_k (:= 2t_L \cos(k))$ pour $k \in (-\pi, \pi)$. La transformation de Fourier généralisée associée à ses vecteurs propres est définie par

$$F\colon \bigoplus_{\alpha=1}^{2} l^2(\mathbb{N}_\alpha) \to \bigoplus_{\alpha=1}^{2} L^2([-2t_L, 2t_L]), \tag{3.20}$$

$$[F(\Phi)]_\alpha(\lambda) = \langle \Psi_\alpha(\lambda), \Phi_\alpha \rangle_{l^2(\mathbb{N}_\alpha)} = \sum_{m \geq 0} \overline{\Psi(\lambda; m)} \Phi_\alpha(m). \tag{3.21}$$

Son adjoint est donné par

$$F^*\colon \bigoplus_{\alpha=1}^{2} L^2([-2t_L, 2t_L]) \to \bigoplus_{\alpha=1}^{2} l^2(\mathbb{N}_\alpha), \tag{3.22}$$

$$[F^*(\Xi)]_\alpha(m) = \int_{-2t_L}^{2t_L} \Xi_\alpha(\lambda) \Psi(\lambda; m) d\lambda. \tag{3.23}$$

F est un opérateur unitaire et FH^LF^* est juste la multiplication par $\lambda\mathbb{I}$ sur un espace qui est l'intégrale directe suivante $\int^{\oplus}_{[-2t_L,2t_L]} \mathbb{C}^2 d\lambda \cong \bigoplus_{\alpha=1}^2 L^2([-2t_L, 2t_L])$, i.e.

$$FH^LF^* \cong \int^{\oplus}_{[-2t_L,2t_L]} \lambda\mathbb{I}\, d\lambda. \tag{3.24}$$

Si le biais est localisé sur le premier fil, la situation est modifiée de la manière suivante. Puisque $\mathcal{H}^{ac}(H_0) = \mathcal{H}^{ac}(H^L)$, les fonctions propres généralisées de $H_0 + vP_1$ sont choisies comme suit

$$\Psi_1^{(v)}(\lambda; m) := \Psi(\lambda - v; m), \quad \lambda \in [-2t_L + v, 2t_L + v], \quad m \geq 0, \tag{3.25}$$

$$\Psi_2^{(v)}(\lambda; m) := \Psi(\lambda; m), \quad \lambda \in [-2t_L, 2t_L], \quad m \geq 0. \tag{3.26}$$

La transformation de Fourier généralisée correspondante est alors

$$F_v \colon \bigoplus_{\alpha=1}^{2} l^2(\mathbb{N}_\alpha) \to L^2([-2t_L + v, 2t_L + v]) \oplus L^2([-2t_L, 2t_L]) \tag{3.27}$$

$$[F_v(\Phi)]_1(\lambda) = \sum_{m\geq 0} \overline{\Psi(\lambda - v; m)}\Phi_1(m), \quad [F_v(\Phi)]_2(\lambda) = \sum_{m\geq 0} \overline{\Psi(\lambda; m)}\Phi_2(m)\ . \tag{3.28}$$

Cependant, on peut construire des fonctions propres généralisées de $H+vP_1$, comme des solutions de l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$\Phi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot) = \Psi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot) - (H_0 + vP_1 - \lambda - i0_+)^{-1} H^T \Phi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot)\ . \tag{3.29}$$

Ces fonctions propres généralisées ont des propriétés d'entrelacement entre les sous espaces absolument continus des opérateurs $H_0 + vP_1$ et $H + vP_1$ qui seront très utiles pour la suite :

$$\Phi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot) = \Omega_+^{(v)} \Psi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot)\ , \tag{3.30}$$

$$\Psi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot) = \{\Omega_+^{(v)}\}^* \Phi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot)\ . \tag{3.31}$$

L'opérateur de diffusion $S^{(v)} : \mathcal{H}^{ac}(H_0 + vP_1) \mapsto \mathcal{H}^{ac}(H_0 + vP_1)$ est une carte unitaire qui agit sur $\mathcal{H}^{\rm ac}(H_0 + vP_1) = \mathcal{H}^{\rm ac}(H_0) = \bigoplus_{\alpha=1}^2 l^2(\mathbb{N}_\alpha)$, et il est donné par $S^{(v)} = \{\Omega_-^{(v)}\}^* \Omega_+^{(v)}$. Ainsi, l'opérateur de transition correspondant est défini par $2\pi i T^{(v)} := \mathbb{I} - S^{(v)}$. Dans la représentation spectrale de $H^L + vP_1$ sur $\int^{\oplus}_{[-2t_L,2t_L]} \mathbb{C}^2 d\lambda$, l'opérateur T est une matrice 2×2 dépendant de λ dont les éléments sont notés $t_{\alpha\beta}^{(v)}(\lambda)$. En utilisant (3.23) on obtient la représentation :

$$\sum_{\beta=1,2} t_{\alpha\beta}^{(v)}(\lambda)\Xi_\beta(\lambda) = \frac{1}{2\pi i}[F(\mathbb{I} - S^{(v)})F^*\Xi]_\alpha(\lambda)\ . \tag{3.32}$$

Ainsi, en utilisant les fonctions propres généralisées, on peut exprimer les éléments de la matrice T comme suit

$$t_{\alpha\beta}^{(v)}(\lambda) := \langle \Psi_\alpha^{(v)}(\lambda; \cdot), H^T \Phi_\beta^{(v)}(\lambda; \cdot)\rangle. \tag{3.33}$$

Puisque S est unitaire, on a grâce au théorème optique la relation $i(T - T^*) = 2\pi T^*T = 2\pi TT^*$, ceci implique :

$$\Im\{t_{22}^{(v)}(\lambda)\} = \pi\left(|t_{22}^{(v)}(\lambda)|^2 + |t_{12}^{(v)}(\lambda)|^2\right), \tag{3.34}$$

$$|t_{21}^{(v)}(\lambda)|^2 = |t_{12}^{(v)}(\lambda)|^2. \tag{3.35}$$

La transmittance $\mathcal{T}^{(v)}_{\alpha\beta}(\lambda)$ entre les fils α et β pour une énergie donnée λ est définie comme

$$\mathcal{T}^{(v)}_{\alpha\beta}(\lambda) := |t^{(v)}_{\alpha\beta}(\lambda)|^2 \,. \tag{3.36}$$

On soulignera que d'après les définitions (3.25), (3.26) et (3.33) la transmittance $\mathcal{T}^{(v)}_{12}(\lambda) = 0$ si $\lambda \notin [-2t_L + v, 2t_L + v] \cap [-2t_L, 2t_L]$.

3.4.2 Preuve de (i)

En utilisant (3.6) et (3.7) l'opérateur d'évolution $U(t)$ obéit pour $t > t_1$ à l'équation :

$$U(t) = e^{-i(t-t_1)(H+vP_1)}U(t_1) \,. \tag{3.37}$$

Ainsi, comme $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{pp}(H + vP_1) \oplus \mathcal{H}^{ac}(H + vP_1)$ et par (3.8), on obtient pour le courant (2.48) mesuré au site n la représentation

$$\begin{aligned} I(t,n) &= \mathrm{Tr}\{e^{-i(t-t_1)(H+vP_1)}U(t_1)f_\mu(H)U^*(t_1)e^{i(t-t_1)(H+vP_1)}j_n\} \\ &= \mathrm{Tr}\{e^{-i(t-t_1)(H+vP_1)}U(t_1)f_\mu(H)U^*(t_1)e^{i(t-t_1)(H+vP_1)}E_{\mathrm{pp}}(H+vP_1)j_n\} \\ &+ \mathrm{Tr}\{e^{-i(t-t_1)(H+vP_1)}U(t_1)f_\mu(H)U^*(t_1)e^{i(t-t_1)(H+vP_1)}E_{\mathrm{ac}}(H+vP_1)j_n\} \\ &=: I_{\mathrm{pp}}(t,n) + I_{\mathrm{ac}}(t,n) \,, \end{aligned} \tag{3.38}$$

où $E_{\mathrm{pp}}(H + vP_1)$ est la projection sur le spectre purement ponctuel $\mathcal{H}^{pp}(H + vP_1)$. En vertu de (3.12) on a l'identité

$$\begin{aligned} &e^{i(t-t_1)(H+vP_1)}E_{\mathrm{pp}}(H+vP_1)j_n e^{-i(t-t_1)(H+vP_1)} \\ &= \frac{d}{dt}\left\{E_{\mathrm{pp}}(H+vP_1)e^{i(t-t_1)(H+vP_1)}P_2^{(n)}e^{-i(t-t_1)(H+vP_1)}\right\}. \end{aligned} \tag{3.39}$$

On suppose à présent que $H+vP_1$ a un nombre fini de valeurs propres. Cela signifie que $E_{\mathrm{pp}}(H+vP_1)$ est à trace. Si $T > t_1$ la partie purement ponctuelle de (3.38) devient :

$$\begin{aligned} \int_0^T I_{\mathrm{pp}}(t,n)dt = \int_0^{t_1} I_{\mathrm{pp}}(t,n)dt + \int_{t_1}^T I_{\mathrm{pp}}(t,n)dt = \int_0^{t_1} I_{\mathrm{pp}}(t,n)dt \\ + \mathrm{Tr}\left\{U(t_1)f(H)U^*(t_1)\,D(T)\,E_{\mathrm{pp}}(H+vP_1)\right\} \,, \end{aligned} \tag{3.40}$$

où l'opérateur $D(T) := e^{i(T-t_1)(H+vP_1)}P_2^{(n)}e^{-i(T-t_1)(H+vP_1)} - P_2^{(n)}$ est uniformément borné en T. Puisque la première intégrale du membre de droite de (3.40) est finie, le spectre purement ponctuel ne contribue pas dans la limite ergodique (3.13). Dans le cas où $E_{\mathrm{pp}}(H + vP_1)$ n'est pas de rang fini, on doit utiliser un argument en $\varepsilon/2$ basé sur le fait que $E_{\mathrm{pp}}(H + vP_1)j_n$ peut être arbitrairement correctement approximé dans la norme trace par un opérateur comprenant la projection sur un nombre de valeurs propres de $H + vP_1$ suffisamment grand (mais fini). Cette approximation sera indépendante de T, et l'on pourra ainsi utiliser l'argument précédent.

Il suffit donc d'étudier $I_{\mathrm{ac}}(t,n)$ et de montrer qu'il converge bien lorsque $t \to \infty$. Dans ce but, on commence par énoncer trois lemmes techniques utiles :

Lemme 3.4.1. *Les operateurs* $U(t_1) - e^{-iH_0t_1 - ivP_1\int_0^{t_1}\phi(\tau)d\tau}$ *et* $U^*(t_1) - e^{iH_0t_1 + ivP_1\int_0^{t_1}\phi(\tau)d\tau}$ *sont compacts.*

Preuve. Puisque l'équation de type Dyson :

$$\frac{d}{dt}\left\{e^{iH_0t+ivP_1\int_0^t\phi(t)dt}U(t)\right\} = -ie^{iH_0t+ivP_1\int_0^t\phi(\tau)d\tau}H^TU(t),$$

est equivalente à

$$U(t_1) = e^{-iH_0t_1-ivP_1\int_0^{t_1}\phi(\tau)d\tau} - i\int_0^{t_1} e^{-iH_0(t_1-t)-ivP_1\int_t^{t_1}\phi(\tau)d\tau}H^TU(t)dt\ ,$$

on utilise le fait que H^T est un opérateur compact (de rang fini) pour finir la preuve. ∎

Lemme 3.4.2. *L'opérateur $U(t_1)f_\mu(H)U^*(t_1) - f_\mu(H_0)$ est compact.*

Preuve. C'est une conséquence du lemme 3.4.1, du fait que H_0 commute avec P_1, et de l'observation suivante : la différence $f_\mu(H) - f_\mu(H_0)$ est un opérateur compact (et même à trace). ∎

Lemme 3.4.3. *Soit K un opérateur compact. Alors, la norme trace suivante converge vers zéro :*

$$\lim_{t\to\infty} ||Ke^{i(t-t_1)(H+vP_1)}E_{\rm ac}(H+vP_1)j_n||_1 = 0. \tag{3.41}$$

Preuve. Comme j_n appartient aux opérateurs à trace (de rang fini dans le cas présent), par des arguments standards en $\varepsilon/2$ on peut supposer que K est de rang fini. Ainsi, la preuve est la conséquence du lemme de Riemann-Lebesgue.

Corollaire 3.4.4. *Soit l'identité $U(t_1)f_\mu(H)U^*(t_1) = (U(t_1)f_\mu(H)U^*(t_1) - f_\mu(H_0)) + f_\mu(H_0)$ dans la représentation engendrée par $I_{\rm ac}(t,n)$. Alors les lemmes 3.4.2 et 3.4.3 impliquent la limite :*

$$\lim_{t\to\infty} |I_{\rm ac}(t,n) - {\rm Tr}\{e^{-i(t-t_1)(H+vP_1)}f_\mu(H_0)e^{i(t-t_1)(H+vP_1)}E_{\rm ac}(H+vP_1)j_n\}| = 0. \tag{3.42}$$

A présent, on démontre la limite ergodique (3.13). Il suffit de vérifier que la trace dans (3.42) converge lorsque $t\to\infty$. Pour cela, on utilise une astuce standard qui consiste à insérer l'évolution libre et d'utiliser l'identité

$$f(H_0) = e^{i(t-t_1)(H_0+vP_1)}f_\mu(H_0)e^{-i(t-t_1)(H_0+vP_1)}$$

dans (3.42). En utilisant (3.18) ainsi que le fait que les opérateurs d'onde sont unitaires et complets, on obtient l'existence de la limite forte suivante :

$$\{\Omega_+^{(v)}\}^*E_{\rm ac}(H+vP_1) = s - \lim_{t\to\infty} e^{-i(t-t_1)(H_0+vP_1)}e^{i(t-t_1)(H+vP_1)}E_{\rm ac}(H+vP_1),$$

où l'opérateur limite projette dans $\mathcal{H}^{\rm ac}(H_0)$. Finalement, puisque j_n est à trace, on peut conclure que la limite

$$\lim_{t\to\infty} I_{\rm ac}(t,n) = {\rm Tr}\left\{\Omega_+^{(v)}f_\mu(H^L)\{\Omega_+^{(v)}\}^*E_{\rm ac}(H+vP_1)j_n\right\}\ , \tag{3.43}$$

existe et est finie.

Remarque 3.4.5. *Dans* (3.43) *on peut remplacer* $f_\mu(H_0) = f_\mu(H^S) \oplus f_\mu(H^L)$ *par* $f_\mu(H^L)$ *car l'espace intérieur de l'échantillon est projeté à l'extérieur par l'opérateur d'onde* $\{\Omega_+^{(v)}\}^*$ *de droite.*

Pour le moment, on a démontré que la limite ergodique (3.13) ne dépend ni de ϕ, ni de t_1. L'indépendance en n découle du lemme suivant :

Lemme 3.4.6. *Pour tout* $n \geq 1$ *on peut établir l'équation de continuité suivante :*

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\left\{\Omega_+^{(v)} f_\mu(H^L)\{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\mathrm{ac}}(H+vP_1) j_n\right\} &= \mathrm{Tr}\left\{\Omega_+^{(v)} f_\mu(H^L)\{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\mathrm{ac}}(H+vP_1) j_0\right\} \\ &=: I_\infty. \end{aligned} \tag{3.44}$$

Preuve. On note $\chi_n := P_2 - P_2^{(n)}$ la projection sur les n premiers sites du second fil. Alors, (2.48) et la remarque 3.2.2 donne $j_0 - j_n = i[H + vP_1, \chi_n]$. Ainsi, l'identité (3.44) est équivalente à

$$\mathrm{Tr}\left\{\Omega_+^{(v)} f_\mu(H^L)\{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\mathrm{ac}}(H+vP_1)[H+vP_1, \chi_n]\right\} = 0.$$

Cependant, l'opérateur χ_n est un opérateur à trace, on peut donc développer le commutateur. Les opérateurs d'onde entrelacent $H + vP_1$ et $H_0 + vP_1$, et $H_0 + vP_1$ commute avec H^L. Il suit que $H + vP_1$ commute avec $\Omega_+^{(v)} f_\mu(H^L)\{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\mathrm{ac}}(H+vP_1)$. On achève alors la preuve en utilisant la cyclicité de la trace. ∎

3.4.3 Preuve de (ii)

Tout d'abord, on fait quelques commentaires. En effet, ce point traduit l'existence de la notion de propagation du courant le long du fil 2. On considère un observateur qui mesure le courant à un site n. On se place à un temps t fixé, et on pousse n vers l'infini. On observe alors que le courant dans cette limite est nul. Cela signifie que l'augmentation du flux de particule n'a pas encore atteint le point n où se situe l'observateur voir figure 3.2. Ce résultat permet également de justifier la définition du courant de particules comme l'évolution temporelle de la charge à un site n. C'est-à-dire de donner un sens à la formule de conservation de la charge :

$$\partial_t \rho(t) + \vec{\nabla}.\vec{j} = 0$$

Cela signifie qu'un flux de particules constant au cours du temps ne signifie pas que le courant associé est nul. Une simple analogie avec le débit d'un fleuve et le courant d'eau associé permet d'imager ce fait. Une quantité d'eau qui n'augmente pas au cours du temps au point n ne veut pas dire que le courant est nul en ce point.

On commence par prouver que le courant au temps $t = 0$, c'est-à-dire, à l'équilibre, est nul pour tous les sites n. En effet, d'après (3.9) et (3.12) on a $I(0,n) = \mathrm{Tr}(f_\mu(H) j_n) = i\mathrm{Tr}(f_\mu(H)[H, P_2^{(n)}])$ pour tout $n \geq 0$. Si l'on fixe n et que l'on note H_N la restriction de Dirichlet de l'opérateur H aux fils finis et de longueur $N < \infty$, où $n < N$. On note $P_2^{(n),N}$ la projection de rang fini correspondant à la restriction de $P_2^{(n)}$ au second fil borné. Alors, on démontre un certain résultat en "limite thermodynamique" (voir [21]) :

$$I(0,n) = \lim_{N\to\infty} \mathrm{Tr}\left\{f_\mu(H_N) i[H_N, P_2^{(n),N}]\right\}. \tag{3.45}$$

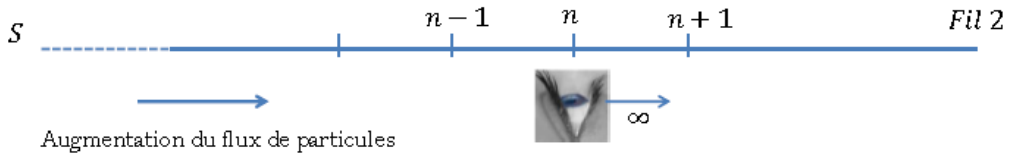


FIGURE 3.2: Mise en évidence de la notion de vitesse de propagation du courant.

Pour comprendre pourquoi (3.45) est vraie, il faut remarquer que $j_n = i[H_N, P_2^{(n),N}] = i[H, P_2^{(n)}]$ est un opérateur de rang fini indépendant de N. De plus, $f_\mu(H)$ et $f_\mu(H_N)$ ne diffèrent l'un par rapport à l'autre de manière significative que très loin du support de j_n. Les détails peuvent être trouvés dans [21] : Cependant $\mathrm{Tr}\left\{f_\mu(H_N) i[H_N, P_2^{(n),N}]\right\} = 0$ pour tout N grâce à la cyclicité de la trace. Ainsi (3.45) démontre que $I(0,n) = 0$ pour tout $n \geq 0$.

L'étape suivante de la preuve consiste en la démonstration pour tout $n \geq 0$ que l'on a

$$\lim_{n\to\infty} |I(t,n) - I(0,n)| = 0\,. \tag{3.46}$$

Alors, en utilisant que $I(0,n) = 0$ pour tout n, la limite dans (3.46) implique (3.45). Tout d'abord, on récrit la différence dans (3.45) comme :

$$I(t,n) - I(0,n) = \mathrm{Tr}\{U(t) f_\mu(H)[U^*(t) - e^{itH}] j_n\} + \mathrm{Tr}\{[U(t) - e^{-itH}] f_\mu(H) e^{itH} j_n\}. \tag{3.47}$$

Ensuite, on exprime le propagateur $U(t)$ (3.7) à l'aide des séries de Dyson ordonnées dans le temps :

$$U(t) = e^{-itH} \tag{3.48}$$
$$+ e^{-itH} \sum_{k\geq 1} \frac{(-i)^k v^k}{k!} \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 ... \int_0^t d\tau_k \mathbb{T}\{\phi(\tau_1) e^{i\tau_1 H} P_1 e^{-i\tau_1 H} ... \phi(\tau_k) e^{i\tau_k H} P_1 e^{-i\tau_k H}\}$$

dont l'adjoint est donné par :

$$U^*(t) = e^{itH} \tag{3.49}$$
$$+ \sum_{k\geq 1} \frac{i^k v^k}{k!} \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 ... \int_0^t d\tau_k \widetilde{\mathbb{T}}\{\phi(\tau_1) e^{i\tau_1 H} P_1 e^{-i\tau_1 H} ... \phi(\tau_k) e^{i\tau_k H} P_1 e^{-i\tau_k H}\} e^{itH} \ ,$$

où $\mathbb{T}$ désigne l'ordre décroissant dans le temps et $\widetilde{\mathbb{T}}$ d'signe l'ordre décroissant. On remarque que grâce au fait que la perturbation $v\phi(t)P_1$ est un opérateur borné, les séries de Dyson (3.48) et (3.49) convergent uniformément en norme d'opérateur.

Puisque dans la formule (3.47) le premier terme du membre de droite contient l'opérateur $[U^*(t) - e^{itH}]j_n$, on veut démontrer que sa norme trace converge vers zéro avec n. En utilisant une propriété de support (3.10) on a $P_2^{(n-1)} j_n = j_n$ et puisque j_n est de rang fini, il est suffisant de démontrer que $[U^*(t) - e^{itH}]P_2^{(n-1)}$ converge vers zéro avec n dans la norme d'opérateur. Pour cela on a besoin d'une estimation technique donnée par le lemme suivant :

Lemme 3.4.7. *Pour tout $t \geq 0$ fixé, on a :*

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{|\tau|\leq t} \left\| P_1 e^{i\tau H} P_2^{(n-1)} \right\| = 0. \tag{3.50}$$

Preuve. Puisque l'opérateur H est borné, pour tout $\epsilon > 0$ il existe N_ϵ tel que

$$\sup_{|\tau|\leq t} \left\| e^{i\tau H} - \sum_{k=0}^{N_\epsilon} \frac{i^k \tau^k H^k}{k!} \right\| \leq \epsilon. \tag{3.51}$$

Les propriétés de support (remarque 3.2.2) et le terme de saut dans l'Hamiltonien H^L implique que $P_1 H^k P_2^{(n-1)} = 0$ si $n > N_\epsilon \geq k$. Ainsi grâce à (3.51) on obtient pour $n > N_\epsilon$

$$\sup_{|\tau|\leq t} \left\| P_1 e^{i\tau H} P_2^{(n-1)} \right\| \leq \epsilon \ , \tag{3.52}$$

ce qui prouve le lemme. ∎

3.4.4 Preuve de (iii)

En vertu de (3.43) et (3.44) on a $\lim_{t\to\infty} I_{\rm ac}(t,n) = I_\infty$. Il ne reste donc plus qu'à estimer le courant $I_{\rm pp}(t,n)$. Grâce à (3.38), il vient :

$$\sup_{t\geq 0} |I_{\rm pp}(t,n)| \leq ||E_{\rm pp}(H + vP_1) j_n||_1 \ .$$

On remarque que le membre de droite de cette estimation peut être rendu arbitrairement petit enn augmentant la valeur de n. En effet, on a supposé qu'il y avait une infinité de fonctions propres localisées près de l'échantillon S, ainsi,

$$\lim_{n\to\infty} ||E_{\rm pp}(H+vP_1)P_2^{(n-1)}|| = 0.$$

Cette remarque permet de finir la preuve du point (iii). Dans le cas exceptionnel où $H+vP_1$ pourrait avoir une infinité de valeur propre, l'argument présenté ici n'est plus valable.

Remarque 3.4.8. *On considère ici la mesure du flux de particules à un site n donné, et pendant un temps t infiniment long. On observe alors que si l'on attend assez longtemps, le courant se stabilise autour d'une valeur qui est en l'occurrence la moyenne temporelle I_∞. Les effets des oscillations diminuent de plus en plus au fur et à mesure que le temps s'écoule.*

3.4.5 Preuve de (iv)

Afin de calculer le courant de charge stationnaire (3.16) on utilise la formule principale (3.44) sous la forme :

$$I_\infty = \mathrm{Tr}\left\{\Omega_+^{(v)} f_\mu(H^L)\{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\rm ac}(H+vP_1)j_0\right\} = \mathrm{Tr}\left\{f_\mu(H^L)\{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\rm ac}(H+vP_1)j_0\Omega_+^{(v)}\right\}\,.$$

A présent, en considérant la représentation spectrale de H^L+vP_1 on peut évaluer la *trace* sur $l^2(\mathbb{N}_1)\oplus l^2(\mathbb{N}_2)$ via les fonctions propres généralisées (voir (3.25) et (3.26) On obtient ainsi la représentation :

$$\begin{aligned} I_\infty &= \int_{-2t_L+v}^{2t_L+v} d\lambda\, f_\mu(\lambda-v)\left\langle \Psi_1^{(v)}(\lambda;\cdot), \{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\rm ac}(H+vP_1)j_0\Omega_+^{(v)}\Psi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\right\rangle \\ &\quad + \int_{-2t_L}^{2t_L} d\lambda\, f_\mu(\lambda)\left\langle \Psi_2^{(v)}(\lambda;\cdot), \{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\rm ac}(H+vP_1)j_0\Omega_+^{(v)}\Psi_2^{(v)}(\lambda;\cdot)\right\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.53}$$

Grâce à (3.30), il vient pour le produit scalaire de la première intégrale :

$$\begin{aligned} &i\left\langle \Psi_1^{(v)}(\lambda;\cdot), \{\Omega_+^{(v)}\}^*[H^T,P_2]\Omega_+^{(v)}\Psi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\right\rangle = 2\Im\left\langle \Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot), P_2H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\right\rangle \\ &= 2\Im\left\langle P_2\{\Psi_1^{(v)}(\lambda;\cdot) - (H_0+vP_1-\lambda-i0_+)^{-1}H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\}, H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\right\rangle\,, \end{aligned} \tag{3.54}$$

où, dans la deuxième ligne, on a utilisé l'équation de Lippmann-Schwinger (3.29). On remarquera que le vecteur $P_2(H_0+vP_1-\lambda-i0_+)^{-1}H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\in l^2(\mathbb{N}_2)$ pour presque tous les λ. En vertu de la remarque 3.2.2 on a : $[H_0,P_2]=0$ et $P_2P_1=0$, ce qui implique $P_2(H_0+vP_1-\lambda-i0_+)^{-1}H^T = P_2(H_0-\lambda-i0_+)^{-1}H^T$. Ceci étant dit et en prenant en compte l'identité : $P_2\Psi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)=0$, on utilise la représentation spectrale de H_0 ainsi que la décomposition du vecteur $P_2(H_0-\lambda-i0_+)^{-1}H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)$ sur les vecteurs propres généralisés $\{\Psi_2^{(v)}(\lambda';\cdot)\}_{\lambda'\in[-2t_L,2t_L]}$, il vient alors :

$$\begin{aligned} &2\Im\left\langle P_2\{\Psi_1^{(v)}(\lambda;\cdot) - (H_0+vP_1-\lambda-i0_+)^{-1}H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\}, H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\right\rangle = \\ &= -2\Im\int_{-2t_L}^{2t_L} d\lambda' \frac{1}{\lambda'-\lambda-i0_+}\left|\left\langle \Psi_2^{(v)}(\lambda';\cdot)H^T\Phi_1^{(v)}(\lambda;\cdot)\right\rangle\right|^2 \\ &= -2\pi\mathcal{T}_{21}^{(v)}(\lambda)\,\chi_{[-2t_L,2t_L]}(\lambda)\,. \end{aligned} \tag{3.55}$$

Pour obtenir la dernière égalité, on a utilisé la formule de Sokhotskii-Plemelj formula, ainsi que les définitions (3.33), et (3.36).

Un raisonnement analogue permet d'obtenir pour le deuxième intégrant dans (3.53) :

$$\begin{aligned}
&\Big\langle \Psi_2^{(v)}(\lambda;\cdot), \{\Omega_+^{(v)}\}^* E_{\rm ac}(H+vP_1) j_0 \Omega_+^{(v)} \Psi_2^{(v)}(\lambda;\cdot) \Big\rangle = 2\Im \Big\langle \Phi_2^{(v)}(\lambda;\cdot), P_2 H^T \Phi_2^{(v)}(\lambda;\cdot) \Big\rangle \\
&= 2\Im \Big\langle P_2\{\Psi_2^{(v)}(\lambda;\cdot) - (H_0+vP_1-\lambda-i0_+)^{-1} H^T \Phi_2^{(v)}(\lambda;\cdot)\}, H^T \Phi_2^{(v)}(\lambda;\cdot) \Big\rangle \\
&= 2\Im\{t_{22}^{(v)}(\lambda)\} - 2\Im \Big\langle P_2 (H_0-\lambda-i0_+)^{-1} H^T \Phi_2^{(v)}(\lambda;\cdot), H^T \Phi_2^{(v)}(\lambda;\cdot) \Big\rangle \\
&= 2\Im\{t_{22}^{(v)}(\lambda)\} - 2\pi |t_{22}^{(v)}(\lambda)|^2 = 2\pi \mathcal{T}_{12}^{(v)}(\lambda) \,, \qquad (3.56)
\end{aligned}$$

où, afin d'obtenir la dernière ligne, on a utilisé (3.33) et (3.34). On remarquera qu'ici $\lambda \in [-2t_L, 2t_L]$. En prenant en compte la symétrie (3.35) et en substituant (3.55), (3.56) dans (3.53), on obtient (3.16). (3.16).

On rappelle que $\mathcal{T}_{12}^{(v)}(\lambda) = 0$, si $\lambda \notin [-2t_L, 2t_L] \cap [-2t_L + v, 2t_L + v]$. ∎

Remarque 3.4.9. *On remarque que pour $v > 0$ le courant $I_\infty(v)$ (3.16) est négatif. Vue que transmittance (3.36) soit positive, ceci provient du signe de la différence $f_\mu(\lambda) - f_\mu(\lambda - v)$ qui est par définition (3.5) négative pour v positif. Ceci s'explique à l'aide de la modification (3.6) du potentiel électrochimique : $\mu \mapsto \mu_v := \mu - v$ par potentiel électrique v sur le fil 1 (gauche) .*

Pour la démonstration on note qu'en vertu des arguments de Ch.2.1.2 des fermions se propagent du réservoir qui possède le potentiel électrochimique $\mu_+ = \mu_1$ le plus élevé vers le réservoir dont le potentiel électrochimique $\mu_- = \mu_2$ est le plus bas. Pour le cas présenté ici (3.6) et pour $v > 0$ l'énergie des fermions dans le fil 1 est $\lambda' \in [-2t_L + v, 2t_L + v]$, tandis qu'elle est $\lambda \in [-2t_L, 2t_L]$ dans le fil 2. Alors $\lambda'(v) := \lambda + v$ et la distribution des fermions dans le fil 1 est

$$f_\mu(\lambda'(v)) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\lambda+v-\mu)}} = f_{\mu-v}(\lambda) \,.$$

Dans le même temps la distribution des fermions dans le fil 2 est égale à

$$f_\mu(\lambda) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\lambda-\mu)}} \,.$$

C'est-à-dire, pour $v > 0$ le potentiel électrochimique $\mu_1 = \mu - v < \mu$ est plus bas dans le fil 1 que dans le fil 2, ce qui provoque un mouvement de particule du fil 2 vers le fil 1 (de la droite vers la gauche) et donc un courant négatif.

Remarque 3.4.10. *Dans la formulation de* (3.16) *on observe que la valeur du courant est la résultante de la compétition entre la différence des fonctions de Fermi-Dirac qui augmente lorsque la valeur du potentiel chimique ajouté sur le fil 1 et l'intervalle des paramètres spectraux permis, voir la figure 3.3.*

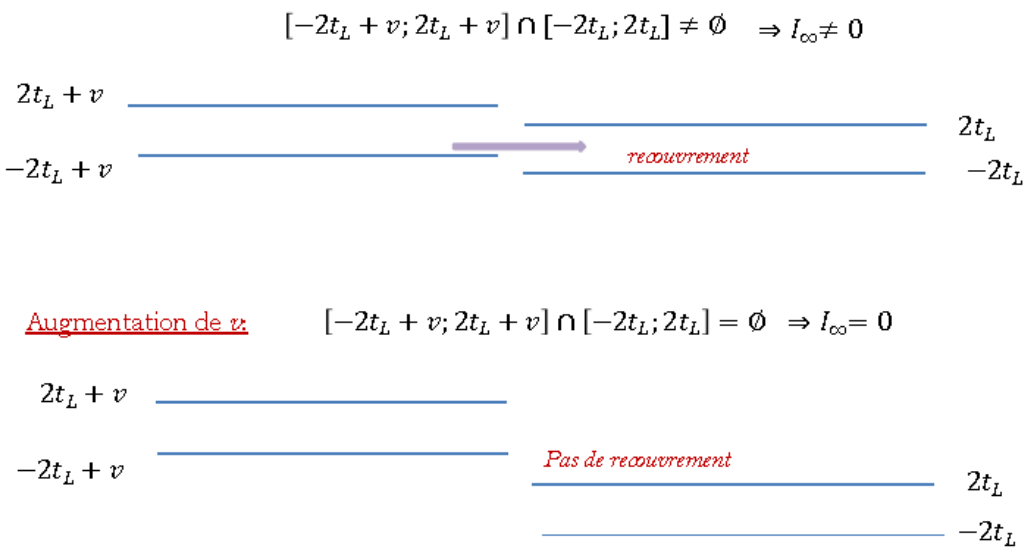


FIGURE 3.3: Les effets quantiques sont visibles directement sur la formule de Landauer Büttiker.

Chapitre 4

Le courant circulant dans un graphe

Dans cette section, on établit la formule du courant circulant dans un graphe. On reprend la définition d'un graphe Γ donnée dans [28]. En effet, on définit un graphe à l'aide d'une famille de branches, de vertex et par la donnée d'une condition au vertex (ou condition de couplage). Les branches que l'on note $e_i, i = 1, 2, 3...n$ sont des segments de longueur finie ou semi-infinie connectés les uns aux autres en des points donnés. Ces points sont appelés les vertex. L'espace des configurations engendré par les branches permet de traiter le graphe comme un système de mécanique quantique dont l'espace de Hilbert est donné par la somme directe $\mathcal{H} = \bigoplus_{i=1}^{n} L^2(e_i)$. Les fonctions propres de l'Hamiltonien H_Γ du système s'écrivent comme des vecteurs colonnes $\Phi = (\varphi_1, \varphi_2, ...\varphi_n)^T$, où $\varphi_j \in L^2(e_j)$.

On considère le cas du graphe trivial, c'est-à-dire que Γ est constitué de deux branches de longueur semi-infinie connectées en un unique vertex situé à l'origine des coordonnées. Dans ce cas, l'espace de Hilbert est $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}_-) \oplus L^2(\mathbb{R}_+)$. L'Hamiltonien du système agit comme suit

$$(H_\Gamma \varphi) = -\varphi'' + V^s \varphi''$$

où V^s est un potentiel localisé en 0. Dans une première partie, on donne les propriétés de la matrice de diffusion S et la matrice de transition T. Dans la partie 4.1.2 on réexprime T à l'aide de la formule de Krein. Cette expression est une clé pour l'application de la formule de courant à des modèles et les calculs analytiques. En effet, dans les chapitres suivants, on étudie en détail les propriétés de la formule de Krein, on l'applique aux cas des guides d'onde quantiques. Dans la partie 4.2 on applique la formule de Krein au calcul de la matrice T pour le modèle que l'on appelle le "modèle delta". Il s'agit d'un graphe trivial, le couplage entre les deux branches se fait par une interaction "delta" avec une constante de couplage notée g que l'on définira en 4.11.

4.1 Matrice de diffusion et transmittance

Tout d'abord, voici quelques mots sur l'importance de la **théorie de la diffusion** dans la compréhension du monde qui nous entoure. Lorsque l'on évoque la théorie de la diffusion en physique, on pense en premier lieu à deux systèmes isolés au temps initial, avec une certaine trajectoire initiale, et qui vont entrer en collision à un certain moment, pendant un temps donné, pour ensuite retrouver leur isolation dans un état final a priori différent de l'état initial. Leur trajectoire, leurs propriétés et peut être leur structure auront pu être affectés par leur rencontre. L'étude de cette

rencontre est une très belle illustration des lois de conservations dans la nature. En physique nucléaire par exemple, les résultats d'expérience sont en général toujours des données de diffusion, on cite par exemple les expériences de collision de faisceaux de protons et d'électrons au LHC. Les multiples détecteurs permettent de réunir toutes les données de diffusion : le détecteur ATLAS (A Toroïdal LHC ApparatuS) recherche la présence du boson de Higgs et de particules supersymétriques. Pour cela, il mesure la trajectoire des muons produits lors des collisions ainsi que la quantité de mouvement portée par chaque muon. Le détecteur TOTEM (TOTal Elastic and diffractive cross section Measurement) quant à lui, mesure la section efficace des protons, et ALICE (A Large Ion Collider Experiment) étudie les collisions d'ions plomb afin de recréer en laboratoire les conditions qui régnaient après le big bang. On utilise plus communément la théorie de la diffusion dans les radars ou les sonars (étude de la transmission/ réflection des ondes émises), mais aussi en tomographie par émission de positrons (TEP) qui étudie les émissions de positrons issus de la désintégration d'un produit radioactif.

A travers ces quelques exemples, on se rend compte de la **diversité** des champs d'applications de la théorie de la diffusion : démonstrations et illustrations de théorie physique d'un côté, et utilisation "industrielle" de l'autre, dans les domaines comme l'imagerie médicale, l'énergie, la défense, aéronautique, spatial, ...

Un autre point que l'on peut souligner, c'est qu'à travers toutes ces expériences, on a vu naître une **collaboration** exceptionnelle entre les laboratoires d'une part, mais aussi les gouvernements de l'autre, du monde entier. Encore aujourd'hui, et dans le futur certainement, des projets de construction d'appareils étudiant l'interaction de systèmes et utilisant la théorie de la diffusion, réunissent ingénieurs et chercheurs de tous horizons : ITER à Cadarache (Chine, Japon, Inde, États-Unis, Europe, Corée, Russie), ANTARES à La Seyne-sur-Mer (Maroc, France, Russie, Espagne, Pays-Bas, Italie, Allemagne, Roumanie), LISA (collaboration NASA/ESA)...

D'un point de vue mathématique et physique théorique, la théorie de la diffusion consiste en l'étude de l'interaction entre eux d'un certain nombre de systèmes sur une échelle de temps ou de distance grande par rapport à celle de l'interaction elle-même. On la retrouve en physique nucléaire, en matière condensée, et en physique des hautes énergies notamment. La littérature physique est dense à ce sujet, cependant, à cause d'un manque évident de communication avec les mathématiciens, le développement des outils mathématiques nécessaires à la compréhension et à l'instauration d'un cadre théorique rigoureux à cette théorie se fait beaucoup plus lentement.

En outre, l'étude de la diffusion d'un système de mécanique classique est un problème beaucoup plus facile que dans le cas de la mécanique quantique. Dans les deux cas, on s'intéresse au caractère complet des opérateurs d'onde construit à partir des propagateurs. De manière formelle, on considère un espace des configurations Σ tel que deux états ρ_i et ρ_f appartiennent à Σ. Soient deux sous-espaces de Σ notés Σ_i et Σ_f. On suppose que pour tout élément $\rho_i \in \Sigma_i \subset \sigma$ il existe un unique état $\rho_f \in \Sigma_f \subset \Sigma$. Alors ρ_f consiste en l'ensemble d'"états finaux" issus de la diffusion d'un ρ_i.

En d'autres termes, au temps initial loin dans le passé, on suppose que l'espace des configurations initiales qui est l'ensemble des états initiaux est noté Σ_i. En mécanique classique, les espaces des configurations $\Sigma_{i,f}$ sont des points dans l' espace des phases alors qu'en mécanique quantique, ce sont des vecteurs de l'espace de Hilbert. On définit un ensemble de deux systèmes dynamiques $\{T_i, T_f\}$ où T_i et T_f correspondent aux systèmes initial et final respectivement. Si l'on arrive à démontrer l'existence d'une interaction permettant de relier T_i et T_f aux temps $t = -\infty$ et $t = +\infty$ alors on démontre l'existence d'un bijection naturelle de Σ dans Σ.

4.1.1 Matrice de transition T et matrice de diffusion S

On utilise la définition donnée dans [60]. On appelle S la matrice de diffusion ou matrice S, et on note $\Xi_0^{\pm}(H_V^D, H_V)$ les opérateurs d'onde tels que

$$\Xi_0^{\pm}(H_V^D, H_V) = s - \lim_{s\to\mp\infty} e^{is(H+V)}e^{-is(H^D+V)}P_{ac}(H^D+V)$$

alors S est donnée par

$$S = \Xi_0^{-\star}\Xi_0^{+\star}$$

On peut vérifier (voir [60]) que S est un opérateur unitaire. La matrice de transition ou matrice T, que l'on note T est définie comme

$$T = \frac{1-S}{2\pi}i \tag{4.1}$$

On donne quelques propriétés que l'on tire de [54] :
1) Les opérateurs S et H_V^D, et T et H_V^D commutent

$$\left[S, H_V^D\right] = \left[T, H_V^D\right] = 0 \Rightarrow S = \int_{\sigma(H_V^D)} S(\lambda)d\lambda, \quad T = \int_{\sigma(H_V^D)} T(\lambda)d\lambda \tag{4.2}$$

2)Le théorème optique est

$$T^{\star}(E) - T(E) = -2\pi i T(E)T^{\star}(E) \tag{4.3}$$

3) On appelle T_{ij} les éléments de la matrice T. On a

$$\operatorname{Im} T_{jj}(E) = -\pi \sum_l |T_{jl}(E)|^2 \tag{4.4}$$

Remarque 4.1.1. *Les éléments de la matrice de diffusion S s'expriment de la manière suivante :*

$$S_{ij}(E) = \delta(E-E')\delta(u-v) - 2i\pi\delta(E-E')T_{ij}(E) \tag{4.5}$$

où les $T_{ij}(E)$ désignent les éléments de la matrice de transition.

4.1.2 Les éléments de la matrice de transition

a. Diffusion entre H et H^D

Dans cette section on démontre l'expression des éléments de la matrice de transition ou matrice T. On les note T^{uv}. On définit un opérateur T tel que :

$$T = V - VR_VV \tag{4.6}$$

où $V := H - H^D$ et $R := (H+a)^{-1}$. On veut démontrer le théorème suivant :

Théorème 4.1.2.

$$T^{uv} =< T(E+i\epsilon)\widetilde{\psi}^u_{\sqrt{E-v_u}}, \widetilde{\psi}^v_{\sqrt{E-v_v}} > \tag{4.7}$$

Preuve du théorème 4.1.2 : on se base sur le calcul fait dans [67] (chapitre 8-c et 8-d). On part de l'expression de la matrice S :

$$S = \Xi_0^{-\star}\Xi_0^{+}.$$

On calcule :

$$\begin{aligned} < S\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > &= < \Xi_0^{-\star}\Xi_0^{+}\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \\ &= \lim_{t\to-\infty, t'\to+\infty} < e^{iH^D t}e^{-iHt}e^{iHt'}e^{-iH^D t'}\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \\ &= \lim_{t\to+\infty} < e^{iH^D t}e^{-2iHt}e^{iH^D t'}\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > . \end{aligned}$$

On remarque que l'on a :

$$\frac{d}{dt}e^{iH^D t}e^{-2iHt}e^{iH^D t'} = -i\left(e^{iH^D t}Ve^{-2iHt}e^{iH^D t'} + e^{iH^D t}e^{-2iHt}Ve^{iH^D t'}\right) =: -iY.$$

D'où

$$\begin{aligned} < S\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > &= < \widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > -i\int_0^\infty dt < Y\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \\ &= \delta_{u,v}\delta_{E,E'} - i\lim_{\epsilon\searrow 0}\int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} < Y\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \\ &= \delta_{u,v}\delta_{E,E'} - i\lim_{\epsilon\searrow 0}\int_0^\infty e^{-\epsilon t} < Ve^{i(E'+E-2Ht)} + e^{i(E'+E-2Ht)}V\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \\ &= \delta_{u,v}\delta_{E,E'} + \frac{1}{2}\lim_{\epsilon\searrow 0} < VG(\frac{E+E'+i\epsilon}{2}) + G(\frac{E+E'+i\epsilon}{2})V\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \end{aligned} \tag{4.8}$$

où l'on a utilisé la relation

$$\int_0^\infty d\tau e^{-i(E-i\epsilon-H)\tau}V = -i\frac{1}{E-i\epsilon-H}V = -iG(E-i\epsilon)V.$$

Lemme 4.1.3.

$$VG = TG^D,$$

où T désigne la matrice de transition, G est la fonction de Green associé à l'Hamiltonien du système complet, et G^D est la fonction de Green de l'Hamiltonien du système avec biais de potentiel et avec condition de Dirichlet.

Preuve : on part de $T = V - VRV$. L'équation de la résolvante donne $R = R^D - R^D VR$. D'où

$$R^D T = R^D V - R^D VRV = (R^D - R^D VR)V = RV.$$

On obtient alors

$$R^D T = RV, \quad TR^D = VR \quad \blacksquare$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} < S\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > &= \delta_{u,v}\delta_{E,E'} + \\ &+ \lim_{\epsilon\searrow 0}(\frac{1}{E-E'_v+i\epsilon} + \frac{1}{E'-E+i\epsilon}) < T(\frac{E'+E+i\epsilon}{2})\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \\ &= \delta_{u,v}\delta_{E,E'} - 2i\pi\delta(E-E')\lim_{\epsilon\searrow 0} < T(E'+i\epsilon)\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v >, \end{aligned} \tag{4.9}$$

et on obtient :

$$T^{uv} =< T(E+i\epsilon)\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v > \quad \blacksquare$$

b. Diffusion entre H_V et H_V^D

Soit R_V la résolvante de l'Hamiltonien H_V. Dans cette partie, on considère le cas où $V \equiv R_V - R_V^D = \Delta R$. On définit donc l'opérateur

$$T = \Delta R - \Delta R \left(R_V - R(E) - i0+\right)^{-1} \Delta R =: T(R(E) + i0+)$$

On sait grâce au principe d'invariance (voir [60], théorème XI.11) que l'on a

$$S(H_V, H_V^D) = S(-R_V, -R_V^D)$$

car la fonction $R : x \longmapsto \frac{1}{x+a}$ est admissible. On sait donc que l'on doit avoir

$$\delta(E-E^{'}) < T(E^{'}+i0+)\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v >= \delta(R(E)-R(E')) < T(R(E^{'})+i0+)\widetilde{\psi}_E^u, \widetilde{\psi}_{E'}^v >$$

Comme $\delta(R(E) - R(E')) = \delta\left((E-E')R'(E)\right) = \frac{1}{|R'(E)|}\delta(E-E') = (E+a)^2\delta(E-E')$. Il vient alors

$$T(E^{'}+i0+) = (E+a)^2 T(R(E^{'})+i0+) \Rightarrow T_{nn'}^{\sigma\sigma'}(E) = (E+a)^2 < T(R(E^{'})+i0+)\widetilde{\psi}_E^{\sigma,n}, \widetilde{\psi}_E^{\sigma',n'} > \tag{4.10}$$

4.2 Calcul de la matrice S pour le modèle δ

On cherche dans cette section à calculer de deux manières différentes la matrice S (et donc la matrice T) associé au "modèle delta". On considère un Hamiltonien défini au sens des formes par

$$(H_g\varphi_g, \varphi_g) = ||\nabla\varphi_g||^2 + (g\tau\varphi_g, \tau\varphi_g) \tag{4.11}$$

où g est la force de l'interaction et les opérateurs τ et $\tau^\star$ sont les opérateurs de trace en 0. On s'intéresse donc dans un premier temps au calcul de S par l'utilisation de la formule donnée dans le papier [28] et références citées :

$$S_U(k) = \frac{(k-1)I + (k+1)U}{(k+1)I + (k-1)U} \tag{4.12}$$

ce qui revient finalement à déterminer la matrice U qui sera détaillée dans la partie suivante 4.2.1. La seconde méthode utilisée est basée sur le calcul direct des éléments de la matrice T. On utilise la théorie de la diffusiong entre l'Hamiltonien H_g et l'Hamiltonien de Dirichlet. On décompose T dans la base des fonctions propres généralisées de l'Hamiltonien de Dirichlet et grâce à la formule de Krein et de l'expression

$$T = V - VR(z)V$$

on calcule la matrice de transition.

4.2.1 Méthode utilisée dans [28] et références citées

Le but de cette première partie est de calculer la matrice U donnée dans (4.12). D'après les hypothèses données par [28], cette matrice doit être unitaire. On définit l'opérateur non-négatif dans $L^2(\mathbb{R})$:

$$H_g = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad \mathcal{D}(H_g) = \{\varphi \in H^{2,1}(\mathbb{R} \cup H^{2,2}(\mathbb{R}^\star), \varphi'(0+) + \varphi'(0-) = g\varphi(0) \tag{4.13}$$

On appelle ce couplage un couplage par interaction delta car il est formellement défini dans la littérature physique par l'Hamiltonien $-\Delta + g\delta(x)$.

Remarque 4.2.1. *Le cas $g = 0$ consiste au système dont l'Hamiltonien est $H_0 = -\Delta$ sur $L^2(\mathbb{R})$ de domaine $\mathcal{D}(-\Delta) = H^{2,2}(\mathbb{R})$.*

(1) On définit deux nouvelles matrices 2×2 A et B qui satisfont

$$A = U - I, \quad B = i(U + I) \tag{4.14}$$

Le caractère auto-adjoint de H_g est assuré par les conditions suivantes :

$$\text{rang}(A|B) = 2, \quad (AB^\star)^\star = AB^\star \tag{4.15}$$

où $A|B$ désigne la matrice $2x4$ pour laquelle A et B constitue les première et deuxième colonne respectivement. (2) Le produit CU où C est une matrice régulière, est toujours solution du système (4.14).
(3) On définit

$$\Phi(0) := \begin{pmatrix} \varphi_g(0+) \\ \varphi_g(0-) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Phi'(0) = \begin{pmatrix} \varphi'_{g(0+)} \\ -\varphi'_{g(0-)} \end{pmatrix}$$

où $\varphi_g(x)$ sont les fonctions propres généralisées de H_g.
(4) Le système vérifie

$$\begin{aligned} CA\Phi(0) + CB\Phi'(0) &= 0 \\ \varphi_{g(0+)} &= \varphi_{g(0-)} \\ \varphi'_{g(0+)} - \varphi'_{g(0-)} &= g\varphi_{g(0)}. \end{aligned} \tag{4.16}$$

On résout dans un premier temps le système

$$\begin{aligned} A\Phi(0) + B\Phi'(0) &= 0 \\ \varphi_{g(0+)} &= \varphi_{g(0-)} \\ \varphi'_{g(0+)} - \varphi'_{g(0-)} &= g\varphi_{g(0)}. \end{aligned} \tag{4.17}$$

Il vient

$$A = \begin{pmatrix} -g & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4.18}$$

Ceci nous donne une matrice U qui n'est pas unitaire. On calcule alors la matrice C telle que CU soit unitaire. On sait que l'on doit avoir $CA = U - I$ et $CB = i(U + I)$, Il suit

$$U = I+CA = -(I+CBi) \Rightarrow 2I = -iCB-CA \Rightarrow I = \frac{-1}{2}C(A+iB) \Rightarrow C = -2(A+iB)^{-1}.$$

En utilisant (4.18) on obtient

$$U = \frac{1}{2+ig}\begin{pmatrix} -ig & 2 \\ 2 & -ig \end{pmatrix}.$$

On calcule alors $S(k)$ grâce à (4.12) et on obtient

$$S_U(k) = \begin{pmatrix} k-1-ig & k+1 \\ k+1 & k-1-ig \end{pmatrix}\begin{pmatrix} k+1+ig & k-1 \\ k-1 & k+1+ig \end{pmatrix}^{-1}$$

et on a finalement

$$S_U(k) = \frac{1}{2k+ig}\begin{pmatrix} -ig & 2k \\ 2k & -ig \end{pmatrix} \tag{4.19}$$

où les termes diagonaux désignent les coefficients de transmission que l'on note t_{+-} et t_{-+}, et les termes off-diagonaux sont les coefficients de réflexion noté r_{++} et r_{--}.

4.2.2 Deuxième méthode : matrice de diffusion pour la paire (H_g, H_0) et formule de Krein

On veut calculer la matrice de diffusion S en utilisant la formule (voir [67] par exemple) de la matrice de transition pour une paire d'opérateurs (H_0, H_0+V) :$T = V - VRV$. On veut retrouver le résultat de P.Exner, donné en (4.19). On traîte donc le cas du modèle δ, c'est-à-dire que l'on a un potentiel d'échantillon de la forme $V^s = g\tau^\star\tau$ situé à l'origine, où τ est l'opérateur de traceet $\tau^\star$ sont adjoint, agissant comme suit : $\tau f(x, y) = f(0, y)$. On se place dans le cas unidimensionnel. On exprime $R_g := (H_g - z)^{-1}$, où z appartient à l'ensemble résolvant de H_g, la résolvante de l'Hamiltonien H_g à l'aide de la résolvante de H_0, Hamiltonien de la particule libre. Il vient

$$R_g = R_0 - gR_0\tau^\star(1 + g\tau R_0\tau^\star)^{-1}\tau R_0 = R_0 - gR_0\tau^\star(1 + gK)^{-1}\tau R_0 \tag{4.20}$$

où on rapelle que $K = \tau R_0\tau^\star$. On a :

$$\begin{aligned} T &= V^s - V^s R_g V^s = g\tau^\star\tau - g^2\tau^\star\tau R_g\tau^\star\tau \\ &= g\tau^\star\tau - g^2\tau^\star\tau\left(R_0 - gR_0\tau^\star(1 + gK)^{-1}\tau R_0\right)\tau^\star\tau \\ &= g\tau^\star\tau\left(1 - gK + \frac{g^2K^2}{1+gK}\right) \\ &= \frac{g\tau^\star\tau}{1+gK} \end{aligned} \tag{4.21}$$

On décompose alors T sur la base des fonctions propres renormalisées de H_0, c'est-à-dire sur les $\Psi_0^{\pm}(x) = E^{-1/4}\varphi_0^{\pm}$, et $\varphi_0^{\pm} = (2\pi)^{-1/2}e^{\pm i\sqrt{E}x}$. Ainsi, en appliquant l'opérateur de trace en zéro τ il vient $\tau\varphi_0^{\pm} = (2\pi)^{-1/2}$, et donc $K = i/2k$, avec $k := \sqrt{E}$. Les matrice T et S sont alors :

$$T = \frac{g}{2\pi(2k+ig)}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}, \quad S = \frac{1}{(2k+ig)}\begin{pmatrix}2k & -ig\\ -ig & 2k\end{pmatrix} \tag{4.22}$$

La différence entre ce résultat et le résultat trouvé en (4.19) vient de la définition des coefficients de transmission et de réflexion dans l'expression de la matrice S. En (4.19) les coefficients de transmission sont les éléments off-diagonaux, et les coefficients de réflexion les éléments diagonaux. Ici, c'est l'opposé : en effet, ici, les coefficients de transmission et de réflexion sont respectivement :

$$t_{+-} = t_{-+} = -\frac{ig}{2k+ig}, \quad r_{++} = r_{--} = \frac{2k}{2k+ig} \tag{4.23}$$

Dans l'Annexe 6.3.2, on démontre que l'on peut récrire l'opérateur T en utilisant la formule de Krein, comme suit :

$$\begin{aligned} T(E+i0+) &= (1-\Delta R(R_V - R(E) - i0+)^{-1})\Delta R && (4.24)\\ &= -B^{\star}L_E^{-1}B && (4.25)\\ &= -A^{\star}K_0^E A, \quad K_0^E = \frac{1}{g^{-1}+K_E}, \quad K_E = \tau R_0^E \tau^{\star} && (4.26)\end{aligned}$$

avec $K_E = -L_E^{-1}$.

4.3 Courant et Formule de Landauer Büttiker

4.3.1 Expression du courant dans le cas d'un échantillon de longueur finie

Dans ce modèle, l'échantillon est de longueur $2L \in \mathbb{R}$ et centré en l'origine. L'Hamiltonien du système est $H = -\Delta + V^s$ où V^s désigne un potentiel local situé sur l'échantillon et le biais de potentiel est de la forme $V = v_-\Pi^- + v_+\Pi^+$ où v_+ et v_- sont des constantes et les opérateurs Π_- et Π_+ sont les projecteurs sur les fils $-$ et $+$ respectivement, c'est-à-dire sur les demi-droites $(-\infty, -L]$ et$[+L, +\infty)$ respectivement. Sous ses conditions, on sait que l'opérateur ΔR est de rang 1.

Théorème 4.3.1. *L'expression générale du courant dans le modèle ponctuel est donné par*

$$j_u = 2\pi\int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda\,(f(\lambda - v_{\widehat{u}}) - f(\lambda - v_u))\,|T^{u\widehat{u}}(\lambda)|^2 \tag{4.27}$$

où $\hat{u} = -u$ *et*

$$\beta = \begin{cases} + \textit{si} & v_+ < v_- \\ - \textit{si} & v_+ > v_- \end{cases}, \quad \widehat{\beta} = -\beta \tag{4.28}$$

Preuve. Soit $X = (H_V + a)\Xi_0^+ f(H^D)\Xi_0^{+\star}(H_V + a), \quad a \notin \sigma(H_V)$. On calcule le courant $j_u = -i\mathrm{tr}\,(X[\Delta R, \Pi^u])$ Pour cela, on récrit $X = \Xi_0^+(H_V^D + a)^2 f(H^D)\Xi_0^{+\star}$ et on obtient $j_u = 2\mathrm{tr}\,\mathrm{Im}\,(X\Delta R\Pi^u)$, avec $u = \pm$ On cherche à exprimer X en fonction des fonctions propres de l'Hamiltonien de Dirichlet, et à l'aide de la composante anti-symétrique de la transformation de Fourier définie dans [37] comme suit :

$$u(x) \to \widehat{u}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \sin(kx)u(x)dx$$

On applique ici le théorème 5.15 de [37]. Soit $\widetilde{\varphi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x) = \sigma\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin(\sqrt{\lambda}x)$ la fonction propre généralisée de l'Hamiltonien sans biais avec condition de Dirichlet en 0. On pose

$$\widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x) = (2)^{-1/2}\lambda^{-1/4}\widetilde{\varphi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x) \tag{4.29}$$

De plus, l'opérateur $(H_V^D + a)^2 f(H^D)$ est un opérateur de multiplication par $(\lambda + v_\sigma + a)^2 f(\lambda)$ dans sous espace $L^2(\mathbb{R}^\star_\sigma)$. On peut donc écrire l'opérateur X de la manière suivante :

$$(H_V^D + a)^2 f(H^D) = \sum_{\sigma=\pm} \int_0^\infty d\lambda(\lambda + v_\sigma + a)^2 f(\lambda)(., \widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x))\widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x)$$

On définit aussi la fonction $\psi^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x)$ comme

$$\psi^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x) := \Xi_0^+\widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x) = (2)^{-1/2}\lambda^{-1/4}\varphi^\sigma_{\sqrt{\lambda}}(x)$$

Il vient

$$\begin{aligned} X &= \Xi_0^+ \sum_{\sigma=\pm} \int_0^\infty d\lambda(\lambda + v_\sigma + a)^2 f(\lambda)(., \widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}})\widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda}}\Xi_0^{+\star} \\ &= \Xi_0^+ \sum_{\sigma=\pm} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^\infty d\lambda(\lambda + a)^2 f(\lambda - v_\sigma)(., \widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda - v_\sigma}})\widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda - v_\sigma}}\Xi_0^{+\star} + \\ &+ \Xi_0^+ \int_{v_\beta}^{v_{\widehat{\beta}}} d\lambda(\lambda + a)^2 f(\lambda - v_\beta)(., \widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda - v_\beta}})\widetilde{\psi}^\sigma_{\sqrt{\lambda - v_\beta}}\Xi_0^{+\star} \end{aligned}$$

où on rappelle que l'on a défini en (4.28) les fonctions β et $\widehat{\beta}$ telles que

$$\beta = \begin{cases} +\text{si} & v_+ < v_- \\ -\text{si} & v_+ > v_- \end{cases}, \quad \widehat{\beta} = -\beta \tag{4.30}$$

Pour des questions de lisibilité, on note $\sqrt{\lambda - v_\sigma} =: k_\sigma$.

$$\begin{aligned} X &= \sum_{\sigma=\pm} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^\infty d\lambda(\lambda + a)^2 f(\lambda - v_\sigma)(., \psi^\sigma_{k_\sigma})\psi^\sigma_{k_\sigma} + \int_{v_\beta}^{v_{\widehat{\beta}}} d\lambda(\lambda + a)^2 f(\lambda - v_\beta)(., \psi^\sigma_{k_\beta})\psi^\sigma_{k_\beta} \\ X\Delta R\Pi^u &= \sum_{\sigma=\pm} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^\infty d\lambda(\lambda + a)^2 f(\lambda - v_\sigma)(\Delta R\Pi^u, \psi^\sigma_{k_\sigma})\psi^\sigma_{k_\sigma} + \\ &+ \int_{v_\beta}^{v_{\widehat{\beta}}} d\lambda(\lambda + a)^2 f(\lambda - v_\beta)(\Delta R\Pi^u, \psi^\sigma_{k_\beta})\psi^\sigma_{k_\beta} \end{aligned}$$

Il vient

$$\begin{aligned}
\text{Im tr}\, X\Delta R &= \text{Im} \sum_{\sigma=\pm} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda(\lambda+a)^2 f(\lambda - v_\sigma)\text{tr}\,(\Delta R\Pi^u, \psi^\sigma_{k_\sigma})\psi^\sigma_{k_\sigma} + \\
&+ \int_{v_\beta}^{v_{\widehat{\beta}}} d\lambda(\lambda+a)^2 f(\lambda - v_\beta)\text{tr}\,(\Delta R\Pi^u, \psi^\sigma_{k_\beta})\psi^\sigma_{k_\beta} \\
&= \sum_{\sigma=\pm} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda(\lambda+a)^2 f(\lambda - v_\sigma)\text{Im} < \Delta R\Pi^u\psi^\sigma_{k_\sigma}, \psi^\sigma_{k_\sigma} > + \\
&+ \int_{v_\beta}^{v_{\widehat{\beta}}} d\lambda(\lambda+a)^2 f(\lambda - v_\beta)\text{Im} < \Delta R\Pi^u\psi^\beta_{k_\beta}, \psi^\beta_{k_\beta} > \qquad (4.31)
\end{aligned}$$

On calcule le premier terme du membre de droite de (4.31), on appelle : $C =< \Delta R\Pi^u\psi^\sigma_{k_\sigma}, \psi^\sigma_{k_\sigma} >$. En utilisant Lippmann-Schwinger et l'équation (6.3.6), il vient

$$C = \text{Im}\ \delta_{u\sigma} < \Delta R\widetilde{\psi_{k_\sigma}}^{\sigma}, \psi^\sigma_{k_\sigma} > + \text{Im} < \Delta R(R(\lambda) - R^u_V - i0+)^{-1}\Delta R\psi^\sigma_{k_\sigma}, \psi^\sigma_{k_\sigma} >$$

On a alors, en utilisant dans un premier temps l'équation (6.3.6) puis les équations (4.24) et (4.25) :

$$\begin{aligned}
\text{Im} < \Delta R\widetilde{\psi_{k_\sigma}}^{\sigma}, \psi^\sigma_{k_\sigma} > &= \text{Im} < \Delta R\widetilde{\psi_{k_\sigma}}^{\sigma}, (1 - (R - R(\lambda) - i0+)^{-1}\Delta R)\widetilde{\psi}^\sigma_{k_\sigma} > \qquad (4.32) \\
&= \text{Im}\overline{< T(k_\sigma + i0+)\widetilde{\psi}^\sigma_{k_\sigma}, \widetilde{\psi}^\sigma_{k_\sigma} >} \qquad (4.33)
\end{aligned}$$

On note

$$\phi^\sigma_{k_\sigma} := \Delta R\psi^\sigma_{k_\sigma}$$

Ainsi, en utilisant la transformée de Fourier généralisée et la formule de Sokotskii-Plemelj pour u fixé :

$$\begin{aligned}
\text{Im} &< (R(\lambda) - R^u_V - i0+)^{-1}\phi^\sigma_{k_\sigma}, \phi^\sigma_{k_\sigma} >= \\
&= \text{Im} \int_{\text{spect}(H^u_V)} \frac{1}{R(\lambda) - R(E) - i0+} d < P^u_{\sqrt{E-v_u}}\phi^\sigma_{k_\sigma}, \phi^\sigma_{k_\sigma} > \\
&= \int_0^\infty \frac{1}{R(\lambda) - R(E) - i0+}| < \phi^\sigma_{k_\sigma}, \widetilde{\psi}^u_{\sqrt{E-v_u}} > |^2 dE \\
&= \pi(\lambda+a)^2| < \phi^\sigma_{k_\sigma}, \widetilde{\psi}^u_{k_u} > |^2 \qquad (4.34)
\end{aligned}$$

Remarque 4.3.2. *Il faut bien voir ici que le projecteur $P^u_{\sqrt{E-v_u}}$ est défini comme*

$$P^u_{\sqrt{E-v_u}} = 2\sqrt{E - v_u}(., \widetilde{\psi}^u_{k_u})\widetilde{\psi}^u_{k_u}$$

On a, de plus, en effectuant le même travail que pour (4.32)

$$< \phi^\sigma_{k_\sigma}, \widetilde{\psi}^u_{k_u} > \ = \ < \Delta R\psi^\sigma_{k_\sigma}, \widetilde{\psi}^u_{k_u} >$$

En substituant (4.33) et (4.34) dans (4.31) le premier terme devient :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma=\pm}\int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda(\lambda+a)^2 f(\lambda-v_\sigma)(\pi(\lambda+a)^2|<T(k_u+i0+)\widetilde{\psi}^\sigma_{k_\sigma},\widetilde{\psi}^u_{k_u}>|^2 + \\
+ \quad & \mathrm{Im}\overline{<T\widetilde{\psi}^\sigma_{k_\sigma},\widetilde{\psi}^\sigma_{k_\sigma}>}\delta_{u,\sigma}) \\
= \quad & \sum_{\sigma=\pm}\int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda f(\lambda-v_\sigma)\left(\pi|T^{\sigma u}|^2+\mathrm{Im}\,\overline{T^{\sigma\sigma}}\delta_{u,\sigma}\right) \qquad (4.35)\\
= \quad & \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda\left(\pi|T^{uu}|^2 f(\lambda-v_u)+\pi|T^{u\widehat{u}}|^2 f(\lambda-v_{\widehat{u}})+\mathrm{Im}\,\overline{T^{uu}}f(\lambda-v_u)\right) \qquad (4.36)
\end{aligned}$$

On récrit grâce qu théorème optique (voir [54]) :

$$\mathrm{Im}\,\overline{T^{uu}} = -\pi|T^{uu}|^2-\pi|T^{\widehat{u}u}|^2$$

La ligne de calcul (4.36) devient donc

$$\pi\int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda\left(f(\lambda-v_u)|T^{u\widehat{u}}|^2-f(\lambda-v_{\widehat{u}})|T^{\widehat{u}u}|^2\right)$$

On montre à présent que le second terme du membre de droite dans l'équation (4.31), qui est, on le rappelle

$$\int_{v_\beta}^{v_{\widehat{\beta}}} d\lambda(\lambda+a)^2 f(\lambda-v_\beta)\mathrm{Im}\,<\Delta R\Pi^u\psi^\beta_{k_\beta},\psi^\beta_{k_\beta}>$$

est nul. On effectue un calcul similaire au précédent. On appelle

$$\begin{aligned}
D \quad := \quad & \mathrm{Im}\,<\Delta R\psi^\beta_{k_\beta},\psi^\beta_{k_\beta}> \\
= \quad & \mathrm{Im}\,\delta_{u\beta}<\Delta R\widetilde{\psi}^\beta_{k_\beta},\psi^\beta_{k_\beta}>+\mathrm{Im}\,<\Delta R(R(E)-R^u_V-i0+)^{-1}\Delta R\psi^\beta_{k_\beta},\psi^\beta_{k_\beta}>. \qquad (4.37)
\end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned}
\mathrm{Im} \quad & <\Delta R(R(E)-R^u_V-i0+)^{-1}\Delta R\psi^\beta_{k_\beta},\psi^\beta_{k_\beta}>= \\
= \quad & \int_0^\infty \frac{1}{R(\lambda)-R(E)-i0+}|<\phi^\beta_{k_\beta},\widetilde{\psi}^u_{\sqrt{E-v_u}}>|^2 dE \\
= \quad & \pi(\lambda+a)^2\delta_{u,\beta}|<\phi^\beta_{k_\beta},\widetilde{\psi}^\beta_{k_\beta}>|^2 \\
= \quad & \pi(\lambda+a)^2\delta_{u,\beta}|<T(k_\beta+i0+)\widetilde{\psi}^\beta_{k_\beta},\widetilde{\psi}^\beta_{k_\beta}>|^2 \\
= \quad & \frac{\pi}{(E+a)^2}|T^{\beta\beta}|^2\delta_{u,\beta} \qquad (4.38)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\mathrm{Im}\,\delta_{u\beta}<\Delta R\widetilde{\psi_{k_\beta}}^\beta,\psi^\beta_{k_\beta}> \quad & = \quad \mathrm{Im}\,\overline{<T(k_\beta+i0+)\widetilde{\psi}^\beta_{k_\beta},\widetilde{\psi}^\beta_{k_\beta}>}\delta_{u,\beta} \\
& = \quad \frac{1}{(E+a)^2}\mathrm{Im}\,\overline{T^{\beta\beta}}\delta_{u,\beta} \\
& = \quad \frac{-\pi}{(E+a)^2}|T^{\beta\beta}|^2\delta_{u,\beta} \qquad (4.39)
\end{aligned}$$

Ainsi, en sommant (4.38) et (4.39) on voit que le second terme dans (4.31) est nul.

Lemme 4.3.3.

$$|T^{u\widehat{u}}|^2 = |T^{\widehat{u}u}|^2$$

Preuve : on a besoin de démontrer que

$$\sum_i |T^{ji}|^2 = \sum_i |T^{ij}|^2.$$

On utilise le théorème optique (voir [54]) :

$$\begin{aligned}
\operatorname{Im} T^{ii} &= -\pi \sum_j |T^{ij}|^2 = -\pi \sum_j T^{ij}\overline{T^{ij}} = -\pi \sum_j T^{ij}(T^\star)^{ji} \\
&= -\pi \sum_j \overline{T^{ij}} T^{ij} \\
&= -\pi \sum_j (T^\star)^{ji} T^{ij} = -\pi \sum_j |(T^\star)^{ji}|^2 \\
&= -\pi \sum_j |T^{ji}|^2 \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Le courant s'exprime alors comme suit :

$$\begin{aligned}
j_u &= 2\pi \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda \left(f(\lambda - v_{\widehat{u}}) |T^{u\widehat{u}}|^2 - f(\lambda - v_u) |T^{\widehat{u}u}|^2 \right) \\
&= 2\pi \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} d\lambda \left(f(\lambda - v_{\widehat{u}}) - f(\lambda - v_u) \right) |T^{u\widehat{u}}|^2 \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{4.41}$$

4.4 Modèles

4.4.1 Application au modèle nu ponctuel ($g = 0$)

On calcule tout d'abord $L_E = \tau_1 R_V^D \tau_1^\star$. On utilise la fonction de Green associée à l'Hamiltonien H_V^D est :

$$G_+(x, y; z) = \frac{1}{\sqrt{z - v_+}} \sin(\sqrt{z - v_+}x) e^{-i\sqrt{z-v_+}y}, \quad x \leq y \tag{4.42}$$

$$G_-(x, y; z) = \frac{-1}{\sqrt{z - v_-}} \sin(\sqrt{z - v_-}x) e^{i\sqrt{z-v_-}y}, \quad x \geq y \tag{4.43}$$

Ainsi,

$$L_E = -i(\sqrt{E - v_+} + \sqrt{E - v_-}) = -i(k_+ + k_-), \quad L_E^{-1} = \frac{i}{k_+ + k_-} \tag{4.44}$$

On a de plus

$$\tau_1 \widetilde{\psi}_{k_u}^u = u\pi^{-1/2} k_u^{1//2}$$

D'où

$$T^{uv} = \frac{-iuv}{\pi(k_+ + k_-)} k_u^{1/2} k_v^{1/2}, \quad |T^{uv}|^2 = \frac{1}{\pi^2 (k_+ + k_-)^2} k_u k_v \tag{4.45}$$

Pour ce modèle on a alors :

$$|T^{u\widehat{u}}|^2 = \frac{1}{\pi^2(k_+ + k_-)^2} k_u k_{\widehat{u}} = |T^{\widehat{u}u}|^2 \tag{4.46}$$

D'où

$$j_u = \frac{2}{\pi} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} \left(f(E - v_u) - f(E - v_{\widehat{u}})\right) \frac{k_u k_{\widehat{u}}}{(k_u + k_{\widehat{u}})^2} dE \tag{4.47}$$

Remarque 4.4.1. *La matrice T pour le modèle nu ponctuel est donnée par*

$$T = \frac{i}{\pi(k_+ + k_-)} \begin{pmatrix} -k_+ & k_-^{1/2} k_+^{1/2} \\ k_-^{1/2} k_+^{1/2} & -k_- \end{pmatrix} \tag{4.48}$$

La matrice de diffusion S est alors :

$$S = \frac{1}{k_+ + k_-} \begin{pmatrix} k_- - k_+ & -2k_-^{1/2} k_+^{1/2} \\ -2k_-^{1/2} k_+^{1/2} & k_+ - k_- \end{pmatrix} \tag{4.49}$$

Ainsi, lorsque $v_+ = v_- = v$ on a :

$$S = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.50}$$

On remarque pour finir que les matrices S ci-dessus sont bien unitaires.

4.4.2 Application au modèle δ

Théorème 4.4.2. *Le courant pour le modèle δ est donnée par*

$$j_u = \frac{2}{\pi} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} \left(f(E - v_u) - f(E - v_{\widehat{u}})\right) \gamma k_u k_{\widehat{u}} dE, \tag{4.51}$$

où

$$\gamma := \frac{1}{g^2 + (k_u + k_{\widehat{u}})^2}.$$

Preuve : on décompose la preuve en plusieurs étapes que l'on répartit dans les (a), (b) et (c) suivants.

a. Calcul des fonctions propres généralisées pour le modèle δ

On utilise pour ce calcul l'équation de Lippmann Schwinger ; on compare les fonctions propres généralisées $\varphi_g^\sigma(k_\sigma, x)$ de l'Hamiltonien du modèle δ

$$H_g := -\Delta + g\delta$$

avec les fonctions propres généralisées du modèle de la particule libre sur la ligne droite :

$$\varphi_0^\sigma(k_\sigma, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\sigma i k_\sigma x}, \quad k_\sigma := +\sqrt{E - v_\sigma}$$

Remarque 4.4.3. *Pour le modèle de la particule libre, la solution de*

$$H_0\varphi_0(k,x) := -\Delta\varphi_0(k,x) + V\varphi_0(k,x) = E\varphi_0(k,x), \quad V = v_-\Pi^- + v_+\Pi^+$$

que l'on note

$$\varphi_0^+(k_+,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{+ik_+x}, \quad k_+ = \sqrt{E-v_+}$$

correspond à la fonction d'onde d'une particule se déplaçant vers les x positifs, alors que la solution

$$\varphi_0^-(k_-,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ik_-x}, \quad k_- = \sqrt{E-v_-}$$

correspond au mouvement d'une particule se déplaçant vers les x négatifs.

L'équation de Lippmann Schwinger donne :

$$\varphi_g^\sigma(k_\sigma,x) = \varphi_0^\sigma(k_\sigma,x) - g(H_0 - E - i0+)^{-1}\tau^\star\tau\varphi_g^\sigma(k_\sigma,x).$$

Remarque 4.4.4. *On rappelle l'expression de la fonction de Green associée à l'Hamiltonien H_0 défini ci-dessus :*

$$G_0(x,y;z) = \begin{cases} \frac{i}{2k_+}e^{+ik_+|x-y|} & \textit{si } 0 \le x \le y \\ \frac{i}{2k_-}e^{-k_-|y-x|} & \textit{si} \quad x \le y \le 0. \end{cases} \tag{4.52}$$

Il vient donc :

$$\varphi_g^\sigma(k_\sigma,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\sigma ik_\sigma x} + \frac{g}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{2ik_\sigma - g}e^{\sigma ik_\sigma|x|}$$

b. Calcul de la fonction de Green associé à l'Hamiltonien du modèle δ

On utilise les fonctions propres généralisées données en (4.52). Il vient :

$$G_g(x,y;z) = \begin{cases} \frac{\varphi_g^-(k_-,x)\varphi_g^+(k_+,y)}{-W(\varphi_g^-,\varphi_g^+)} & \text{si } \le x \le y \\ \frac{\varphi_g^-(k_-,y)\varphi_g^+(k_+,x)}{-W(\varphi_g^-,\varphi_g^+)} & \text{si} \quad y \le x, \end{cases} \tag{4.53}$$

où on a noté $W(\varphi_g^-,\varphi_g^+)$ le wronskien (voir [37]) qui a la valeur suivante :

$$W(\varphi_g^-,\varphi_g^+) = \frac{1}{\pi}\frac{2ik_-k_+}{(2ik_- - g)(2ik_+ - g)}\left(k_+ + k_- + ig\right).$$

c. Calcul du courant pour le modèle δ

Grâce aux paragraphes précédents, on a la forme explicite de L_E^{-1}. On appelle $R_g := (H_g - z)^{-1}$. Il suit :

$$L_E^{-1} = -\tau R_g\tau^\star = \frac{1}{g - i(k_+ + k_-)}.$$

On rappelle que la matrice T s'exprime comme :

$$T^{uv} = -(E+a)^2 < B^\star L_E^{-1}B\widetilde{\psi}_{k_u}^u, \widetilde{\psi}_{k_v}^v > = - < L_E^{-1}\tau_1\widetilde{\psi}_{k_u}^u, \tau_1\widetilde{\psi}_{k_v}^v > . \tag{4.54}$$

On a :

$$\tau_1 \widetilde{\psi}^u_{k_u} = \pi^{-1/2} k_u^{1//2}.$$

D'où l'expression des éléments de la matrice T pour le modèle δ est :

$$T^{uv} = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{g - i(k_+ + k_-)} k_u^{1/2} k_v^{1/2}.$$

On définit

$$\gamma := \frac{1}{g^2 + (k_+ + k_-)^2}.$$

On en déduit alors

$$T^{\widehat{u}u} = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{g - i(k_+ + k_-)} k_u^{1/2} k_{\widehat{u}}^{1/2} = T^{u\widehat{u}}, \quad |T^{\widehat{u}u}|^2 = \frac{k_u k_{\widehat{u}} \gamma}{\pi^2}. \tag{4.55}$$

L'expression du courant est donc :

$$j_u = \frac{2}{\pi} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} \left(f(E - v_u) - f(E - v_{\widehat{u}})\right) \gamma k_u k_{\widehat{u}} dE. \tag{4.56}$$

Remarque 4.4.5. *Grâce aux calculs ci dessus, on retrouve des résultats en accords avec ceux obtenus avec la méthode utilisant la formule [28]. En effet, les éléments $T^{uv}_{k_u}$ correspondent en fait aux éléments de la matrice de transition T. On obtient donc :*

$$T = \frac{1}{\pi(g - i(k_+ + k_-))} \begin{pmatrix} -k_+ & -k_-^{1/2} k_+^{1/2} \\ -k_+^{1/2} k_+^{1/2} & -k_- \end{pmatrix} \tag{4.57}$$

et ainsi

$$S = 1 - 2i\pi T = \frac{1}{g - i(k_+ + k_-)} \begin{pmatrix} g - i(k_+ - k_-) & 2ik_-^{1/2} k_+^{1/2} \\ 2ik_-^{1/2} k_+^{1/2} & g - i(k_- - k_+) \end{pmatrix} \tag{4.58}$$

Si l'on considère le cas $v_\pm = v$ alors $k_u = k_{\widehat{u}} = k$ et on obtient :

$$S = \frac{1}{g - 2ik} \begin{pmatrix} g & 2ik \\ 2ik & g \end{pmatrix} = \frac{1}{ig + 2k} \begin{pmatrix} ig & -2k \\ -2k & ig \end{pmatrix} \tag{4.59}$$

On reconnait $-S$ où S est la matrice S donnée en (4.19). On remarque aussi que cette matrice S est unitaire.

4.4.3 Application au modèle nu avec échantillon intervalle

a. Calcul préliminaire

On traite ici le cas d'un échantillon de longueur $2L, L \in \mathbb{R}_+^\star$ situé à l'origine. Les fils sont situés en $]-\infty, -L]$ et $[L, +\infty[$. Les fonctions propres généralisées associées à L'Hamiltonien

H_V^D avec condition de Dirichlet en $\pm L$ sont :

$$\begin{aligned}
\widetilde{\varphi}^-_{\omega_-}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin[(x+L)\omega_-] \quad \text{sur}]-\infty,-L] \\
\widetilde{\varphi}^+_{\omega_+}(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin[(L-x)\omega_+] \quad \text{sur}[L,+\infty[\\
\widetilde{\varphi}^0_{\omega}(x) &= \sqrt{\frac{2L}{\pi}}\sin[\omega x] \quad \text{sur}[-L,L]
\end{aligned}$$

où l'on a défini

$$\omega_\pm := \sqrt{E-v_\pm}, \quad \omega := \sqrt{E}.$$

La fonction de Green associé à H_V^D est alors

$$G^D(x,y;z) = \begin{cases} -\frac{\sin[(x+L)\omega_-]e^{i\omega_-(y+L)}}{\omega_-} & \text{si } -L \geq x \geq y \\ -\frac{\sin[(L-x)\omega_+]e^{i\omega_+(L-y)}}{\omega_+} & \text{si } L \leq x \leq y \\ \frac{\sin[(x+L)\omega]\sin[\omega(L-y)]}{\omega\sin(2\omega l)} & \text{si } -L \leq x \leq y \leq L. \end{cases} \tag{4.60}$$

On rappelle :

$$L := \begin{pmatrix} \tau_1^- R_V^D \tau_1^{-\star} & \tau^- R_V^D \tau_1^{+\star} \\ \tau_1^+ R_V^D \tau_1^{-\star} & \tau_1^+ R_V^D \tau_1^{+\star} \end{pmatrix}. \tag{4.61}$$

On calcule :

$$\begin{aligned}
\tau_1^- R_V^D \tau_1^{-\star} &= \frac{-\omega}{\tan(2\omega L)} - i\omega_-, \quad \tau_1^+ R_V^D \tau_1^{+\star} = \frac{-\omega}{\tan(2\omega L)} - i\omega_+ \\
\tau_1^- R_V^D \tau_1^{+\star} &= \frac{\omega}{\sin(2\omega L)}, \quad \tau_1^+ R_V^D \tau_1^{-\star} = \frac{\omega}{\sin(2\omega L)}.
\end{aligned}$$

Il suit :

$$L := \begin{pmatrix} \frac{-\omega}{\tan(2\omega L)} - i\omega_- & \frac{\omega}{\sin(2\omega L)} \\ \frac{\omega}{\sin(2\omega L)} & \frac{-\omega}{\tan(2\omega L)} + i\omega_+ \end{pmatrix}. \tag{4.62}$$

On a $\det L = -\big((\omega_-\omega_+ + \omega^2) - i\omega(\omega_- + \omega_+)\cot 2\omega L\big)$ et on obtient

$$\begin{aligned}
L^{-1} &:= \frac{-1}{(\omega_-\omega_+ + \omega^2)\sin 2\omega L - i\omega(\omega_- + \omega_+)\cos(2\omega L)} \times \\
&\times \begin{pmatrix} i\omega_+\sin(2\omega L) - \omega\cos(2\omega L) & -\omega \\ -\omega & i\omega_-\sin(2\omega L) - \omega\cos(2\omega L) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.63}$$

Si on fait tendre L vers 0, on a

$$L^{-1} := \frac{i}{(\omega_- + \omega_+)} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.64}$$

b. Calcul de T

On a besoin de calculer

$$\sum_{\epsilon,\epsilon'=\pm} < (L^{-1})^{\epsilon\epsilon'} \tau_1^{\epsilon'} \widetilde{\psi}^u_{\omega_u}, \tau_1^{\epsilon} \widetilde{\psi}^v_{\omega_v} >, \quad u, v = \pm,$$

où on rappelle que

$$\widetilde{\psi}^u_{\omega_u}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi\omega_u}} \sin[(L - ux)\omega_u], \quad u = \pm$$

si bien que l'on a

$$\tau_1^{\epsilon} \widetilde{\psi}^u_{\omega_u} = -\sqrt{\frac{\omega_u}{\pi}} \delta_{u,\epsilon}.$$

Les éléments de la matrice T sont donc

$$T^{uv} = - < (L^{-1})^{vu} \tau_1^u \widetilde{\psi}^u_{\omega_u}, \tau_1^v \widetilde{\psi}^v_{\omega_v} >= \frac{-1}{\pi} (L^{-1})^{vu} \sqrt{\omega_u \omega_v}.$$

Lemme 4.4.6. *La matrice T pour le modèle nu dans le cas d'un échantillon de longueur $2L$ est donnée par :*

$$\begin{aligned} T &:= \frac{-\omega}{(\omega_-\omega_+ + \omega^2)\sin 2\omega L + i\omega(\omega_- + \omega_+)\cos(2\omega L)} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \omega_+ & \omega_+^{1/2}\omega_-^{1/2} \\ \omega_+^{1/2}\omega_-^{1/2} & \omega_- \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4.65}$$

Il vient

$$T^{u\widehat{u}} = \frac{-(L^{-1})^{\widehat{u}u}}{\pi} \sqrt{\omega_u \omega_{\widehat{u}}}$$

et

$$|T^{u\widehat{u}}|^2 = \frac{1}{\pi^2} \frac{\omega^2 \omega_u \omega_{\widehat{u}}}{(\omega_-\omega_+ + \omega^2)^2 \sin^2(2\omega L) + \omega^2(\omega_- + \omega_+)^2 \cos^2(2\omega L)} = |T^{\widehat{u}u}|^2$$

et le courant pour le modèle nu est alors

$$j_u = \frac{2}{\pi} \int_{v_{\widehat{\beta}}}^{\infty} dE \, (f(E - v_u) - f(E - v_{\widehat{u}})) \frac{E\sqrt{(E - v_u)(E - v_{\widehat{u}})}}{(\omega_-\omega_+ + \omega^2)^2 \sin^2(2\omega L) + \omega^2(\omega_- + \omega_+)^2 \cos^2(2\omega L)} \tag{4.66}$$

4.4.4 Modèle δ (échantillon intervalle)

Dans cette partie on traite le cas d'un échantillon qui est un intervalle de longueur $2L > 0$ situé à l'origine. On suppose que le potentiel d'échantillon est localisé à l'origine et de la forme :

$$V^s = g\tau^\star\tau$$

Les fonctions de Green pour l'Hamiltonien $H_V^D + V^s$ sont celles données précédemment, c'est-à-dire

$$G^D(x,y;z) = \begin{cases} -\frac{\sin[(x+L)\omega_-]e^{i\omega_-(y+L)}}{\omega_-} & \text{si } -L \geq x \geq y \\ -\frac{\sin[(L-x)\omega_+]e^{i\omega_+(L-y)}}{\omega_+} & \text{si } L \leq x \leq y \\ \frac{\sin(\omega(x+L))\sin(\omega(L-y))}{\omega\sin(2\omega L)} - \frac{\sin(\omega(x+L))\sin(\omega(L-y))}{\omega^2\sin^2(2\omega L)\left[g^{-1}+\frac{1}{2\omega}\tan(\omega L)\right]} & \text{si } -L \leq x \leq y \leq L \end{cases} \tag{4.67}$$

La matrice L obtenue est

$$L := \begin{pmatrix} \frac{-\omega}{\tan(2\omega L)} + \frac{2g\omega\nu}{\tan 2\omega L \sin(2\omega L)} - i\omega_- & \frac{\omega}{\sin(2\omega L)} - \frac{2g\nu\omega}{\sin^2(2\omega L)} \\ \frac{\omega}{\sin(2\omega L)} - \frac{2g\nu\omega}{\sin^2(2\omega L)} & -i\omega_+ + \frac{-\omega}{\tan(2\omega L)} + \frac{2g\omega\nu}{\sin(2\omega L)\tan 2\omega L} \end{pmatrix} \tag{4.68}$$

où

$$\nu := \frac{1}{2\omega + g\tan(\omega L)}$$

On a

$$\begin{aligned} \det(L) &= \frac{\nu^2}{\sin^2(2\omega L)}[(-\omega^2 - \omega_+\omega_-)\gamma^2\sin^2(2\omega L) + 4g\omega^2\left[\gamma\sin(2\omega L) - g\right] + \\ &+ i\cos(2\omega L)\gamma\omega(\omega_+ + \omega_-)(\gamma\sin(2\omega L) - 2g)] \end{aligned} \tag{4.69}$$

où

$$\gamma := \frac{1}{\nu} = 2\omega + g\tan(\omega L)$$

D'où en posant $\delta := \gamma\sin(2\omega L) - 2g$

$$\begin{aligned} &(L^{-1})^{+-} = \\ &= \frac{-\gamma\omega\delta}{(-\omega^2 - \omega_+\omega_-)\gamma^2\sin^2(2\omega L) + 4g\omega^2\left[\gamma\sin(2\omega L) - g\right] + i\cos(2\omega L)\gamma\omega(\omega_+ + \omega_-)\delta} \end{aligned}$$

Il vient :

$$|T^{+-}|^2 = \frac{1}{\pi^2}\omega_+\omega_-|(L^{-1})^{+-}|^2$$

où

$$|(L^{-1})^{+-}|^2 = \frac{\gamma^2\omega^2\delta^2}{[(-\omega^2 - \omega_+\omega_-)\gamma^2\sin^2(2\omega L) + 4g\omega^2\left[\gamma\sin(2\omega L) - g\right]]^2 + [2\cos(2\omega L)\gamma\omega(\omega_+ + \omega_-)\delta]^2}$$

Chapitre 5

Guide d'onde quantique et graphes

5.1 Introduction

On calcule le courant circulant dans un modèle tridimensionnel. Les fils sont des cylindres semi infinis et la démonstration suivante nous oblige à faire des hypothèses que l'on détaillera sur la géométrie de l'échantillon. Cette section permet d'aboutir à une démonstration de la formule de Landauer Büttiker pour un modèle en trois dimension. La démonstration et les résultats sont proches de ce qui a été fait dans [19]. Dans cet article, on traite le cas d'un modèle discret. Les fils sont représentés par des chaines discrètes uni-dimensionnelles semi-infinies et l'échantillon est une grille finie de $\mathbb{Z}^2$. Le but de cette section est d'introduire l'expression de la formule de Landauer Büttiker pour le cas continu et en dimension deux ou trois. On s'intéresse aussi à l'expression du courant dans le cas des guides d'ondes quantiques courbés et/ou tordus. Dans le chapitre suivant, on s'intéressera au comportement du courant dans ces guides d'ondes quantiques en dimension deux ou trois lorsque l'épaisseur (en dimension deux) ou le diamètre (en dimension trois) tend vers 0. On démontrera l'importance de la géométrie du guide dans ces limites de diamètres petits. Soit Γ l'ouverture de

$$\overline{\Gamma^- \cup \Gamma^s \cup \Gamma^+}$$

où $\Gamma^\pm \cong \mathbb{R}^\star_+ \times D$ et D un ouvert borné de $\mathbb{R}^2$ et Γ^s un ouvert borné de $\mathbb{R}^3$. Soit

$$H := -\Delta + V^s \tag{5.1}$$

l'Hamiltonien sur $\mathcal{H} = L^2(\Gamma)$. On suppose

$$\partial\Gamma^\pm \cap \partial\Gamma^s = \{0\} \times D, \quad \partial\Gamma^{con} := (\partial\Gamma^- \cap \partial\Gamma^s) \cap (\partial\Gamma^+ \cap \partial\Gamma^s)$$

Suivant l'article [19], au temps $t < 0$ le biais de potentiel n'a pas été introduit et le système fils+échantillon est couplé et à l'équilibre pour une température $1/\beta = k_b\theta$ avec θ la température et k_b la constante de Boltzman, et pour un potentiel chimique μ. L'état du système à $t < 0$ est donné par la fonction de Fermi Dirac f(on travaille dans le cas de fermions n'interagissant pas entre eux)

$$f(H) = f_{\beta,\mu}(H) = \frac{1}{1 + e^{\beta(H-\mu)}}.$$

On introduit à $t = -\infty$ un biais de potentiel sur les fils, c'est-à-dire que l'on ajoute à H un potentiel V tel que :

$$H_V := H + V = -\Delta + V^s + V, \quad V := \phi(t)\left(v_-\Pi^- + v_+\Pi^+\right),$$

avec $\phi(t)$ une fonction telle que $\phi(t) = 0$ lorsque $t < 0$ et $\phi(t) = 1$ lorsque $t \geq 0$. Π^- et Π^- désigne les projections orthogonales sur les fils $-$ et $+$ respectivement. A $t = -\infty$ on ajoute donc un potentiel sur les fils et on laisse évoluer le système jusqu'à $t = 0$. A $t = 0$ le système est dans un état de NESS (Non Equilibrium Steady State, état stationnaire hors équilibre, voir conjecture (5.1.1)) et on calcule alors le courant dans cet état.

Conjecture 5.1.1. *Soit l'Hamiltonien H^D défini comme l'Hamiltonien* (5.1) *mais avec une condition de Dirichlet à l'origine.*
A $t = 0$ le système est dans un état de NESS de la forme

$$\rho_{NESS} = \Omega_0^+ f(H^D)\Omega_0^{+\star}$$

où Ω_0^+ désigne l'opérateur d'onde pour la paire (H_V, H_V^D) :

$$\Omega_0^+ = s - \lim e^{i(t-s)H_V} e^{-i(t-s)H_V^D} P_{ac}(H_V^D)$$

On note $U(t)$ l'opérateur d'évolution du système couplé $H + V$. $U(t)$ est solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps suivante :

$$-i\partial_t U(t) + H_V(t)U(t) = 0, \quad U(0) = 1$$

On définit l'Hamiltonien H_V^D de manière analogue à H_V mais avec une condition de Dirichlet supplémentaire en D. Soit $\widetilde{\psi}_E^{\alpha,n}$ un vecteur propre généralisé de H_V^D, les indices (α, n) désignent respectivement les fils $+$ ou $-$ et le mode transverse. On appelle $E_n = \frac{n^2\pi^2}{2a^2}$ les énergies propres de H_V^D, c'est-à-dire les solutions propres de

$$H_V^D \widetilde{\psi}_E^{\alpha,n} = E_n \widetilde{\psi}_E^{\alpha,n} \tag{5.2}$$

$$\widetilde{\psi}_E^{\alpha,n}|_D = 0 \tag{5.3}$$

Du fait de la condition de Dirichlet en D, H_V^D est un opérateur découplé, on peut donc l'écrire comme une somme directe de trois opérateurs $H_{v_+}^+$, $H_{v_-}^-$ et H^s agissant respectivement sur $L^2(\Gamma^+)$, $L^2(\Gamma^-)$ et $L^2(\Gamma^s)$, il vient :

$$H_V^D = H_{v_-}^- \oplus H^s \oplus H_{v_+}^+, \quad H_{v_\pm}^\pm := -\Delta + v_\pm \quad \text{sur } L^2(\Gamma^\pm), \quad H^s := -\Delta + V^s \quad \text{sur } L^2(\Gamma^s)$$

Théorème 5.1.2. *On note $\mathcal{T}_v^{u,\widehat{u}}(E)$ le coefficient de transition entre les deux fils u et $\widehat{u}$ où $\widehat{u} = -u, u = \pm$ pour un biais de potentiel v et pour un paramètre spectral E. Le courant traversant le fil u est donné par la formule de Landauer-Büttiker et s'exprime comme suit :*

$$j_u = 2\pi \int_{\sigma(H_{v_-}^-)\cap\sigma(H_{v_+}^+)} (f(E - v_{\widehat{u}}) - f(E - v_u))\, \mathcal{T}_v^{u\widehat{u}}(E)\, dE \tag{5.4}$$

Preuve. Une preuve est donnée en 6.3.1, mais peut aussi être trouvée dans [5] et [21].

5.1.1 Matrice de diffusion et transmittance

Voici quelques définitions importantes pour la suite. On s'intéresse à la théorie de la diffusion stationnaire. On traite de la diffusion entre les opérateurs de la paire (H_V, H_V^D). On appelle opérateur d'onde l'opérateur unitaire suivant :

$$\Omega_0^\pm = s - \lim_{t \to \mp\infty} e^{i(t-s)H_V} e^{-i(t-s)H_V^D} P_{ac}(H_V^D)$$

La matrice de diffusion pour la paire (H_V, H_V^D) est l'opérateur unitaire suivant

$$S(H_V, H_V^D) := (\Omega_0^-)^\star \Omega_0^+$$

Soit l'opérateur T défini par

$$T(E+i0+) = \Delta R_z - \Delta R_z (R_V(z) - R_V(E+i0+) - i0+)^{-1} \Delta R_z, \quad \Delta R_z = R_V(z) - R_V^D(z) \tag{5.5}$$

En utilisant la formule de Krein, voir Annexe 6.3.2, on peut énoncer le théorème suivant :

Théorème 5.1.3. *L'opérateur T définit précédemment est donné par*

$$T(R(E)+i0+) = -B_z^\star L_E^{-1} B_z,$$

où L_E^{-1} est défini comme suit :

$$A_E = -L_E^{-1} B_E$$

5.2 Le guide torsadé

Bien que cela fasse longtemps que l'on étudie les effets de courbure sur un guide d'ondes quantique, on citera par exemple [26], [25], les recherches actuelles s'intéressent à l'impact de la torsion d'un guide (plus précisément, un tube de section non circulaire) et à l'impact d'une déformation mêlant courbure et torsion, pour plus de détail et une revue des résultats voir [39]. De très nombreux résultats ont été publiés au sujet des effets de la limite simultanée du diamètre du guide qui tend vers zéro et du support de la déformation (courbure ou torsion) qui tend vers zéro, mais aussi il a été considéré ce problème dans différentes circonstances, comme des conditions de bords diverses par exemple, voir [39] ainsi que [63].

Soit $\Omega_0 := \mathbb{R} \times \omega \subset \mathbb{R}^3$ un tube "droit" de section non circulaire $\omega \subset \mathbb{R}^2$ et soit Ω_θ un tube localement torsadé d'un angle total θ, voir Fig.1. Dans [39], il est observé qu'en comparaison avec les effets de courbure, la torsion produit une interaction effective *répulsive* pour l'opérateur de Schrödinger à une particule $-\Delta_D^{\Omega_\theta}$ restreint à Ω_θ par des conditions au bords de Dirichlet.

Cette section est tirée d'un papier [31] et est motivé par le problème des guides d'onde torsadés et s'inspire fortement et essentiellement des études récentes sur l'inégalité de Hardy. Cette inégalité est utile pour l'analyse du comportement dans la limite des temps longs des semi-groupes de la chaleur pour cette catégorie de guides d'onde, voir [40], [41]. Après la première étape qui consiste en la construction d'une transformation permettant de passer du guide torsadé au guide droit non déformé Ω_0. L'ingrédient principal de cette analyse est la transformation " self-similaire". Cette transformation induit l'utilisation des espaces de Sobolev à poids. Ces deux étapes permettent de réduire le problème du comportement pour des temps longs à celui de la convergence de la famille d'opérateurs de Schrödinger du type :

$$\widehat{H}_s := -\nabla \cdot \widehat{\sigma}_s(x_1) \nabla + \frac{1}{16} x_1^2 - E_1(s), \quad \text{sur} \quad L^2(\Omega_{\theta=0}) \,, \tag{5.6}$$

lorsque le temps self-similaire $s \to \infty$. Ici (x, s) sont les coordonnées self-similaire dans $\Omega_0 \times (0, \infty)$ et x_1 est la coordonnée le long de l'axe principal. On note $E_1(s)$ l'état d'énergie fondamental pour la partie transverse de l'opérateur $\widehat{H}_s + E_1(s)$ dans l'espace de Sobolev à poids correspondant à $L^2(\Omega_0, K(x_1) dx_1 dx_2 dx_3)$, avec $K(z) = \exp(z^2/4)$, voir [40]. La dépendance

en s permet la correspondance entre la limite $s \to \infty$ et la limite simultanée du diamètre du tube et du support de la déformation qui tendent vers zéro. Cela correspond aussi à l'apparition d'effet répulsifs. Cela implique la convergence forte au sens des résolvantes de l'opérateur (5.6) vers un oscillateur harmonique uni-dimensionnel avec conditions de Dirichlet en $x_1 = 0$, voir [39] et [40], [41].

Le but de ce travail est plutôt réduit. En effet, on propose une technique alternative à l'étude de la contraction d'un oscillateur de type (5.6). La méthode utilisée permet de montrer la convergence vers la même limite mais dans la topologie de la norme résolvante.En particuliers, cela permet d'établir le taux de convergence.

Cette partie est organisée comme suit : dans la Section 2 on rappelle l'origine de l'opérateur (5.6) avec un peu plus de détails, et on formule le théorème principal. La preuve contient essentiellement trois étapes. La première (Section 3) découle de la technique d'approximation de l'opérateur de Schrödinger à une particule associé au guide tri-dimensionnel torsadé par l'opérateur de Schrödinger tri-dimensionnel avec un potentiel de la forme d'un oscillateur anisotropique. Dans la Section 4 on compare la résolvante de ce modèle avec potentiel anisotropique avec la résolvante effective de la projection de cet opérateur sur l'espace unidimensionnel. Finalement on propose une démonstration (inspirée par le papier [11]) pour prouver la convergence en norme de résolvante de cet opérateur vers un opérateur harmonique uni-dimensionnel avec conditions aux bords de Dirichlet en $x_1 = 0$.

5.3 Introduction du modèle et théorème principal

Soit $\Omega_0 := \mathbb{R} \times \omega$ un tube droit d'axe principal $\mathbb{R}$, de section non circulaire, et qui est un espace connecté, ouvert et borné noté $\omega \subset \mathbb{R}^2$. Soit Ω_θ le tube *localement torsadé* correspondant, avec le même axe principal $\mathbb{R}$. Cela signifie que l'on permet à ω les rotations d'un angle (non-constant) $\theta : x_1 \mapsto \theta(x_1)$ le long de l'axe principal $\mathbb{R}$ avec variation de la coordonnée x_1. On suppose que la torsion est *lisse* et locale,c'est-à-dire que la dérivée $\dot{\theta}(x_1)$ est une fonction lisse de C^1avec *support compact* sur $\mathbb{R}$, voir Figure 1.

Comme l'on a choisi $x := (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ comme étant l'axe principal, on appellera x_1 la coordonnée "longitudinale" et $x' = (x_2, x_3)$ les coordonnées "transverses" dans le repère associé aux tubes Ω_0 et Ω_θ. On appelle $\mathcal{L}_\theta : \Omega_0 \to \Omega_\theta$ la transformation qui permet de passer du tube torsadé au tube droit. Elle est définie par la fonction

$$\mathcal{L}_\theta(x) := (x_1, x_2 \cos\theta(x_1) + x_3 \sin\theta(x_1), -x_2 \sin\theta(x_1) + x_3 \cos\theta(x_1)) \, .$$

Dans Ω_0 et Ω_θ, c'est-à-dire dans les espaces $L^2(\Omega_0)$ et $L^2(\Omega_\theta)$, on considère (*moins*) le Laplacien de Dirichlet et on note les opérateurs correspondants $-\Delta_D^{\Omega_0}$ t $-\Delta_D^{\Omega_\theta}$.

Dans le cas d'un tube localement torsadé, on a une rotation locale des coordonnées, et cette rotation dépend de x_1. Elle transforme le tube torsadé Ω_θ en le tube droit Ω_0.For the case of the straight tube twisting $\mathcal{L}_\theta$ there is an x_1-dependent local rotation of Soit $V_\theta : L^2(\Omega_\theta) \to L^2(\Omega_0)$ la représentation unitaire de cette transformation. Ainsi, la transformation unitaire du Laplacien de Dirichlet torsadé $-\Delta_D^{\Omega_\theta}$ prend la forme [39], [40] :

$$H_\theta := V_\theta(-\Delta_D^{\Omega_\theta})V_\theta^{-1} = -(\partial_1 - \dot{\theta}\partial_\tau)^2 - \Delta' \, , \quad \text{with} \quad dom(H_\theta) \subset L^2(\Omega_0) \, . \tag{5.7}$$

La forme quadratique associée à l'Hamiltonien H_θ est

$$\mathcal{Q}_\theta[\psi] := ||\partial_1\psi - \dot{\theta}\partial_\tau\psi||^2_{L^2(\Omega_0)} + ||\nabla'\psi||^2_{L^2(\Omega_0)} \, , \tag{5.8}$$

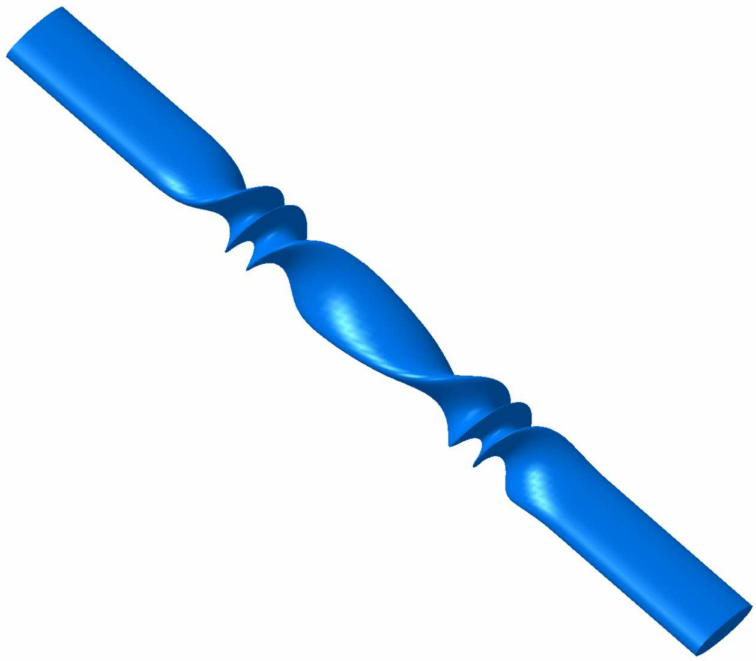


FIGURE 5.1: Un guide d'onde de section non circulaire avec une torsion locale

avec pour domaine $dom(\mathcal{Q}_\theta) = W_0^{1,2}(\Omega_0)$, qui est l'espace de Sobolev dans $L^2(\Omega_0)$. Soit $\nabla' := (\partial_2, \partial_3)$ le gradient transverse dans ω, i.e. $\Delta' := (\partial_2^2 + \partial_3^2)_D$ est le Laplacien de Dirichlet dans $L^2(\omega)$, et correspondant à la *section* ω du tube. Quant à l'opérateur

$$\partial_\tau := \tau \cdot \nabla' = x_3\partial_2 - x_2\partial_3 \ , \quad \text{pour le vecteur} \quad \tau = (x_3, -x_2) \ ,$$

c'est la dérivée angulaire dans $\mathbb{R}^2 \supset \omega$.

Afin de décrire la limite de (5.7), lorsque le diamètre du guide d'onde et, *simultanément* le support de la torsion tendent vers zéro, on utilise à la place de la paramétrisation à l'aide du temps auto-similaire, (voir[40], Ch.1.2, IV) la famille décrite ci-dessous d'opérateurs pour lesquels on a effectué une *transformation d'échelle*.

Soit U_ε la transformation unitaire agissant comme suit $(U_\varepsilon\psi)(x) := \sqrt{\varepsilon}\,\psi(\varepsilon\, x_1, x_2, x_3)$, pour $\varepsilon > 0$, et on introduit la famille d'opérateurs "*à l'échelle*" $\hat{H}_{\varepsilon,\theta}$:

$$\hat{H}_{\varepsilon,\theta} = \varepsilon^2 U_\varepsilon^* H_\theta U_\varepsilon = -(\partial_1 - \sigma_\varepsilon\partial_\tau)^2 - \frac{1}{\varepsilon^2}\,\Delta' \ , \quad \text{in} \quad L^2(\Omega_0). \tag{5.9}$$

Ici, $\hat{H}_{\varepsilon,\theta}$ est associé à la forme quadratique

$$\widehat{\mathcal{Q}}_{\varepsilon,\theta}[\psi] := ||\partial_1\psi - \sigma_\varepsilon\partial_\tau\psi||^2_{L^2(\Omega_0)} + \frac{1}{\varepsilon^2}||\nabla'\psi||^2_{L^2(\Omega_0)} \ , \tag{5.10}$$

dont le domaine est $dom(\widehat{\mathcal{Q}}_{\varepsilon,\theta}) = W_0^{1,2}(\Omega_0)$ et $\sigma_\varepsilon(\cdot) := \varepsilon^{-1}\,\dot{\theta}(\cdot/\varepsilon)$. Ainsi, le support de la torsion décroit lorsque $\varepsilon \to 0$, et $\sigma_\varepsilon(\cdot)$ devient *singulière* sur la section $\{x_1 = 0\} \times \omega$. Formellement, on

peut mettre en évidence cette singularité en remarquant qu'au sens des distributions, la limite $\lim_{\varepsilon\to 0}\sigma_\varepsilon(\cdot)$ existe et coïncide avec $(\theta(+\infty)-\theta(-\infty))\ \delta_0(\cdot)$, où $\delta_0(\cdot)$ est le symbole de Dirac dont le support est en $x_1=0$. Comme on le verra par la suite, on traîtera de singularité plus forte dues au terme $\sigma_\varepsilon^2(\cdot)$.

Soit $E_1>0$ la première valeur propre de l'opérateur $(-\Delta')$ sur la section ω. Ainsi, en vertu de (5.10)le terme E_1/ε^2 est la borne inférieure (et *l'infimum* du spectre) de l'opérateur (5.9). Cette borne croît lorsque $\varepsilon\to 0$ avec un taux correspondant *simultanément* au rétrécissement du support de la torsion et du diamètre du guide.

Suivant la stratégie de [39]-[41], l'étape suivante consiste en la recherche de l'opérateur (5.7) dans l'espace de Sobolev naturel $W_0^{1,2}(\Omega_0,K(x)dx)$ correspondant à $\mathcal{H}_k:=L^2(\Omega_0,K^k(x)dx)$ pour $k=1$, où $K(x)=\exp(x_1^2/4)$, voir [40] paragraphe 5.3. L'avantage de cette approche réside dans le fait que dans l'espace $\mathcal{H}_1$ (au lieu de $\mathcal{H}_0$) l'opérateur correspondant, (5.9), possède une résolvante compacte. En effet, on considère la transformation $\mathcal{U}_K:\mathcal{H}_0\to\mathcal{H}_1$ définie par

$$(\mathcal{U}_K\phi)(x):=(K^{1/2}\phi)(x)=e^{x_1^2/8}\ \phi(x_1,x_2,x_3)\ ,$$

et l'opérateur $H_{\varepsilon,\theta}:=\mathcal{U}_K\ \hat{H}_{\varepsilon,\theta}\ \mathcal{U}_K^{-1}$. Ainsi l'opérateur (5.9) de *domaine* dans l' *espace à poids* $W_0^{1,2}(\Omega_0,K(x)dx)$ est unitaire et équivalent à

$$H_{\varepsilon,\theta}=-(\partial_1-\sigma_\varepsilon\partial_\tau)^2-\frac{1}{\varepsilon^2}\ \Delta'+\frac{x_1^2}{16},\quad \text{dans}\quad \mathcal{H}_0=L^2(\Omega_0)\ , \tag{5.11}$$

qui est l'opérateur auto-adjoint associé à la forme quadratique suivante :

$$\mathcal{Q}_{\varepsilon,\theta}[\psi]:=||\partial_1\psi-\sigma_\varepsilon\partial_\tau\psi||^2_{L^2(\Omega_0)}+\frac{1}{\varepsilon^2}||\nabla'\psi||^2_{L^2(\Omega_0)}+\frac{1}{16}||x_1\psi||^2_{L^2(\Omega_0)}\ . \tag{5.12}$$

En outre, le potentiel harmonique dans la direction x_1, ainsi que le Laplacien de Dirichlet Δ' dans la section ω et dont le spectre discret est $Sp(-\Delta')=\{0<E_1<E_2\leq E_3\leq\ldots\}$, constitue le spectre total $Sp(H_{\varepsilon,\theta})$ de l'opérateur (5.11), spectre *purement ponctuel* et croissant à l'infini. Cela renforce la déclaration de la compacité de la résolvante de l'opérateur (5.11).

L'astuce qui consiste à passer à l'espace pondéré $\mathcal{H}_1$ est très importante pour la troisième étape de la preuve du théorème principal 5.3.1.

On note que le rétrécissement ($\varepsilon\to 0$) de la section ω provoque, via l'operateur transverse $(-\Delta'/\varepsilon^2)$ le déplacement vers l'infini de $E_n/\varepsilon^2\to\infty$ ainsi que le déplacement vers l'infini de tout le spectre $Sp(H_{\varepsilon,\theta})$. Ainsi, afin de donner un sens à la limite de la résolvante (5.11), on a besoin d'étudier la résolvante déplacée :

$$R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_{\varepsilon,\theta}):=(H_{\varepsilon,\theta}-E_1/\varepsilon^2+1)^{-1}\ , \tag{5.13}$$

qui est bien défini puisque dans (5.12) on a $H_{\varepsilon,\theta}-E_1/\varepsilon^2+1>1$ uniformément en $\varepsilon>0$.

Afin de pouvoir énoncer le théorème principal, on introduit à partir de l'opérateur (5.11), l'opérateur $h_0>0$ du type oscillateur harmonique *uni-dimensionnel* :

$$h_0:=-\frac{d^2}{dx_1^2}+\frac{x_1^2}{16}\ ,\quad \text{dans}\quad L^2(\mathbb{R})\ . \tag{5.14}$$

On introduit aussi $h_0^D>h_0$ défini de manière analogue à h_0, mais avec *une condition de Dirichlet* supplémentaire en $x_1=0$:

$$dom((h_0^D)^{1/2}):=\{u\in dom((h_0)^{1/2}):u(x_1=0)=0\}\ . \tag{5.15}$$

Le but de cette section est de comparer au sens de la norme de résolvante l'opérateur *décalé* $H_{\varepsilon,\theta} - E_1/\varepsilon^2$ and h_0^D . C'est ce qui fait la différence entre ce travail et le résultat de [39]-[41]. Dans ces papiers, la convergence est établie au *sens fort* des résolvante pour $\varepsilon \to 0$.

Puisque les opérateurs $H_{\varepsilon,\theta} - E_1/\varepsilon^2$ et h_0^D agissent dans des espaces *différents* on doit décomposer l'espace $\mathcal{H}_0 = L^2(\Omega_0)$ en la somme orthogonale suivante :

$$\mathcal{H}_0 = \mathfrak{H}_1 \oplus \mathfrak{H}_1^{\perp} \, . \tag{5.16}$$

On note $\mathfrak{H}_1 := \{u \otimes \mathcal{J}_1 : u(x_1) \in L^2(\mathbb{R}),\ \mathcal{J}_1(x') : (-\Delta')\mathcal{J}_1 = E_1\mathcal{J}_1 \, , x' = (x_2, x_3)\}$. Grâce à cette décomposition, on obtient

$$\begin{aligned} &(H_{\varepsilon,\theta} - E_1/\varepsilon^2 + 1)\, u \otimes \mathcal{J}_1 = \\ &[-(\partial_1 \otimes I - \sigma_\varepsilon \otimes \partial_\tau)^2 - I \otimes \frac{1}{\varepsilon^2}\,(\Delta' + E_1 - 1) + \frac{x_1^2}{16} \otimes I]\, u \otimes \mathcal{J}_1 = \\ &[-(\partial_1 \otimes I - \sigma_\varepsilon \otimes \partial_\tau)^2 + (x_1^2/16 + 1) \otimes I]\, u \otimes \mathcal{J}_1 \, , \end{aligned} \tag{5.17}$$

et on a, dans $\mathfrak{H}_1^{\perp}$, l'estimation suivante :

$$\begin{aligned} &(v \otimes \mathcal{J}_{n>1}, ((E_n - E_1)/\varepsilon^2 + 1)\, v \otimes \mathcal{J}_{n>1})_{\mathfrak{H}_1^{\perp}} \leq \\ &(v \otimes \mathcal{J}_{n>1}, (H_{\varepsilon,\theta} - E_1/\varepsilon^2 + 1)\, v \otimes \mathcal{J}_{n>1})_{\mathfrak{H}_1^{\perp}} \ . \end{aligned} \tag{5.18}$$

Cette décomposition permet de construire une extension adaptée à la résolvante $\widehat{R}_{(z=-1)}(h_0^D) := (h_0^D + 1)^{-1}$ (définie à la base dans $L^2(\mathbb{R})$) dans l'espace complet $\mathcal{H}_0$. Par la suite, on appellera cette *extension* $R_z(h_0^D)$.

Dans le but d'obtenir cette extension, on remarque que l'opérateur $(h_0^D + 1) \otimes I$ est inversible dans $\mathfrak{H}_1$. Ainsi, cette inversion se prolonge par l'opérateur *zero* noté $0^{\perp}$ dans $\mathfrak{H}_1^{\perp}$. On définit :

$$R_{(z=-1)}(h_0^D) := (h_0^D + 1)^{-1} \otimes I \oplus 0^{\perp} \, . \tag{5.19}$$

La motivation de cette extension provient de (5.16) et (5.18) car lorsque $\varepsilon \to 0$ la résolvante (5.13) converge vers l'opérateur *zéro* $0^{\perp}$ dans $\mathfrak{H}_1^{\perp}$.

A présent, on peut présenter le résultat principal de cette partie.

Théorème 5.3.1. *Soit Ω_θ le tube torsadé avec $\dot{\theta} \in C_0^1(\mathbb{R})$ c'est-à-dire $\ddot{\theta}$ borné. Alors,*

$$\| (H_{\varepsilon,\theta} - E_1/\varepsilon^2 + 1)^{-1} - \left[(h_0^D + 1)^{-1} \otimes I \oplus 0^{\perp} \right] \| = O(\varepsilon) \, , \tag{5.20}$$

pour $\varepsilon \to 0$.

Remarque 5.3.2. *En suivant la décomposition (6.27) on divise la preuve du Théorème en plusieurs parties. Pour cela, on introduit dans $\mathfrak{H}_1 \oplus \mathfrak{H}_1^{\perp}$ l'opérateur intermédiaire :*

$$\begin{aligned} H_0^{\varepsilon} \ &:= \ [-(\partial_1^2 + \frac{x_1^2}{16} + C_\omega \sigma_\varepsilon^2) \otimes I + I \otimes (-\Delta')/\varepsilon^2] \\ &=: \ h_\varepsilon \otimes I + I \otimes \frac{1}{\varepsilon^2} \bigoplus_{n=1}^{\infty} E_n \, P_n \, , \end{aligned} \tag{5.21}$$

où $C_\omega := ||\partial_\tau \mathcal{J}_1||^2_{L^2(\omega)}$ et $P_n := (\mathcal{J}_n, \cdot)\, \mathcal{J}_n$ sont les projecteurs orthogonaux sur les modes transverses $\mathcal{J}_n$, $n = 1, 2, 3, \ldots$.

On note $R_z(H_0^{\varepsilon}) := (H_0^{\varepsilon} - z\, I \otimes I)^{-1}$ sa résolvante au point z dans l'ensemble résolvent et on note $\mathcal{Q}_0^{\varepsilon}$ la forme sesquilinéaire associée à H_0^{ε}.

Remarque 5.3.3. *Puisque l'opérateur* $(h_\varepsilon + 1) \otimes I$ *est inversible dans* $\mathfrak{H}_1$*, alors, de manière analogue à (5.19) on définit la résolvante*

$$R_{(z=-1)}(h_\varepsilon) := (h_\varepsilon + 1)^{-1} \otimes I \oplus 0^\perp \,. \tag{5.22}$$

On remarque qu'en utilisant (5.17) et (5.21), la différence des résolvantes que l'on peut récrire comme suit :

$$R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_{\varepsilon,\theta}) - R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon) = R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_{\varepsilon,\theta})\,(H_0^\varepsilon - H_{\varepsilon,\theta})\,R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon)\,, \tag{5.23}$$

est finie dans $\mathfrak{H}_1$ et tend vers zéro (lorsque $\varepsilon \to 0$) dans $\mathfrak{H}_1^\perp$, voir (5.18). Ainsi, la *première étape* consiste à comparer les opérateurs (5.11) et (5.21).

Puisque de manière analogue à (5.18) la résolvante $R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon)$ converge lorsque $\varepsilon \to 0$ vers l'opérateur *zero* $0^\perp$ dans $\mathfrak{H}_1^\perp$, la *deuxième étape* sera la comparaison (au sens propre) de l'opérateur complet (5.21) avec l'opérateur $h_\varepsilon \otimes I$ agissant dans $\mathfrak{H}_1$ et que l'on définit à l'aide de la résolvante (5.22) comme "infini" dans le sous-espace complémentaire $\mathfrak{H}_1^\perp$.

La *troisième étape* consiste à prouver la convergence au sens de la norme résolvante des opérateurs h_ε et h_0^D, ce qui se réduit en fait à une analyse dans $L^2(\mathbb{R})$ et à l'utilisation d'une technique due à [11].

5.4 Preuves

Comme il est expliqué à la fin de la Section 2, la preuve du Theorem 5.3.1 est divisée en trois partie et pour démontrer ce théorème, on utilise l'opérateur intermédiaire (5.21) et l'opérateur $h_\varepsilon \otimes I$ que l'on a introduit via la définition (5.22). On insère les résolvantes $R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon)$ et $R_{(z=-1)}(h_\varepsilon)$ dans la limite (5.20) de la manière suivante :

$$\begin{aligned}&||R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_{\varepsilon,\theta}) - R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon) + + R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon) - R_{(z=-1)(h_\varepsilon)} + \\ &R_{(z=-1)}(h_\varepsilon) - R_{(z=-1)}(h_0^D)||\end{aligned}$$

De cette manière, la norme d'opérateur de la différence des résolvantes (5.20) est bornée par les trois termes suivants :

$$\begin{aligned}&||R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_{\varepsilon,\theta}) - R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon)|| + ||R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon) - R_{(z=-1)}(h_\varepsilon)|| + \\ &\|R_{(z=-1)}(h_\varepsilon) - R_{(z=-1)}(h_0^D)||.\end{aligned} \tag{5.24}$$

A présent, on les estime séparément dans les trois étapes qui vont suivre.

5.4.1 Première étape : estimation de (5.23)

Premièrement, on estime la norme d'opérateur de la différence (5.23). Pour cela, on compare les formes quadratiques $\mathcal{Q}_{\varepsilon,\theta}$ (voir (5.12)) et $\mathcal{Q}_0^\varepsilon$ et on démontre que la différence $m_\varepsilon := \mathcal{Q}_0^\varepsilon - \mathcal{Q}_{\varepsilon,\theta}$ tend vers zéro lorsque ε tend vers zéro. Ce résultat permet de réduire le problème à l'analyse de l'opérateur intermédiaire (5.21) ou bien de la forme quadratique $\mathcal{Q}_0^\varepsilon$.

Dans ce but, on note $\phi, \psi \in \mathcal{H}_0 = L^2(\Omega_0)$ les solutions de l'équation :

$$F = (H_{\varepsilon,\theta} - E_1/\varepsilon^2 + 1)\phi, \quad G = (H_0^\varepsilon - E_1/\varepsilon^2 + 1)\psi, \quad F, G \in \mathcal{H}_0 \,. \tag{5.25}$$

On obtient alors pour la différence des résolvantes (5.23) la représentation :

$$(F, \left(R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_{\varepsilon,\theta}) - R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon)\right) G) = \mathcal{Q}_0^\varepsilon - \mathcal{Q}_{\varepsilon,\theta} = m_\varepsilon(\phi,\psi)\ , \tag{5.26}$$

où, la forme sesquilinéaire $m_\varepsilon(\phi,\psi)$ est explicitement donné par

$$m_\varepsilon(\phi,\psi) = (\phi, C_\omega \sigma_\varepsilon^2 \psi) + (\partial_1\phi, \sigma_\varepsilon \partial_\tau \psi) + (\sigma_\varepsilon \partial_\tau \phi, \partial_1 \psi) - (\partial_\tau \phi, \sigma_\varepsilon^2 \partial_\tau \psi). \tag{5.27}$$

Lemme 5.4.1. *Lorsque $\varepsilon \to 0$ la forme sesquilinéaire* (5.27) *s'estime de la manière suivante :*

$$|m_\varepsilon(\phi,\psi)| \leq\ \varepsilon\, C_m\, ||F||_{\mathcal{H}_0} ||G||_{\mathcal{H}_0}, \quad F, G \in \mathcal{H}_0\ , \tag{5.28}$$

où $C_m > 0$ est une constante dépendant des solutions ϕ, ψ de (5.25).

Preuve. Suivant la décomposition (6.27) on représente les fonctions $\psi, \phi \in \mathcal{H}_0$ par $\psi = \psi_1 \oplus \psi_1^\perp$ et $\phi = \phi_1 \oplus \phi_1^\perp$, where $\psi_1, \phi_1 \in \mathfrak{H}_1$ et $\psi_1^\perp, \phi_1^\perp \in \mathfrak{H}_1^\perp$. On obtient alors

$$m_\varepsilon(\phi,\psi) = m_\varepsilon(\phi_1,\psi_1) + m_\varepsilon(\phi_1^\perp,\psi_1^\perp) + m_\varepsilon(\phi_1,\psi_1^\perp) + m_\varepsilon(\phi_1^\perp,\psi_1). \tag{5.29}$$

Premièrement, on montre que $m_\varepsilon(\phi_1,\psi_1) = O(\varepsilon)$ et $m_\varepsilon(\phi_1^\perp,\psi_1^\perp) = O(\varepsilon)$. Pour cela, on utilise (5.27) afin d'écrire explicitement

$$m_\varepsilon(\phi_1,\psi_1) = (\phi_1, C_\omega \sigma_\varepsilon^2 \psi_1) - (\partial_\tau \phi_1, \sigma_\varepsilon^2 \partial_\tau \psi_1) + (\partial_1 \phi_1, \sigma_\varepsilon \partial_\tau \psi_1) + (\sigma_\varepsilon \partial_\tau \phi_1, \partial_1 \psi_1)\ . \tag{5.30}$$

Pour calculer les deux premiers termes du membre de droite de (5.30) on utilise la définition de C_ω et le fait que $\phi_1 = u(x_1) \otimes \mathcal{J}_1(x')$ and $\psi_1 = v(x_1) \otimes \mathcal{J}_1(x')$, où $\mathcal{J}_1$ est normalisé à un. On obtient alors que ces termes s'annulent :

$$\begin{aligned}&(\phi_1, C_\omega \sigma_\varepsilon^2 \psi_1) - (\partial_\tau \phi_1, \sigma_\varepsilon^2 \partial_\tau \psi_1) = \\ &C_\omega \int_{\mathbb{R}} \sigma_\varepsilon^2(x_1) \overline{u}(x_1) v(x_1) dx_1 \int_\omega |\mathcal{J}_1(x')|^2 dx' - \int_{\mathbb{R}} \sigma_\varepsilon^2(x_1) \overline{u}(x_1) v(x_1) dx_1\ ||\partial_\tau \mathcal{J}_1||^2_{L^2(\omega)}\ .\end{aligned} \tag{5.31}$$

Afin d'estimer les deux derniers termes dans le membre de droite de (5.30) on utilise les équations (5.25). En particulier, cela implique que $\sigma_\varepsilon^2(x_1) u(x_1) \in L^2(\mathbb{R})$, ou bien :

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon^4} (\dot\theta(x_1/\varepsilon))^4 |u(x_1)|^2 dx_1 = \frac{1}{\varepsilon^3} \int_{\mathbb{R}} (\dot\theta(y))^4 |u(\varepsilon y)|^2 dy < C_u\ . \tag{5.32}$$

Les hypothèses faites sur $\dot\theta$ permettent aux solutions des équations (5.25) d'avoir pour asymptotiques

$$u(\varepsilon y) = O(\varepsilon^{3/2}) \ \text{ for } \ \varepsilon \to 0 \ \text{ and } \ y \in K \subset \mathbb{R}\ . \tag{5.33}$$

Ainsi, afin d'estimer le troisième terme du membre de droite de (5.30) on utilise (5.33). Il vient :

$$\begin{aligned}&|(\partial_1 \phi_1, \sigma_\varepsilon \partial_\tau \psi_1)| = \left| \int_{\mathbb{R}} \partial_1 \overline{u}(x_1) \frac{1}{\varepsilon}\, \dot\theta(x_1/\varepsilon)\ v(x_1) dx_1 \int_\omega \mathcal{J}_1(x') \partial_\tau \mathcal{J}_1(x') dx' \right| \leq \\ &C_\omega \|\partial_1 u\|_{L^2(\mathbb{R})} \left\{ \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon} (\dot\theta(y))^2 |v(\varepsilon y)|^2 dy \right\}^{1/2} \leq O(\varepsilon)\ C_\omega \|\partial_1 u\|_{L^2(\mathbb{R})} \left\{ \int_{\mathbb{R}} (\dot\theta(y))^2 dy \right\}^{1/2}.\end{aligned} \tag{5.34}$$

En vertu de (5.25) on a $\partial_1 u \in L^2(\mathbb{R})$, et l'inégalité (5.34) implique l'estimation : $|(\partial_1\phi_1, \sigma_\varepsilon\partial_\tau\psi_1)| = O(\varepsilon)$. De manière analogue, on obtient l'estimation $(\sigma_\varepsilon\partial_\tau\phi_1, \partial_1\psi_1) = O(\varepsilon)$. Cela permet d'avoir : $m_\varepsilon(\phi_1, \psi_1) = O(\varepsilon)$.

On montre que $m_\varepsilon(\phi_1^\perp, \psi_1^\perp) = O(\varepsilon)$par des calculs similaires. En effet, on a la représentation :

$$m_\varepsilon(\phi_1^\perp, \psi_1^\perp) = (\phi_1^\perp, C_\omega\sigma_\varepsilon^2\psi_1^\perp) - (\partial_\tau\phi_1^\perp, \sigma_\varepsilon^2\partial_\tau\psi_1^\perp) + (\partial_1\phi_1^\perp, \sigma_\varepsilon\partial_\tau\psi_1^\perp) + (\sigma_\varepsilon\partial_\tau\phi_1^\perp, \partial_1\psi_1^\perp).$$

Ainsi, de manière totalement similaire à (5.30) on obtient que les termes $|(\partial_1\phi_1^\perp, \sigma_\varepsilon\partial_\tau\psi_1^\perp)|$ et $|(\sigma_\varepsilon\partial_\tau\phi_1^\perp, \partial_1\psi_1^\perp)|$ sont d'ordre ε et que

$$(\phi_1^\perp, C_\omega\sigma_\varepsilon^2\psi_1^\perp) - (\partial_\tau\phi_1^\perp, \sigma_\varepsilon^2\partial_\tau\psi_1^\perp) = 0 \, .$$

A présent, on estime

$$m_\varepsilon(\phi_1, \psi_1^\perp) = (\sigma_\varepsilon\partial_\tau\phi_1, \partial_1\psi_1^\perp) - (\partial_\tau\phi_1, \sigma_\varepsilon^2\partial_\tau\psi_1^\perp) + (\partial_1\phi_1, \sigma_\varepsilon\partial_\tau\psi_1^\perp) + (C_\omega\sigma_\varepsilon^2\phi_1, \psi_1^\perp). \quad (5.35)$$

Puisque $\phi_1 = u \otimes \mathcal{J}_1$ and $\psi_1^\perp$ appartient à l'enveloppe linéaire de $\{v \otimes \mathcal{J}_s\}_{s>1}$, afin d'estimer le premier terme de (5.35) on considère :

$$(\sigma_\varepsilon\partial_\tau\phi_1, \partial_1\psi_1^\perp) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon}\, \dot\theta(x_1/\varepsilon)\, u(x_1)\partial_1 v(x_1)dx_1 \int_\omega \partial_\tau\mathcal{J}_1(x')\mathcal{J}_{s>1}(x')dx' \, . \quad (5.36)$$

On remarque que l'intégrale (5.36) coïncide (à de simples modifications près) avec l'intégrale dans (5.34). Cela mène ainsi à la même estimation, de l'ordre de ε. De manière similaire il vient pour le troisième terme dans (5.35) la représentation :

$$(\partial_1\phi_1, \sigma_\varepsilon\partial_\tau\psi_1^\perp) = \int_{\mathbb{R}} \partial_1 u(x_1)\frac{1}{\varepsilon}\, \dot\theta(x_1/\varepsilon)v(x_1)dx_1 \int_\omega \mathcal{J}_1(x')\partial_\tau\mathcal{J}_{s>1}(x')dx' \, , \quad (5.37)$$

ce qui implique que ce terme est aussi d'ordre $O(\varepsilon)$. Pour estimer le terme $(\partial_\tau\phi_1, \sigma_\varepsilon^2\partial_\tau\psi_1^\perp)$, on utilise les inégalités suivantes :

$$\begin{aligned}
|(\partial_\tau\phi_1, \sigma_\varepsilon^2\partial_\tau\psi_1^\perp)| &= \left| \int_{\mathbb{R}} u(x_1)\, \frac{1}{\varepsilon^2}(\dot\theta(x_1/\varepsilon))^2\, v_1(x_1)dx_1 \int_\omega \partial_\tau\mathcal{J}_1(x')\partial_\tau\mathcal{J}_{s>1}(x')\, dx' \right| \\
&\le C_\omega \left\{ \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon^2}(\dot\theta(x_1/\varepsilon))^2\, |u(x_1)|^2 dx_1 \right\}^{1/2} \left\{ \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon^2}(\dot\theta(x_1/\varepsilon))^2\, |v(x_1)|^2 dx_1 \right\}^{1/2} \\
&= C_\omega \left\{ \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon}(\dot\theta(y))^2\, |u(\varepsilon y)|^2 dy \right\}^{1/2} \left\{ \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon}(\dot\theta(y))^2\, |v(\varepsilon y)|^2 dy \right\}^{1/2} \\
&\le O(\varepsilon^2)\, C_\omega \, , \qquad (5.38)
\end{aligned}$$

où la dernière estimation découle de (5.32) et (5.33). Finalement, puisque ϕ_1 et $\psi_1^\perp$ appartiennent à des sous-espaces orthogonaux , on obtient pour le dernier terme $(C_\omega\sigma_\varepsilon^2\phi_1, \psi_1^\perp) = 0$.

On note que l'estimation de $m(\phi_1^\perp, \psi_1)$ est identique à celle de $m(\phi_1, \psi_1^\perp)$. En résumant, les estimations (5.34), (5.36), (5.37), and (5.38), on obtient une estimation de la forme (5.29) pour les solutions (5.25) en $O(\varepsilon)$. Puisque les équations (5.25) mènent aux estimations de ϕ, ψ par les normes $||F||_{\mathcal{H}_0}, ||G||_{\mathcal{H}_0}$, il vient (5.28). Cela permet d'achever la preuve du lemme 5.4.1. ∎

Remarque 5.4.2. *Par (5.26), (5.28) et en utilisant [30] et le théorème 1 du chapitre 4 de [55] (voir annexe 6.4) on obtient le taux de convergence de la norme d'opérateur de la différence des résolvantes (5.23) :*

$$\|R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_{\varepsilon,\theta}) - R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon)\| \le \varepsilon\, C_m \, . \quad (5.39)$$

5.4.2 Deuxième étape

En vertu des définitions de (5.21) et de (5.22) on obtient

$$\Lambda_\varepsilon := R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon) - R_{(z=-1)}(h_\varepsilon) = \tag{5.40}$$
$$[(h_\varepsilon+1)\otimes I + I\otimes \frac{1}{\varepsilon^2}\bigoplus_{n=2}^{\infty}(E_n-E_1)\,P_n]^{-1} - [(h_\varepsilon+1)^{-1}\otimes I \oplus 0^\perp]\,.$$

Puisque $P_{n>1} : \mathfrak{H}_1 \to 0$, il vient $\Lambda_\varepsilon\phi = 0$ for $\phi \in \mathfrak{H}_1$. Pour $\phi^\perp \in \mathfrak{H}_1^\perp$ on a :

$$\Lambda_\varepsilon\,\phi^\perp = [I\otimes \frac{1}{\varepsilon^2}\bigoplus_{n=2}^{\infty}(E_n-E_1)\,P_n]^{-1}\,\phi^\perp\,. \tag{5.41}$$

Ainsi, le second terme dans (5.24) s'estime de la manière suivante :

$$||R_{(E_1/\varepsilon^2-1)}(H_0^\varepsilon) - R_{(z=-1)(h_\varepsilon)}||_{\mathcal{H}_0=\mathfrak{H}_1\oplus\mathfrak{H}_1^\perp} \leq \varepsilon^2/(E_2-E_1)\,. \tag{5.42}$$

5.4.3 Troisième étape

On rappelle la définition de l'opérateur intermédiaire (5.21)

$$h_\varepsilon = -\partial_1^2 + \frac{x_1^2}{16} + C_\omega\sigma_\varepsilon^2$$

et on rappelle que l'opérateur h_0 a pour expression $-\partial_1^2 + \frac{x_1^2}{16}$ dans $L^2(\mathbb{R})$ et h_0^D est un opérateur analogue à h_0 plus une condition de Dirichlet supplémentaire à l'origine. On note

$$R_{k^2}(h_\varepsilon) := (h_\varepsilon - k^2)^{-1}, \quad R_{k^2}(h_0^D) := (h_0^D - k^2)^{-1}, \quad k^2 \notin \sigma(h_\varepsilon).$$

Cette troisième étape consiste en la démonstration du lemme suivant :

Lemme 5.4.3. *Soit h_ε h_0 and h_0^D les opérateurs dans $L^2(\mathbb{R})$ définis plus haut (voir* (5.14)*). On note $R(h_0) := (h_\varepsilon - k^2)^{-1}$, $R(h_0^D) := (h_0^D - k^2)^{-1}$. Alors, on a*

$$||R_{k^2}(h_\varepsilon) - R_{k^2}(h_0^D)|| = O(\varepsilon),$$

a. Lemme préliminaire

On va utiliser pleinement ici l'astuce qui consistait à changer d'espace et de passer à l'espace à poids $\mathcal{H}_1$. En effet, on se base sur la technique de [11] et il est nécessaire de connaitre le comportement de la résolvante au seuil des énergies. Or, la fonction de Green associée à l'opérateur h_0 (5.14) est connue explicitement et on va donc pouvoir étudier son comportement de manière directe.
On introduit les fonctions de Green associées aux résolvantes $R_{k^2}(h_0)$ et $R_{k^2}(h_0^D)$ comme étant les noyaux $R(h_0)(x,y,k^2)$ et $R(h_0^D)(x,y,k^2)$ respectivement Pour démontrer le lemme 5.4.3 on a besoin du lemme suivant :

Lemme 5.4.4. *Soit* $\boldsymbol{v}$ *un vecteur normalisé à 1 et, soient* P *et* Q *deux projecteurs tels que*

$$P = (.,\boldsymbol{v})\boldsymbol{v}, \quad Q = 1 - P, \quad \boldsymbol{v} \in L^2(\mathbb{R}), \quad \sup_{p\in\mathbb{R}} \widehat{V}(p) < \infty \tag{5.43}$$

Soit τ *l'opérateur de trace (et* $\tau^\star$ *son adjoint) aagissant comme suit*

$$\tau f(x,y) = f(0,y).$$

Alors
(i)

$$\lim_{\varepsilon\to 0} ||R(h_0)U_\varepsilon^\star \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} P \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} U_\varepsilon R(h_0) - R(h_0)\tau^\star\tau R(h_0)|| = 0$$

(ii)

$$\lim_{\varepsilon\to 0} ||R(h_0)U_\varepsilon^\star v \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} v U_\varepsilon R(h_0) - R(h_0)\tau^\star\tau R(h_0)|| = 0$$

(iii)

$$||R(h_0)U_\varepsilon^\star \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} Q|| = o(\varepsilon)$$

Preuve. Soit F la transfromée de Fourier et an F^{-1} son inverse. On rappelle que

$$(F\varphi)(p) = \widehat{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ipx}\varphi(x)dx, \quad (F^{-1}\varphi)(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ipx}\varphi(p)dp.$$

On effectue une série de calculs qui seront utiles par la suite :

$$(U_\varepsilon\varphi)(x) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\varphi(\frac{x}{\varepsilon}) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_{\mathbb{R}} \delta(\frac{x}{\varepsilon} - y)\varphi(y)dy$$

La transformée de Fourier d'un noyau X s'exprime comme suit :

$$(FXF^{-1}\varphi)(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-ipx} \int_{\mathbb{R}} dy\, X(x,y) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{iqy}\varphi(q)dq.$$

Ainsi, en notant $\widehat{U}_\varepsilon^\star(p,q) = \sqrt{2\pi}\delta(\varepsilon q - p)$ il vient

$$(FU_\varepsilon^\star F^{-1})(p) = \int_{\mathbb{R}} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{2\pi}} \delta(\varepsilon q - p)dq =: \int_{\mathbb{R}} \widehat{U}_\varepsilon^\star(p,q)dq. \tag{5.44}$$

On insère l'identité FF^{-1} entre les opérateurs $U_\varepsilon^\star$ et V, et l'on obtient

$$FU_\varepsilon^\star V F^{-1} = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{2\pi}} \widehat{V}(\varepsilon q) \tag{5.45}$$

Afin de démontrer le lemme 5.4.4, on utilise les propriétés de la transformation de Fourier du terme $R(h_0)U_\varepsilon^\star \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} P \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} U_\varepsilon R(h_0)$, $R(h_0)U_\varepsilon^\star v \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} v U_\varepsilon R(h_0)$ and $R(h_0)\tau^\star\tau R(h_0)$. Plus précisément, on utilise l'unitarité de la transformation de Fourier F et on insère l'identité FF^{-1} entre ces termes, on utilise (5.44) et (5.45), ainsi que le fait que $\int_{\mathbb{R}} \widehat{V}(\varepsilon s)ds = 1 = \sqrt{2\pi}\widehat{V}(0)$. On a alors les équivalences unitaires suivantes :

$$||R(h_0)U_\varepsilon^\star \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} P \frac{v}{\sqrt{\varepsilon}} U_\varepsilon R(h_0)|| = ||(\widehat{R(h_0)}, \frac{\widehat{V}(\varepsilon q)}{\sqrt{2\pi}})\widehat{R(h_0)}_0 \frac{\widehat{V}(\varepsilon q)}{\sqrt{2\pi}}||,$$

$$||R(h_0)\tau^\star\tau R(h_0)|| = ||(.\widehat{r}_0, \widehat{V}_0)\widehat{R(h_0)}_0\widehat{V}_0||, \tag{5.46}$$

où l'on a noté $\widehat{R(h_0)}_0$ la transformation de Fourier de la résolvante $R(h_0)$. ainsi que le fait que $\int_{\mathbb{R}} \widehat{V}(\varepsilon s)ds = 1 = \sqrt{2\pi}\widehat{V}(0)$.

Preuve de (i). On a uniquement besoin de montrer, voir (5.46) que $\lim_{\varepsilon\to 0} ||\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\widehat{R(h_0)}_0\widehat{V}(\varepsilon q) - \widehat{R(h_0)}_0\widehat{V}_0|| = 0$. $\widehat{V}(\varepsilon q)$ converge point par point vers $\widehat{V_0}$. En vertu de la condition (5.43) et parce que la résolvante $R(h_0)$ est compacte on déduit que $|\widehat{R(h_0)}_0(q)(\widehat{V}(\varepsilon q) - \widehat{V_0})|$ est intégrable en q. Ainsi $|\widehat{R(h_0)}_0(q)(\widehat{V}(\varepsilon q) - \widehat{V}_0)|^2$ est borné par une fonction intégrable en q. La preuve de (i) s'achève en utilisant la convergence dominée de Lebesgue, c'est-à-dire,

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{\mathbb{R}} dq|\widehat{r}_0(q)(\widehat{V}(\varepsilon q) - \widehat{V_0})|^2 = 0. \tag{5.47}$$

Preuve de(ii). Tout d'abord, on récrit $||R(h_0)U_\varepsilon^\star v\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}vU_\varepsilon R(h_0)||$ as $||\widehat{r}_0 FU_\varepsilon^\star\frac{V}{\varepsilon}U_\varepsilon F^{-1}\widehat{r}_0||$. On utilise la transformée de Fourier de $(FVF^{-1}\varphi)(p)$ given by $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} dq\,\varphi(q)\widehat{V}(p-q)$ et en développant le calcul, il vient $FU_\varepsilon^\star\frac{V}{\varepsilon}F^{-1} = \int_{\mathbb{R}}\widehat{V}(\varepsilon(s-q))dq$, ce qui fait que le noyau $\widehat{U_\varepsilon^\star V}(p,q)$ est donné par $\varepsilon^{-1/2}\widehat{U_\varepsilon^\star V}(p,q) = \widehat{V}(\varepsilon(p-q))$. Alors, montre la convergence suivante :

$$\lim_{\varepsilon\to 0}|\widehat{R(h_0)}(p)\left(\widehat{V}(\varepsilon(p-q)) - \widehat{V}_0\right)\widehat{R(h_0)}(p)| = 0$$

$\widehat{V}(\varepsilon(p-q))$ converge point par point vers $\widehat{V}_0$ et $|\widehat{R(h_0)}(p)\left(\widehat{V}(\varepsilon(p-q)) - \widehat{V}_0\right)\widehat{R(h_0)}(p)|$ est borné par une fonction intégrable. Comme précédemment, on utilise la convergence dominée de Lebesgue pour terminer la preuve du point (ii).

Preuve de (iii). On utilise encore une fois l'unitarité de la transformée de Fourier ainsi que l'égalité (5.46). On a les équivalences unitaires suivantes $||R(h_0)U_\varepsilon^\star\frac{v}{\sqrt{\varepsilon}}(1-P)\frac{v}{\sqrt{\varepsilon}}U_\varepsilon R(h_0)||$ et $||\widehat{r}_0 FU_\varepsilon^\star\frac{v}{\sqrt{\varepsilon}}(1-P)\frac{v}{\sqrt{\varepsilon}}U_\varepsilon F^{-1}\widehat{r}_0||$. On a besoin de montrer que ce terme est de l'ordre de $o(\varepsilon^2)$. A l'aide des même outils que précédemment, on exprime :

$$(\widehat{U_\varepsilon^\star VU_\varepsilon\varphi})(p,q) = \int_{\mathbb{R}}\widehat{V}(\varepsilon(p-q))\varphi(\varepsilon q)dq, \quad \text{and} \quad (\widehat{\Pi_\varepsilon\varphi})(p) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}}\widehat{V}(\varepsilon p)\widehat{V}(-\varepsilon q)\varphi(q)dq$$

So, the kernel $(F\Pi_\varepsilon F^{-1})(p,q)$ is given by $\widehat{V}(\varepsilon p)\widehat{V}(-\varepsilon q)$. Grâce aux hypothèses ur V on sait que $xV(x) \in L^1(\mathbb{R})$. On a alors besoin de montrer

$(a)\ \lim_{\varepsilon\to 0}|\dfrac{\widehat{V}(\varepsilon p)\widehat{V}(-\varepsilon q) - \widehat{V_0}\widehat{V}(\varepsilon(p-q))}{\varepsilon}| = 0$ almost everywhere

$(b)\widehat{R(h_0)}^2(p)(\dfrac{\widehat{\Pi}_\varepsilon(p,q) - \widehat{V_0}\widehat{V}(\varepsilon(p-q))}{\varepsilon})|^2\widehat{R(h_0)}^2(q)$ borné par une fonction intégrable en p et q

Afin de vérifier le point (a) on applique le théorème de la valeur moyenne, c'est-à-dire, puisque $\widehat{V}(\varepsilon p) = \widehat{V}(0) + \varepsilon p\ \widehat{V}'(\theta\varepsilon p),\ \forall\theta\in(0,1)$, alors

$$\begin{aligned}
&\widehat{V}(\varepsilon p)\widehat{V}(-\varepsilon q) - \widehat{V_0}\widehat{V}(\varepsilon(p-q)) = \\
&= (\widehat{V_0} + \varepsilon p\ \widehat{V}'(\theta\varepsilon p))(\widehat{V_0} - \varepsilon q\ \widehat{V}'(\theta\varepsilon q)) - (\widehat{V_0} + \varepsilon(p-q)\ \widehat{V}'(\theta\varepsilon(p-q)))\widehat{V_0} \\
&= \varepsilon(p-q)\left(\widehat{V}'(\theta\varepsilon p)\widehat{V}'(\theta\varepsilon q) - \widehat{V}'(\theta\varepsilon(p-q))\widehat{V_0}\right).
\end{aligned} \tag{5.48}$$

En insérant le résultat (5.48) dans la limite (a), on prouve ce premier point (a). $V^{'}(p)$ est intégrable en p et $\widehat{R(h_0)}^2(p)(p^\alpha q^\beta)\widehat{R(h_0)}^2(q)$ pour $0 \leq \alpha, \beta \leq 2$ est intégrable en p et q, donc le point (b) est satisfait. ∎

b. Preuve du lemme 5.4.3

Preuve. On rappelle que les fonctions de Green associée aux résolvantes $R_{k^2}(h_0)$ et $R_{k^2}(h_0^D)$ sont les noyaux $R(h_0)(x,y,k^2)$ et $R(h_0^D)(x,y,k^2)$ respectivement. En utilisant l'équation de la résolvante, $R(h_0^D)(x,y,k^2)$ prend l'expression suivante :

$$R(h_0^D)(x,y,k^2) = R(h_0)(x,y,k^2) - C_k R(h_0)(x,0,k^2)R(h_0)(0,y,k^2), \quad C_k := 1/r_0(0,0,k^2).$$

La fonction de Green $r_0(x,y,k^2)$ a pour expression

$$R(h_0)(x,y,k^2) = \sum_n \lambda_n^{-1}\psi_n(x)\psi_n(y), \quad \lambda_n = \alpha(n+\frac{1}{2}), \tag{5.49}$$

où l'on note

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{-x^2/32}H_n(x). \tag{5.50}$$

En utilisant l'équation symmétrisée de la résolvante, on exprime $R(h_\varepsilon)$ comme

$$R(h_\varepsilon) = R(h_0) - \frac{1}{\varepsilon^2}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}T(\varepsilon k)\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0), \tag{5.51}$$

où l'on appelle $T(\varepsilon k)$ le noyau suivant

$$T(\varepsilon k) = \left(1 + \frac{1}{\varepsilon^2}\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0)(k)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}\right)^{-1}. \tag{5.52}$$

Grâce à un changement de variables, on a

$$\varepsilon^{-2}U_\varepsilon R_{k^2}(h_0)U_\varepsilon^\star f = \int_{\mathbb{R}^2} R(h_0)(\varepsilon x, \varepsilon y, k^2)f(y)dx\ dy. \tag{5.53}$$

Dans un premier temps, on montre que l'on peut décomposer le noyau (5.52) en la somme de deux termes, t_0 et εt_1 que l'on définira plus bas, plus $t_{(2)}$,qui désigne les termes d'ordre supérieurs ou égal à ε^2. La partie la plus importante de la preuve réside dans le fait que la transformée de Fourier de $\varepsilon^{-1/2}R(h_0)U_\varepsilon^\star t_i^{1/2}, i = 0, 1, (2)$ est de l'ordre de $o(\varepsilon)$ ce qui a pour conséquence que les termes t_1 et $t_{(2)}$ ne contribuent pas dans la limite ε temps vers zéro. En effet, formellement, on a :

$$\int_{\mathbb{R}^2}\frac{1}{\varepsilon}R(h_0)(x,y,k^2)U_\varepsilon^\star f(y,z)dydz = \int_{\mathbb{R}^2} R(h_0)(\varepsilon x, \varepsilon y, k^2)f(y,z)dydz$$

qui tend vers $\int_{\mathbb{R}^2} R(h_0)(x,0,k^2)f(y,z)dydz$ lorsque ε tend vers zéro, alors que $\sqrt{V}t_0^{1/2}$ tend vers une constante.

Ainsi, on commence par montrer que $T(\varepsilon k)$ est inversible. Plus précisément, on récrit le noyau $1/\varepsilon^2 U_\varepsilon^\star R(h_0)(x,y,k^2)$ en utilisant l'équation

$$R(h_0)(x,y;k^2) = R(h_0)(0,0,k^2) + \vec{x}.\vec{\nabla}R(h_0)(0,0,k^2) + \vec{x}.\nabla^2 R(h_0)(0,0,k^2).\vec{x} + O(|x|^3)$$

et la définition de la fonction de Green, voir par exemple [37]. Il vient :

$$\vec{\nabla}R(h_0)(x,y,k^2) = \left\{ \begin{array}{ll} -\partial_x R(h_0)(x,y,k^2) + \partial_y R(h_0)(x,-y,k^2) & \text{if} \quad y \leq x \\ -\partial_x R(h_0)(-x,y,k^2) + \partial_y R(h_0)(x,y,k^2) & \text{if} \quad y > x \end{array} \right.$$

On a

$$\vec{x}.\vec{\nabla}R(h_0)(0,0,k^2) = \left(\partial_y R(h_0)(0,0,k^2) + \partial_x R(h_0)(0,0,k^2)\right)|x-y|.$$

Ce terme n'a *pas de singularité* pour k^2 proche de zéro et ce grâce aux propriétés (5.50). Puisque l'on a montrer que $R(h_0)(x,y,k^2) = a + b|x-y| + O(|x^2|), \quad a,b \in \mathbb{R}$, alors,

$$\sqrt{V}R(h_0)(\varepsilon x, \varepsilon y, k^2)\sqrt{V} = cP + \varepsilon M_1(x,y) + M_{(2)}(x,y),$$

où

$$P := \frac{(.,\sqrt{V})\sqrt{V}}{||V||}, \quad c := a||V||, \quad M_1(x,y) = b\sqrt{V}|x-y|\sqrt{V},$$

et $M_{(2)}(x,y,k) := \sqrt{V}R(h_0)(\varepsilon x, \varepsilon y, k^2)\sqrt{V} - cP - M_1 = O(|\varepsilon^2 x^2|)$. On remarque également que $\varepsilon M_1(x,y) = M_1(\varepsilon x, \varepsilon y)$.
En utilisant la formule de Taylor-Young et l'expression de la fonction de Green, voir (5.49) et (5.50) on obtient

$$M_1(\varepsilon x, \varepsilon y) = \sqrt{V}R(h_0)(\varepsilon x, \varepsilon y, k^2)\sqrt{V} - cP = o(1).$$

Le terme $\frac{1}{\varepsilon^2}\sqrt{V}U_\varepsilon r_0(k)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}$ dans (5.52) est $O(1)$ en ε et il en est donc de même pour $T(\varepsilon k)$. En effet,

$$(1+\sqrt{V}R(h_0)(\varepsilon x,\varepsilon y,k^2)\sqrt{V})^{-1} \quad = \quad (1+cP)^{-1}\left(1 - \varepsilon M_1(1+cP)^{-1} - M_{(2)}(1+cP)^{-1}\right).$$

En récrivant $(1+cP)^{-1}$ comme la somme $\sum_{k=0}^{\infty}(-cP)^k$, et en développant ce terme, on a $(1+cP)^{-1} = Q + c^{-1}P$. Ainsi, $T(\varepsilon k)$ se décompose comme la somme

$$T(\varepsilon k) = t_0 + \varepsilon t_1 + O(\varepsilon^2), \quad t_0 = Q + \frac{1}{c}P, \quad t_1 = (Q+\frac{1}{c}P)M_1(Q+\frac{1}{c}P). \qquad (5.54)$$

Dans l'étape suivante,on démontre les deux convergences suivantes :

$$\frac{1}{\varepsilon^2}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}t_0\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0) \to CR(h_0)(x,0,k^2)R(h_0)(0,y,k^2) \quad \text{and} \quad \frac{1}{\varepsilon}R(h_0)U_\varepsilon^2\sqrt{V}t_1\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0) \to 0.$$

On revient à (5.51) et (5.54), et on a

$$\begin{aligned} R(h_\varepsilon) &= R(h_0) - \frac{1}{\varepsilon^2}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}\left(t_0(k) + \varepsilon t_1(k) + O(\varepsilon^2 k^2)\right)\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0) \\ &= R(h_0) - \frac{1}{\varepsilon^2}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}\left(Q + \frac{P}{c} + \varepsilon(Q+\frac{P}{c})M_1(Q+\frac{P}{c}) + O(\varepsilon^2 k^2)\right)\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0) \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\|R(h_\varepsilon)-R(h_0)\| = \lim_{\varepsilon\to 0}||\frac{1}{\varepsilon^2}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}\frac{P}{c}\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0)||\frac{1}{R(h_0)(0,0,k^2)}R(h_0)\tau^\star\tau R(h_0).$$

En utilisant le point (iii) du lemme 5.4.4 et le fait que M_1 est borné, on a

$$||\varepsilon^{-2}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}Q\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0)||,$$

$$||\varepsilon^{-1}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}QM_1Q\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0)||$$

et

$$||\varepsilon^{-1}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}QM_1\frac{P}{c}\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0)||$$

tend vers zéro lorsque ε tend vers zéro. A l'aide du point (i) on montre que

$$||R(h_0) - \varepsilon^{-2}R(h_0)U_\varepsilon^\star\sqrt{V}P/c\sqrt{V}U_\varepsilon R(h_0)||$$

converge vers zéro et la preuve est faite. ∎

5.5 Remarques et conclusion

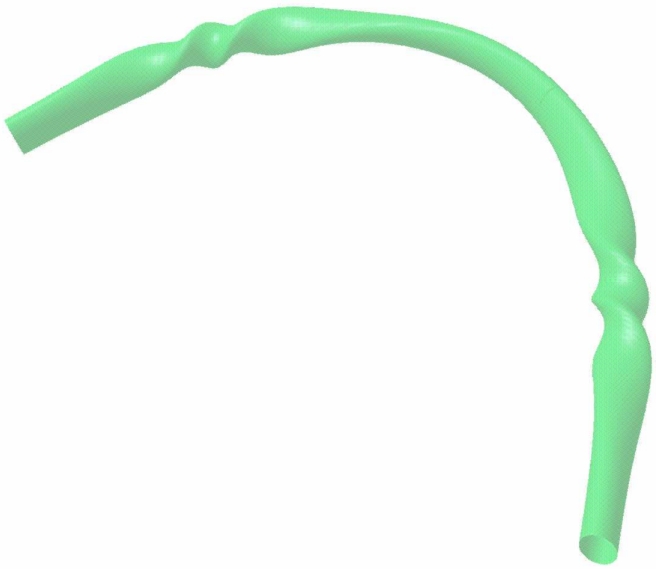


FIGURE 5.2: Un exemple de guide localement courbé et torsadé

Dans ce papier, on s'intéresse à la question de convergence au sens de la norme résolvante de l'Hamiltonien à une particule dans la limite du rétrécissement du guide d'onde et de la mise à l'échelle de la torsion. La question de la validité de la convergence en norme résolvante et l'idée de

cette partie et du papier associé (voir [31]) sont dû à Pierre Duclos et David Krejčiřík. Ce problème était explicitement résolu dans [42] puis traité dans le contexte des guides d'onde quantiques fins dans [63], sous des conditions de régularité différentes de celles étudiées ici.

La stratégie en trois étapes de la preuve présentée ici donne un taux de convergence de l'ordre de ε vers l'opérateur limite

Apparemment, il ne s'agit pas d'une estimation optimale. De plus, une des question ouverte est celle de la relaxation des conditions du théorème principal de cette section de manière à optimiser ce taux de convergence. Un des autres aspect consiste à comparer cette stratégie et ces conditions avec celles de [63]. La compétition entre la torsion et la courbure, voir la figure , est aussi une question ouverte qui mérite une attention spéciale. Des progrès dans cette direction ont été fait à l'aide de la technique de l'inégalité de Hardy voir [39] et semble être une bonne base pour étudier ce problème.

Chapitre 6

Annexes

6.1 Généralités

6.1.1 Guides d'onde : courbure, torsion, repère de Frenet

Dans cette section, on donne quelques généralités concernant les guides d'ondes quantiques et leur déformations ; on considère en particulier la torsion et la courbure. Pour cela on s'inspire fortement des papier [15] et [39].

Comme on l'a dit dans l'introduction, l'étude du Laplacien de Dirichlet dans un tube infini est un excellent modèle pour les structures de dimensions mésoscopiques telles les guides d'onde. L'étroite relation entre la géométrie du tube et le spectre du Laplacien de Dirichlet associé fait partie des principaux problèmes de géométrie spectrale.

Soit $s \mapsto \Gamma(s)$ une courbe (de référence) unitaire infinie dans $\mathbb{R}^3$. On appelle κ la courbure de Γ. C'est une fonction continue et paramétrée par la longueur d'arc $s \in \mathbb{R}$. Elle est définie par

$$\kappa := |\ddot{\Gamma}(s)|$$

On suppose que la courbe $\Gamma(s)$ est $C-$lisse et possède un repère de Frenet approprié. Ce repère est un repère mobile qui évolue le long de la courbe $\Gamma(s)$. Les vecteurs de la base de Frenet sont les $e_i, i = 1, 2, 3$, linéairement indépendant, positivement orientés et avec les propriétés suivantes :

(i) $e_1 = \dot{\Gamma}$,

(ii) $\forall i = 1, 2, 3, \quad e_i \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R}^2)$,

(iii) $e_1 := \dot{\Gamma}, \quad e_2 := \kappa^{-1}\ddot{\Gamma}, \quad e_3 := e_1 \times e_2$.
Les vecteurs de la triade $\{e_1, e_2, e_3\}$ sont respectivement appelés les vecteurs tangent, normal et binormal. Bien évidemment, on suppose que la courbure est strictement positive.

Dans le cas du tube droit défini ci-dessous, on choisira un repère constant adéquat.

Si la courbe Γ est une ligne droite, c'est à dire que la courbure est nulle, alors on définit le tube "droit" et on l'appelle $\Omega_0 = \mathbb{R} \times \omega$ le domaine ouvert borné de $\mathbb{R}^{d-1}$ de section ω et construit à partir de Γ. On appelle le Laplacien de Dirichlet l'opérateur :

$$-\Delta_D^{\Omega_0}, \quad \text{dans} \quad L^2(\Omega_0), \tag{6.1}$$

On appelle τ la torsion de Γ, fonction définie par la formule de Frenet-Serret :

$$\begin{pmatrix} \dot{e_1} \\ \dot{e_2} \\ \dot{e_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & 0 \\ -\kappa & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

Soit un ensemble ouvert borné de $\mathbb{R}^{d-1}$, on définit le tube courbé et tordu $\Omega = \mathbb{R} \times \omega$ où ω est la section et dont le centre est la courbe Γ. Soit le Laplacien de Dirichlet dans le tube déformé :

$$-\Delta_D^{\Omega}, \quad \text{dans} \quad L^2(\Omega), \tag{6.3}$$

On introduit $\theta : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction lisse de C^1 et la matrice de rotation $\mathcal{R}^\theta : \mathbb{R} \to SO(3)$ définie comme suit :

$$\mathcal{R}^\theta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{6.4}$$

Ainsi, on crée un nouveau repère tourner d'un angle θ le repère de Frenet associé $\{e_1, e_2, e_3\}$ et les vecteurs de la nouvelle base s'exprime comme suit :

$$e_i^\theta := \sum_{j=1}^{3} \mathcal{R}_{ij}^\theta e_j, \tag{6.5}$$

où $\mathcal{R}_{ij}^\theta$ sont les éléments de la matrice $\mathcal{R}^\theta$. En utilisant la définition de la base $\{e_1^\theta, e_2^\theta, e_3^\theta\}$ et de la matrice de rotation $\mathcal{R}^\theta$ on définit la carte $\mathcal{L} : \Omega_0 \mapsto \Omega$, telle que $\Omega = \mathcal{L}(\mathbb{R} \times \omega)$ et définie comme suit :

$$\mathcal{L}(s,t) := \Gamma(s) + \sum_{j=2}^{3} x_j e_j^\theta(s), \quad x_j \in \omega \tag{6.6}$$

La métrique induite par $\mathcal{L}$ est alors :

$$G = \begin{pmatrix} h^2 + h_2^2 + h_3^2 & h_2 & h_3 \\ h_2 & 1 & 0 \\ h_3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.7}$$

avec $h(s,x') = 1 - (x_2 \cos\theta(s) + x_3 \sin\theta(s))\kappa(s), h_2(s,t) = -x_3(\tau(s) - \dot{\theta}(s))$, et $h_3(s,t) = x_2(\tau(s) - \dot{\theta}(s))$.

On exprime le Laplacien (6.3) dans le système de coordonnées associé au difféomorphisme (6.6) et en utilisant l'inverse de la métrique (6.7) (dont les éléments sont les G^{ij}). Grâce à (6.6), on identifie l'espace de Hilbert $L^2(\Omega)$ avec $\mathcal{H} = L^2(\Omega_0, G)$. En remarquant que $\det(G) = h$, on définit le produit scalaire dans $\mathcal{H}$ par

$$(\phi, \psi)_{\mathcal{H}} := \int_{\Omega_0} \overline{\phi(s,x')} h(s,x') \psi(s,x') ds \; dx'.$$

Il vient que le Laplacien (6.3) dans $L^2(\Omega)$ est unitairement équivalent à l'opérateur associé à la forme

$$\mathcal{Q}[\psi] = (\partial_i \psi, G^{ij} \partial_j \psi)_{\mathcal{H}}$$

6.1.2 Espaces de Sobolev et espaces à poids

a. Espaces de Sobolev

Les espaces de Sobolev sont les espaces des solutions d'équations aux dérivées partielles elliptiques et paraboliques. Soient $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un ouvert quelconque et m un entier naturel positif. Soit $D^\alpha f, |\alpha| \leq k$ la "$\alpha-$ième dérivée partielle au sens des distributions et soit l'espace de Lebesgue L^p.

$$W^{m,p}(\Omega) = \{f \in L^p(\Omega)/D^\alpha f \in L^p(\Omega)\}.$$

Un espace de Sobolev est donc un espace vectoriel de fonction muni de la norme $||f||_{W^{m,p}}$ qui est une combinaison de la norme L^p de la fonction et et de celle de ses dérivées, de la manière suivante :

$$||f||_{W^{m,p}} = \begin{cases} \left(\sum_{0\leq|\alpha|<m} ||D^\alpha f||^p_{L^p}\right)^{1/p}, & 1 \leq p < +\infty \\ \max_{0\leq|\alpha|<m}||D^\alpha f||_{L^\infty}, & p = +\infty \end{cases}$$

Muni de cette norme, $W^{m,p}(\Omega)$ est un espace de Banach, et, lorsque p est fini, il est aussi séparable. Dans ce cas là, $W^{m,p}(\Omega)$ est identifié à la fermeture de l'ensemble

$$\{f \in C^m(\Omega)/||f||_{W^{m,p}} < \infty\}$$

pour la topologie de la norme $||\,.\,||_{W^{m,p}}$. $C^m(\Omega)$ désigne l'espace de Hölder des fonctions de classe m sur Ω.

Dans le cas $p = 2$, L'espace de Sobolev

$$W^{m,2}(\Omega) = \{f \in L^p(\Omega)/D^\alpha f \in L^p(\Omega)\}$$

est un espace de Hilbert dont la norme induite est le produit scalaire

$$(f,g)_{W^{m,2}(\Omega)} = \sum_{0\leq|\alpha|\leq m} (D^\alpha f, D^\alpha g)_{L^2(\Omega)}$$

Dans ce cas-là, l'espace de Sobolev est souvent noté

$$\mathcal{H}^k(\Omega) = W^{k,2}(\Omega).$$

b. Trace d'une fonction sur un espace de Sobolev

Soit $s > 1/2$ et Ω un ouvert de frontière $\partial\Omega$ suffisamment régulière ; par exemple, $\partial\Omega$ uniformément $C^m, m \geq s$. Dans le cas des espaces de Sobolev $\mathcal{H}^s(\Omega)$, on définit l'opérateur de trace τ l'opérateur qui associe à une fonction $u \in \mathcal{H}^s(\Omega)$ sa restriction sur la frontière de Ω, c'est-à-dire qui agit comme suit :

$$\begin{array}{rcl} \tau : \mathcal{H}^s(\Omega) & \longrightarrow & \mathcal{H}^{s-1/2} \\ u & \longmapsto & \tau u = u_{|_{\partial\Omega}}. \end{array}$$

Techniquement, l'opérateur de trace est tout d'abord défini pour des fonctions indéfiniment dérivables, puis par continuité, on étend sa définition à tout $\mathcal{H}^s(\Omega)$.

c. Espaces de Sobolev à poids

Soit un espace ouvert $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, soit $1 < p < \infty$ et k un entier positif.Soit $\omega : \mathbb{R}^n \to [0, \infty)$ une fonction non négative et localement sommable. La fonction ω est appelé un **poids**. Tout poids ω donne lieu à une mesure dans un sous espace mesurable $E \subset \mathbb{R}^n$ via l'intégration. Cette mesure est également notée ω. Pour tout E, on a

$$\omega(E) = \int_E \omega(x)dx.$$

L'*espace de Sobolev à poids ou pondéré* noté $W^{k,p}(\Omega, \omega)$ est constitué des fonctions f de "α-ièmme" dérivées $D^\alpha f, |\alpha| \leq k$, et qui satisfont

$$||f||_{W^{k,p}(\Omega,\omega)} = \left(\sum_{|\alpha|\leq k} \int_\Omega |D^\alpha f|^p \omega dx \right)^{1/p} < \infty$$

Comme on l'a vu dans la section précédente, les espaces de Sobolev sans poids sont les espaces des solutions pour les équations elliptique et parabolique, alors que les espaces de Sobolev pondérés apparaissent dans des cas où l'ellipticité est perturbée, c'est-à-dire par exemple qu'une perturbation ou une singularité apparait via les coefficients de l'opérateur différentiel correspondant.

6.2 Annexe du chapitre 2

6.2.1 Définition

Dans cette section, on donne les définitions clés utiles pour les démonstrations présentées. On se base sur les livres références [37], [61]...

a. Coeur

Soit $T : X \to Y$ un opérateur fermable de domaine $D(T)$, c'est-à-dire un opérateur qui possède une extension fermée. Soit $G(T)$ le sous ensemble de $X \times Y$ constitué des éléments de la forme $\{u, Tu\}, u \in D(T)$ et qu'on appelle le graphe associé à l'opérateur T. Lorsque T est fermable, il existe un opérateur fermé $\tilde{T}$ appelé la fermeture de T tel que $G(\tilde{T}) = \overline{G(T)}$. $\tilde{T}$ est la plus petite extension fermée de T.

Définition 6.2.1. *Soit S un opérateur fermé. Pour tout opérateur fermable T tel que $\tilde{T} = S$ son domaine $D(T)$ sera appelé un coeur pour S.*

b. Propagateurs, opérateurs d'onde

Soient A et B deux opérateurs auto-adjoint sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Soit $P_{ac}(B)$ la projection sur le sous espace absolument continu de B.

Définition 6.2.2. *On appelle opérateurs d'onde et on les note $\Omega_\pm(A, B)$ les limites fortes, si elles existent, suivantes :*

$$\Omega_\pm(A, B) = s - \lim_{t \to \mp\infty} e^{iAt} e^{-iBt} P_{ac}(B)$$

6.2.2 Démonstration du lemme 2.4.2

On rappelle le lemme 2.4.2 :

Lemme 6.2.3. *(i) La limite* $\Omega_{\eta,L}(t) := \lim_{s\to-\infty}\Omega_{\eta,L}(t,s)$ *existe et est appelée l'opérateur d'onde.*
(ii) La limite $\lim_{s\to-\infty}\Omega^{\star}_{\eta,L}(t,s)$ *existe et est l'adjoint de l'opérateur d'onde.*

Preuve de (i) : on réécrit (2.37) sous forme intégrale :

$$\Omega_{\eta,L}(t,s) = 1 - i\int_s^t \Omega_{\eta,L}(t,r)\chi(\eta r)\tilde{V}_{\eta,L}(r-t)dr \tag{6.8}$$

où le 1 désigne l'identité sur $\mathcal{H}_L$. On définit à présent l'application $\mathcal{V}_{\eta,L}$ sur $\mathcal{A} := L^{\infty}(\mathbb{R}_-, \mathcal{B}(\mathcal{H}_L))$ comme suit

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{V}_{\eta,L} : \mathcal{A} & \longrightarrow & \mathcal{A} \\ X & \to & \left(s \to -i\displaystyle\int_s^t X(r)\chi(\eta r)\tilde{V}_{\eta,L}(r-t)dr\right) \end{array} \tag{6.9}$$

On a donc pour t fixé :

$$\begin{array}{rcll} \Omega_{\eta,L}(t,s) & = & id_{\mathcal{H}_L} + \mathcal{V}_{\eta,L}\Omega_{\eta,L}(t,s) & \Longleftrightarrow \\ (id_{\mathcal{A}} - \mathcal{V}_{\eta,L})\Omega_{\eta,L}(t,\cdot) & = & 1_{\mathcal{A}} =: 1 & \end{array} \tag{6.10}$$

où $1_{\mathcal{A}}$ désigne la fonction de $\mathcal{A}$ constante et égale à l'identité sur $\mathcal{H}_L$; par la suite cette fonction sera notée 1. Une fois la convergence de la série de Neumann donnée par

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left(\mathcal{V}_{\eta,L}\right)^k 1_{\mathcal{A}} \tag{6.11}$$

établie, on vérifie facilement que la somme de cette série est la solution de (6.10). On vérifie maintenant cette convergence.

On estime, pour tout $t \in \mathbb{R}$ et pour tout $k \in \mathbb{N}$ fixés :

$$\begin{array}{rcl} \left(\left(\mathcal{V}_{\eta,L}\right)^k 1\right)(s) & = & (-i)^k \displaystyle\int_s^t dr_1\chi(\eta r_1)\int_{r_1}^t dr_2\chi(\eta r_2)..\int_{r_k}^t dr_k\chi(\eta r_k)\times \\ & & \tilde{V}_{\eta,L}(r_k-t)..\tilde{V}_{\eta,L}(r_1-t) \qquad (6.12) \\ \left\|\left(\left(\mathcal{V}_{\eta,L}\right)^k 1\right)(s)\right\| & \leq & \displaystyle\int_s^t dr_1\left|\chi(\eta r_1)\right|\int_{r_1}^t dr_2\left|\chi(\eta r_2)\right|...\int_{r_k}^t dr_k\left|\chi(\eta r_k)\right|\left\|V_L\right\|^k \\ & \leq & \dfrac{\left(\left\|V_L\right\|\int_s^t\left|\chi(\eta r)\right|dr\right)^k}{k!} \qquad (6.13) \end{array}$$

Chaque terme de la série est donc borné par le terme d'une série convergente . D'où

$$\begin{array}{rcl} \displaystyle\sum_{k=0}^{\infty}\left\|\left(\mathcal{V}_{\eta,L}\right)^k 1\right\| & \leq & \displaystyle\sup_{s\in\mathbb{R}_-}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(\left\|V_L\right\|\int_s^t\left|\chi(\eta r)\right|dr\right)^k}{k!} \\ & \leq & e^{\left\|V_L\right\|\int_{-\infty}^t\left|\chi(\eta r)\right|dr} \end{array} \tag{6.14}$$

$\chi(\eta r)$ est une fonction de $L^1(\mathbb{R}_-)$ donc la série converge uniformément par rapport à $s<t$ dans $\mathbb{R}_-$ en norme dans $\mathcal{A}$ car $\mathcal{A}$ est complet. On a pour tout $t\in\mathbb{R}$

$$\Omega_{\eta,L}(t,.)=\sum_{k=0}^{\infty}\left(\mathcal{V}_{\eta,L}\right)^k 1 = U_{\eta,L}(t,.)U_0(.,t) \tag{6.15}$$

En outre chaque terme de la série étant continu par rapport à s dans la norme de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_L)$, $\Omega_{\eta,L}(t,\cdot)$ est donc continue en norme.

On montre à présent que l'opérateur $\Omega_{\eta,L}(t,s)$ converge en norme lorsque s tend vers moins l'infini.

$$\begin{aligned}\left\|\Omega_{\eta,L}(t,s)-\Omega_{\eta,L}(t,s')\right\| &= \left\|\int_s^{s'}\Omega_{\eta,L}(t,r)\tilde{V}_{\eta,L}(r-t)\chi(\eta r)dr\right\| \\ &\leq \|V_L\|\int_s^{s'}|\chi(\eta r)|\,dr \\ &\overset{s,s'\to-\infty}{\to} 0 \quad \blacksquare\end{aligned} \tag{6.16}$$

Preuve de (ii) : par un raisonnement identique à celui présenté dans la démonstration du lemme 2.4.2 on peut montrer que l'adjoint de l'opérateur $\Omega_{\eta,L}(t,s)^\star$ a bien une limite en $s=-\infty$. En effet,

$$i\partial_s\Omega^\star_{\eta,L}(t,s)=\tilde{V}_{\eta,L}(s-t)\Omega^\star_{\eta,L}(t,s)\chi(\eta s) \tag{6.17}$$

Ainsi

$$\Omega^\star_{\eta,L}(t,s)=1+i\int_s^t\chi(\eta r)\tilde{V}_{\eta,L}(r-t)\Omega^\star_{\eta,L}(t,r)dr \tag{6.18}$$

On regarde à présent la série de Dyson pour l'adjoint $\Omega^\star_{\eta,L}(t)$. (2.37) devient :

$$\begin{aligned}\Omega^\star_{\eta,L}(t,s) &= \sum_{k=0}^{\infty}(i)^k\int_s^t dr_1\chi(\eta r_1)\tilde{V}_{\eta,L}(r_1-t)\int_{r_1}^t dr_2\chi(\eta r_2)\tilde{V}_{\eta,L}(r_2-t)... \\ &\quad ...\int_{r_k}^t dr_k\chi(\eta r_k)\tilde{V}_{\eta,L}(r_k-t) \\ &=: \sum_{k=0}^{\infty}(\mathcal{V}^{\star\,k}_{\eta,L}1)(s)\end{aligned} \tag{6.19}$$

On démontre de la même manière que en (6.13) que chaque terme de la série est borné :

$$\left\|\left(\left(\mathcal{V}^\star_{\eta,L}\right)^k 1\right)(s)\right\| \leq \frac{\left(\int_s^t dr\,|\chi(\eta r)|\,\|V_L\|\right)^k}{k!} \tag{6.20}$$

Finalement, la série converge pour tout $s<t$ dans $\mathbb{R}_-$ en norme dans $\mathcal{A}$:

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{\infty}\left\|\left(\mathcal{V}^\star_{\eta,L}\right)^k 1\right\| &\leq \sup_{s\in\mathbb{R}_-}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(\|V_L\|\int_s^t|\chi(\eta r)|\,dr\right)^k}{k!} \\ &\leq e^{\|V_L\|\int_{-\infty}^t|\chi(\eta r)|dr}\end{aligned} \tag{6.21}$$

On a pour tout $t \in \mathbb{R}$:

$$\Omega^{\star}_{\eta,L}(t,.) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\mathcal{V}^{\star}_{\eta,L}\right)^k 1 = U_0(t,.)U_{\eta,L}(.,t) \tag{6.22}$$

Chaque terme étant continu en s dans la norme de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_L)$, $\Omega^{\star}_{\eta,L}(t,.)$ est donc continu en norme. On montre à présent que l'opérateur $\Omega^{\star}_{\eta,L}(t,s)$ converge en norme lorsque s tend vers l'infini.

$$\begin{aligned} \left\|\Omega^{\star}_{\eta,L}(t,s) - \Omega^{\star}_{\eta,L}(t,s')\right\| &= \left\| \int_s^{s'} \tilde{V}_{\eta,L}(r-t)\Omega^{\star}_{\eta,L}(t,r)\chi(\eta r)dr \right\| \\ &\leq \|V_L\| \int_s^{s'} |\chi(\eta r)|\, dr \\ &\overset{s,s'\to-\infty}{\to} 0 \quad \blacksquare \end{aligned} \tag{6.23}$$

Remarque 6.2.4. *Grâce aux deux démonstrations précédentes, on a montré que pour tout $\eta > 0$*

1. *Chaque terme $(\mathcal{V}_{\eta,L})^k 1$ ou $(\mathcal{V}^{\star}_{\eta,L})^k 1$ est borné uniformément par rapport à s, t et L. En outre, il est convergent lorsque $s \to -\infty$ uniformément par rapport à $t \in \mathbb{R}_-$ et $L > 0$. En effet*

$$\begin{aligned} \left|((\mathcal{V}_{\eta,L})^k 1)(s) - ((\mathcal{V}_{\eta,L})^k 1)(s')\right| &\leq \left| \int_{s'}^{s} dr\chi(\eta r)(\mathcal{V}^{k-1}_{\eta,L}1)(r) \right| \\ &\leq \left| \int_{s'}^{s} \chi(\eta r)dr \right| \sup_{s\in\mathbb{R}_-} \|(\mathcal{V}_{\eta,L})^{k-1}1\| \\ &\leq \left| \int_{s'}^{s} \chi(\eta r)dr \right| \frac{\left(\|V_L\| \int_{\mathbb{R}_-} \chi(\eta r)dr\right)^{k-1}}{(k-1)!}. \end{aligned}$$

2. *De même les séries suivantes*

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\| (\mathcal{V}_{\eta,L})^k 1 \right\| \quad \textit{et} \quad \sum_{k=0}^{\infty} \left\| \left(\mathcal{V}^{\star}_{\eta,L}\right)^k 1 \right\| \tag{6.24}$$

sont convergentes lorsque $s \to -\infty$ uniformément par rapport à $t \in \mathbb{R}_-$ et $L > 0$.

6.2.3 Preuve du théorème 2.4.6

Théorème 6.2.5. *La matrice densité $\rho_{\eta,L}(t)$ défini en (2.43) est l'unique solution de l'équation de Liouville au sens de la norme trace*

Le lemme suivant permet de faire la preuve du théorème 2.4.6.

Lemme 6.2.6. *Soit I un ouvert de $\mathbb{R}$ et $f : I \longrightarrow \mathcal{B}_1(\mathcal{H})$ une application. Si (i) f est différentiable dans la topologie forte de $\mathcal{B}(H)$, (ii) f'$\in C^0(I, \mathcal{B}_1(\mathcal{H}))$, alors f est différentiable au sens de la norme trace.*

Preuve : par hypothèses sur f on a :

$$\frac{f(t+\tau)-f(t)}{\tau} - f'(t) = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau ds\,\big(f'(t+s)-f'(t)\big) \tag{6.25}$$

Cette formule est valable au sens fort sur $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ et pour τ assez petit de tel sorte que $[t,t+\tau[\in I$. Tout les termes dans cette expression sont à trace. En particuliers, le membre de droite est à trace car d'après les hypothèses sur f, f' est continue sur le compact $[t,t+\tau]$. Ainsi, la continuité de f' au sens de la norme trace implique

$$\left\|\frac{f(t+\tau)-f(t)}{\tau} - f'(t)\right\|_1 \leq \sup_{0<s<\tau}\big\|f'(t+s)-f'(t)\big\|_1 \to 0 \quad \blacksquare \tag{6.26}$$

Preuve du théorème :
Etape 1) On montre que $\rho_{\eta,L}(t)$ défini en (2.43) est solution de l'équation de Liouville au sens de la norme trace.
(i) On sait que $\rho_{\eta,L}(t)$ est dérivable au sens fort.
(ii) On doit montrer que $\frac{d\rho_{\eta,L}(t)}{dt}$ est à trace et est continu sur $\mathcal{B}_1(\mathcal{H}_\mathcal{L})$. Cela revient à montrer que $[H_{\eta,L}(t),\rho_{\eta,L}(t)]$ est à trace et est continu sur $\mathcal{B}_1(\mathcal{H}_\mathcal{L})$ (lemme 6.2.7).

Lemme 6.2.7. *Les expressions $H_{\eta,L}(t)\rho_{\eta,L}(t)$ et $\rho_{\eta,L}(t)H_{\eta,L}(t)$ et par conséquent le commutateur $[H_{\eta,L}(t),\rho_{\eta,L}(t)]$ sont à trace pour tout $t\leq 0$ et sont continus en t dans la norme trace sur $\mathbb{R}_-$.*

Preuve. (a) On montre que $H_{\eta,L}(t)\rho_{\eta,L}(t)$ est à trace. Pour cela on introduit $R_L := (H_L+1)^{-1}$ la résolvante de H_L (voir remarque 6.2.9). On rappelle que H_L ne dépend pas du temps et que $\chi(\eta t)V_L$ est borné et symétrique. Ceci implique que le domaine de $H_{\eta,L}(t)$ est le domaine de H_L. On décompose

$$\begin{aligned} H_{\eta,L}(t)\rho_{\eta,L}(t) &= H_{\eta,L}(t)\Omega_{\eta,L}(t)R_L(H_L+1)f_L\Omega^\star_{\eta,L}(t) &(6.27)\\ &= H_L\Omega_{\eta,L}(t)R_L(H_L+1)f_L\Omega^\star_{\eta,L}(t)+\chi(\eta t)V_L\rho_{\eta,L}(t) &(6.28)\end{aligned}$$

$\Omega^\star_{\eta,L}(t)$ est unitaire est borné. $(H_L+1)f_L$ est à trace. Donc $(H_L+1)f_L\Omega^\star_{\eta,L}(t)$ est à trace. R_L envoit dans le domaine de H_L donc de $H_{\eta,L}(t)$ et $\Omega_{\eta,L}(t)$ conserve ce domaine. Grâce au théorème du graphe fermé on conclut que $H_L\Omega_{\eta,L}(t)R_L$ est borné. Le produit d'un borné par un opérateur à trace étant à trace, $H_L\rho_{\eta,L}(t)$ est à trace. De plus, $\chi(\eta t)V_L$ est borné par hypothèse sur χ et V_L, d'où $\chi(\eta t)V_L\rho_{\eta,L}(t)$ est à trace. On en conclut que $H_{\eta,L}(t)\rho_{\eta,L}(t)$ est à trace.
(b) On montre à présent que $H_{\eta,L}(t)\rho_{\eta,L}(t)$ est continu dans la norme trace. Pour cela on utilise le lemme suivant :

Lemme 6.2.8. *Soit I un intervalle ouvert de $\mathbb{R}$, $A: I\to\mathcal{B}(\mathcal{H})$ fortement continue sur I et $B\in C^0(I,\mathcal{B}_1(\mathcal{H}))$, alors, $AB\in C^0(I,\mathcal{B}_1(\mathcal{H}))$.*

Preuve du lemme. soit $C(t) := A(t)B(t)$, C(t) est à valeur dans $\mathcal{B}_1(\mathcal{H})$ car $\mathcal{B}_1(\mathcal{H})$ est un idéal de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. On considère $D(h) := C(t+h)-C(t)$ et $h_0>0$ tel que $|h|\leq h_0$ implique $t+h\in I$. Comme A est fortement continue, on sait qu'il existe un $h_1\leq h_0$ tel que :

$$M := \sup_{|h|\leq h_0}\|A(t+h)\| < \infty$$

Comme

$$\begin{aligned}\|D(h)\|_1 &= \|A(t+h)B(t+h) - A(t)B(t)\|_1 \\ &= \|(A(t+h) - A(t))B(t)\|_1 + \|A(t+h)\|\,\|B(t+h) - B(t)\|_1 \\ &= \|(A(t+h) - A(t))B(t)\|_1 + M\epsilon \end{aligned} \tag{6.29}$$

où $h_1(\epsilon) \geq h_2(\epsilon) > |h|$, et h_2 est le module de continuité de $B(t)$ en t. Comme $B(t)$ est à trace, on peut l'approximer par un opérateur de rang fini F, à ϵ près :

$$\|D(h)\|_1 \leq \|(A(t+h) - A(t))\,F\|_1 + 2M\epsilon + M\epsilon$$

Comme A est fortement continu, on peut trouver h_3 tel que $|h| \leq h_3(\epsilon)$ implique $\|(A(t+h) - A(t))B(t)\|_1 \leq \epsilon$. ∎

On sait que $(H_L + 1)f_L\Omega^\star_{\eta,L}(t)$ est continu dans la norme trace. On a d'après (6.2.6) :

$$\sup_t ||H_L\Omega_{\eta,L}(t)R_L|| < \infty$$

et $\forall u \in \mathcal{H}_L$, $H_L\Omega_{\eta,L}(t)R_Lu$ est continu sur domH_L. En appliquant le lemme 6.2.8 on a que

$$H_L\rho_{\eta,L}(t) \quad \text{est continu dans la norme trace.} \tag{6.30}$$

On a aussi

$$\chi(\eta t)V_L\rho_{\eta,L} = \chi(\eta t)V_L\Omega_{\eta,L}f_L\Omega^\star_{\eta,L}, \quad \|\chi(\eta t)V_L\| < \infty \tag{6.31}$$

Ainsi, en appliquant le lemme 6.2.8, il suit que

$$\chi(\eta t)V_L\rho_{\eta,L} \quad \text{est continu dans la norme trace.} \tag{6.32}$$

On conclut grâce à (6.30) et (6.32) que $H_{\eta,L}\rho_{\eta,L}(t)$ est continu dans la norme trace.

(iii) On utilise le lemme 6.2.6 pour conclure que $\rho_{\eta,L}(t)$ est dérivable au sens de la norme trace.

On peut conclure que la matrice densité $\rho_{\eta,L}(t)$ satisfait bien l'équation de Liouville dans la norme trace. ∎

Etape 2) On doit montrer que $\rho_{\eta,L}(t)$ satisfait la condition limite donnée en (2.33), c'est-à-dire que l'on a $\lim_{t\to-\infty} \|\rho_{\eta,L}(t) - f_L\|_1 = 0$. On calcule :

$$\begin{aligned} & \|\Omega_{\eta,L}(t)f_L\Omega_{\eta,L}(t)^\star - f_L\|_1 \\ = \;& \|\Omega_{\eta,L}(t)f_L(\Omega_{\eta,L}(t)^\star - 1) + (\Omega_{\eta,L}(t) - 1)f_L\|_1 \\ \leq \;& \|\Omega_{\eta,L}(t)f_L(\Omega_{\eta,L}(t)^\star - 1)\|_1 + \|(\Omega_{\eta,L}(t) - 1)f_L\|_1 \\ \overset{t\to\infty}{\to} \;& 0 \end{aligned} \tag{6.33}$$

Etape 3) On montre à présent que $\rho_{\eta,L}(t)$ défini en (2.43) est l'unique solution de l'équation de Liouville. Soient $\rho_1(t)$ et $\rho_2(t)$ deux solutions de (2.31). On appelle $W(t) := \rho_1(t) - \rho_2(t)$. On rappelle que l'on a l'expression de :

$$\Omega_{\eta,L}(t) := \Omega_{\eta,L}(0)U_{\eta,L}(t,0)$$

où $U_{\eta,L}(t,s)$ est défini en (2.4.1). $\Omega_{\eta,L}(t)$ vérifie :

$$\frac{d\Omega_{\eta,L}(t)}{dt} = -iH_{\eta,L}(t)\Omega_{\eta,L}(t)$$

On a alors, pour tout $u, v \in \text{dom}H_L$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(u, W(t)v) &= \frac{d}{dt}\left(\Omega_{\eta,L}(t)u, (\Omega_{\eta,L}(t)\rho_1(t)\Omega^\star_{\eta,L}(t) - f_L)\Omega_{\eta,L}(t)v\right) \\
&= \left(\frac{d\Omega_{\eta,L}}{dt}u, (\Omega_{\eta,L}\rho_1\Omega^\star_{\eta,L} - f_L)\Omega_{\eta,L}(t)v)\right) + \\
&+ \left(\Omega_{\eta,L}(t)u, \frac{d}{dt}\left(\Omega_1\rho_1\Omega^\star_{\eta,L} - f_L\right)\Omega_{\eta,L}v\right) + \\
&+ \left(\Omega_{\eta,L}u, (\Omega_{\eta,L}\rho_1\Omega^\star_{\eta,L} - f_L)\frac{d\Omega_{\eta,L}}{dt}v\right) \\
&= \left(\Omega_{\eta,L}(t)u, \frac{d}{dt}\left(\Omega_{\eta,L}\rho_1\Omega^\star_{\eta,L} - f_L\right)\Omega_{\eta,L}v\right) \\
&= \left(u, \left(\frac{d\Omega^\star_{\eta,L}}{dt}\rho_1\Omega_{\eta,L} + \Omega^\star_{\eta,L}\frac{d\rho_1}{dt}\Omega_{\eta,L} + \Omega^\star_{\eta,L}\rho_1\frac{d\Omega_{\eta,L}}{dt}\right)v\right) \\
&= \left(u, \left(i\Omega^\star_{\eta,L}H_{\eta,L}\rho_1\Omega_{\eta,L} + i\Omega^\star_{\eta,L}\left[\rho_1, H_{\eta,L}\right]\Omega_{\eta,L} - i\Omega^\star_{\eta,L}H_{\eta,L}\Omega_{\eta,L}\right)v\right) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{6.34}$$

Comme le résultat est zéro, on peut l'étendre à tout $u, v \in \mathcal{H}_L$. ρ_1 et ρ_2 satisfont respectivement la condition initiale donnée en (2.33) :

$$\lim_{t\to-\infty}\rho_1(t) = f_L$$

$$\lim_{t\to-\infty}\rho_2(t) = f_L$$

Ainsi,

$$\lim_{t\to-\infty}\|\rho_1(t) - \rho_2(t)\|_1 \leq \lim_{t\to-\infty}\|\rho_1(t) - f_L\|_1 + \lim_{t\to-\infty}\|\rho_2(t) - f_L\|_1 = 0$$

On en conclut que $\rho_1(t) = \rho_2(t)$. ∎

Remarque 6.2.9. *On a introduit les résolvantes R_L et $R_{\eta,L}(t)$ des opérateurs H_L et $H_{\eta,L}(t)$. Sans restreindre la généralité et pour des questions de lisibilité, on a choisi dans les deux cas -1 comme paramètre spectral. On a donc supposé que, H_L et $H_{\eta,L}(t)$ sont strictement bornés inférieurement par -1. Les résultats restent valables dans le cas d'un paramètre spectral réel plus petit que -1.*

6.2.4 L'état dans la limite de volume infini

Un ingrédient très important de cette section est la convergence de $\bar{H}_L$ vers H au sens fort généralisé c'est-a-dire :

$$s - \lim_{L\to\infty}(\bar{H}_L - z)^{-1} = (H - z)^{-1} \tag{6.35}$$

(i)Convergence de la résolvante
Pour établir 6.35 on a choisi d'utiliser un résultat classique, voir le corollaire 1.6 du théorème VIII.1.5 de [37], qui nécessite de disposer d'un cœur approprié pour H. On commence cette section par la construction de ce cœur.

Proposition 6.2.10. *Il existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tel que l'ensemble $\mathcal{D}$ suivant soit un cœur pour H :*

$$\mathcal{D} := \{\chi_{R_n} u,\ u \in \operatorname{dom} H,\ n \geq n_0\} \tag{6.36}$$

où la suite des R_n est définie comme

$$R_n := 2^n, \quad n \in \mathbb{N} \tag{6.37}$$

et elle vérifie

$$m < n \quad \Rightarrow \quad \chi_{R_m}\chi_{R_n} = \chi_{R_m}. \tag{6.38}$$

Preuve : voir la partie Annexes 6.2.5.

Proposition 6.2.11. *La résolvante $\bar{R}_L$ définie comme $\bar{R}_L := \left(\bar{H}_L + 1\right)^{-1}$ converge fortement vers $R := (H+1)^{-1}$ lorsque L tend vers l'infini.*

Preuve : on utilise le corollaire 1.6 du théorème VIII.1.5 de [37].

1. En effet, $\bar{H}_L$ et H sont autoadjoints
2. $\mathcal{D}$ est un coeur pour H.
3. On va démontrer que pour tout u dans le coeur $\mathcal{D}$ de H il existe un $L > 0$ tel que $\bar{H}u = Hu$. Par définition de $\mathcal{D}$, pour tout $u \in \mathcal{D}$

   $$\exists \chi_{R_n} \in C_0^\infty(\mathbb{R}), v \in \text{dom}H, u = \chi_{R_n} v.$$

   Soit L tel que $\operatorname{supp}\chi_{R_n} \in]-L, L[$. Alors on a immédiatement que $u \in \operatorname{dom}\bar{H}_L$ et que $\bar{H}_L u = Hu$.

Cela permet de conclure que la résolvante $\bar{R}_L$ définit comme $\bar{R}_L = (\bar{H}_L + 1)^{-1}$ converge fortement vers la limite $R = (H+1)^{-1}$. ∎
(ii) Convergence de l'opérateur d'onde et de l'état dans la limite de volume infini

Lemme 6.2.12. *La fonction de Fermi-Dirac $\bar{f}_L$ définie par $\bar{f}_L = \left(1 + e^{\beta(\bar{H}_L - \mu)}\right)^{-1}$ converge fortement vers $f = \left(1 + e^{\beta(H-\mu)}\right)^{-1}$ lorsque L tend vers l'infini.*

Preuve : on sait que l'Hamiltonien $\bar{H}_L$ converge fortement, au sens de la résolvante, vers H lorsque L tend vers l'infini. On rappelle que $\bar{f}_L$ désigne l'extension par zéro de f_L à tout $\mathcal{H}$. Comme la fonction $\bar{f}_L(x) = \left(1 + e^{\beta(x-\mu)}\right)^{-1}$ est bornée on peut utiliser le théorème VIII.20(b) de [58] pour montrer que $\bar{f}_L$ converge vers la limite f lorsque L tend vers l'infini. Ainsi, $\bar{f}_L = (1 + e^{\beta(\bar{H}_L - \mu)})^{-1}$ converge vers $f = (1 + e^{\beta(H-\mu)})^{-1}$ et le lemme est prouvé. ∎

Afin de démontrer la convergence dans la limite de volume infini de la matrice densité, on a besoin d'introduire les opérateurs suivants dont on va montré l'existence dans le lemme 6.2.18 :

Définition 6.2.13. *On définit les opérateurs suivants :*

$$\Omega_\eta(t) := \sum_{k=0}^{\infty} (\mathcal{V}_\eta)^k 1_{\mathcal{A}}, \quad \Omega_\eta^\star(t) := \sum_{k=0}^{\infty} \left(\mathcal{V}_\eta^\star\right)^k 1_{\mathcal{A}}, \tag{6.39}$$

où

$$(\mathcal{V}_\eta)^k 1_{\mathcal{A}} := (-i)^k \int_{-\infty}^{t} dr_1 \chi(\eta r_1) ... \int_{r_k}^{t} dr_k \chi(\eta r_k) \tilde{V}_\eta(r_k - t) ... \tilde{V}_\eta(r_1 - t) \tag{6.40}$$

Remarque 6.2.14. On a utilisé l'abus de notation suivant :

$$(\mathcal{V}_\eta)^k 1 := ((\mathcal{V}_\eta)^k 1)(-\infty).$$

La preuve de l'existence de cette limite est faite dans le lemme 6.2.18.

Définition 6.2.15. *On appelle ρ_η l'opérateur suivant :*

$$\rho_\eta := \Omega_\eta(t) f \Omega_\eta^\star(t) \tag{6.41}$$

Proposition 6.2.16. *La matrice densité $\bar{\rho}_{\eta,L}(t)$ définie par*

$$\bar{\rho}_{\eta,L}(t) := \bar{\Omega}_{\eta,L}(t) \bar{f}_L \bar{\Omega}_{\eta,L}^\star(t) \tag{6.42}$$

converge fortement vers l'opérateur $\rho_\eta(t) := \Omega_\eta(t) f \Omega_\eta(t)^\star$.

Preuve. pour faire la preuve de la proposition 6.2.16 on doit tout d'abord démontrer les deux lemmes suivants :

Lemme 6.2.17. *L'opérateur $\overline{\tilde{V}}_{\eta,L}(t)$ définit comme*

$$\overline{\tilde{V}}_{\eta,L}(t) := e^{it\bar{H}_L} \bar{V}_L e^{-it\bar{H}_L}$$

converge fortement vers

$$\tilde{V}_\eta(t) := e^{itH} V e^{-itH}$$

pour tout t fixé lorsque L tend vers l'infini.

Preuve : d'après le lemme 2.4.10, on sait que $\bar{V}_L$ converge fortement vers V. Comme $\bar{H}_L$ converge fortement au sens des résolvantes vers H quand L tend vers l'infini on a d'après le théorème VIII.20. (b) de [58] que $\exp(\pm it\bar{H}_L)$ convergent fortement vers $\exp(\pm itH)$ et ceci pour tout t fixé. On a ainsi prouvé ce lemme. ∎

Lemme 6.2.18. *L'opérateur d'onde $\bar{\Omega}_{\eta,L}(t)$ et son adjoint $\bar{\Omega}_{\eta,L}(t)^\star$ convergent respectivement vers les limites $\Omega_\eta(t)$ et $\Omega_\eta(t)^\star$ lorsque L tend vers l'infini.*

Preuve.
(i) On écrit tout d'abord, pour un k entier positif ou nul fixé un terme de la série de Dyson pour $\bar{\Omega}_{\eta,L}(t)$ à l'aide de la série donnée en (2.37), (6.8), (6.12) et (6.15) :

$$\begin{aligned} & \left(\overline{\mathcal{V}}_{\eta,L} 1\right)^k (-\infty) \\ =: & \left(\overline{\mathcal{V}}_{\eta,L}\right)^k 1 \qquad \text{(voir les remarques 6.2.14 et 6.2.4)} \\ = & (-i)^k \int_{-\infty}^{t} dr_1 \chi(\eta r_1) ... \int_{r_k}^{t} dr_k \chi(\eta r_k) \overline{\tilde{V}}_{\eta,L}(r_k - t) ... \overline{\tilde{V}}_{\eta,L}(r_1 - t) \end{aligned}$$

Grâce au lemme 6.2.17 on sait que pour tout $r_1, r_2, ...r_k$ $\chi(\eta r_1)...\chi(\eta r_k)\overline{\tilde{V}}_{\eta,L}(r_k - t)...\overline{\tilde{V}}_{\eta,L}(r_1 - t)$ converge fortement vers $\chi(\eta r_1)...\chi(\eta r_k)\tilde{V}_\eta(r_k - t)...\tilde{V}_\eta(r_1 - t)$ quand L tend vers l'infini. De plus on sait que cet intégrant est borné par une fonction intégrable qui ne dépend pas de L, voir (6.20). Ainsi, par le théorème de la convergence de Lebesgue, on a, pour tout k fixé :

$$\left(\overline{\mathcal{V}}_{\eta,L}1\right)^k \overset{s}{\to} \left(\mathcal{V}_\eta 1\right)^k \tag{6.43}$$

quand L tend vers l'infini.
(ii) De plus on a démontré (voir la remarque (6.2.4)) que la série $\{(\mathcal{V}_{\eta,L}1)^k\}_k$ est bornée par une série convergente indépendante de L ; donc d'après le théorème de la convergence dominée on a la convergence forte suivante

$$\sum_k \left(\overline{\mathcal{V}}_{\eta,L}\right)^k 1 \overset{L\to+\infty}{\to} \sum_k \left(\mathcal{V}_\eta\right)^k 1$$

L'opérateur d'onde $\bar{\Omega}_{\eta,L}(t)$ converge donc fortement vers un opérateur que l'on appelle $\Omega_\eta(t)$ défini en (6.39).

Par un raisonnement identique on prouve que l'adjoint de l'opérateur d'onde converge vers la limite $\Omega^\star_\eta(t)$, voir (6.39) lorsque L tend vers l'infini. ∎

6.2.5 Construction d'un coeur pour H

Soit Ω un ouvert connexe de $\mathbb{R}^d$, t_0 la forme quadratique de domaine $\mathcal{H}^1_0(\Omega)$ définie par

$$t_0[u] := \|\nabla u\|^2.$$

Elle est positive et fermée et H_0 l'opérateur a.a. associé à t_0 est appelé *l'extension de Friedrichs de* $-\Delta$ où ce dernier est d'abord défini sur $C^\infty_0(\Omega)$, voir [44, VI.3] ; on rappelle que $C^\infty_0(\Omega)$ est un cœur pour t_0. Soit

$$\chi_1(x) = \begin{cases} 1 & \text{si} |x| \le 1 \\ 0 & \text{si} |x| \ge 2 \end{cases} \quad \text{et} \quad \chi_R(x) := \chi_1(\frac{x}{R}), \quad x \in \mathbb{R}^d \tag{6.44}$$

et on introduit la suite des

$$R_n := 2^n, \quad n \in \mathbb{N} \tag{6.45}$$

qui vérifie

$$m < n \quad \Rightarrow \quad \chi_{R_m}\chi_{R_n} = \chi_{R_m}. \tag{6.46}$$

Lemme 6.2.19. *L'ensemble suivant :*

$$\mathcal{D}_0 := \{\chi_{R_n} u,\ u \in \operatorname{dom} H_0, n \in \mathbb{N}\} \tag{6.47}$$

est un cœur pour H_0.

Preuve. Soit l'ensemble

$$\widetilde{\mathcal{D}}_0 := \{\chi u,\ u \in \operatorname{dom} H_0,\ \chi \in C^\infty_0(\mathbb{R}^d)\}.$$

Etape n°1 : $\widetilde{\mathcal{D}}_0 \subset \operatorname{dom} t_0$. On rappelle que $\operatorname{dom} t_0$ est la fermeture de $C^\infty_0(\Omega)$ dans la topologie de $\mathcal{H}^1(\Omega)$. Soit $u \in \operatorname{dom} H_0$ donc $u \in \operatorname{dom} t_0$ et par conséquent il existe une suite $\{u_n\}_n \subset C^\infty_0(\Omega)$,

tel que $u_n \to u$ dans $\mathcal{H}^1(\Omega)$. Or si $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ alors $\chi u_n \in C_0^\infty(\Omega)$ pour tout n et χu_n est de Cauchy dans $\mathcal{H}^1$ puisque

$$\|\chi(u_m - u_n)\|_1^2 \leq \|\chi\|_\infty \|u_m - u_n\|_1^2 + 2\|(\nabla\chi\|_\infty \|u_m - u_n\|^2.$$

Donc la limite de χu_n existe, appartient à $\operatorname{dom} t_0$ et vaut χu. Cette dernière affirmation est une conséquence de $u_n \to u$ simplement implique $\chi u_n \to \chi u$ simplement
Etape n°2 : $\widetilde{\mathcal{D}}_0 \subset \operatorname{dom} H_0$. On rappelle que

$$\operatorname{dom} H_0 := \{u \in \operatorname{dom} t_0,\ \Delta u \in L^2(\Omega)\}$$

où Δu doit être compris au sens des distributions. Comme $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, $\chi_{|\Omega}$ est une distribution réguliére sur Ω, voir la premiére définition de la section IX.10 de [59]. Donc $\chi u \in \mathcal{D}'(\Omega)$, les distributions sur Ω. Par ailleurs au sens des distributions

$$\Delta\chi u = (\Delta\chi)u + 2\nabla\chi\nabla u + \chi\Delta u \in L^2(\Omega).$$

Etape n°3 : L'ensemble $\widetilde{\mathcal{D}}_0$ n'est pas un sous-espace vectoriel. Par contre $\mathcal{D}_0$ en est un car : $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$,

$$\alpha u\chi_{R_m} + \beta v\chi_{R_n} = (\alpha u + \beta v)\chi_{R_m} \quad \text{si } m = n$$

et

$$\alpha u\chi_{R_m} + \beta v\chi_{R_n} = (\alpha u\chi_{R_m} + \beta v)\chi_{R_n} \quad \text{si } n > m$$

parce qu'on vient de montrer que $\widetilde{\mathcal{D}}_0 \subset \operatorname{dom} H_0$ et parce que $\chi_{R_m}\chi_{R_n} = \chi_{R_m}$.
Etape n°4 : $\mathcal{D}_0$ est un cœur pour H_0. Soit $u \in \operatorname{dom} H_0$ on a de maniére évidente

$$\lim_{n\to\infty} \|\chi_{R_n} u - u\| = 0.$$

Puis

$$\begin{aligned} \|\Delta u(1 - \chi_{R_n}) \quad \| &\leq \quad \|(-\Delta\chi_{R_n})u\| + 2\|\nabla\chi_{R_n}\nabla u\| + \|(1 - \chi_{R_n})\Delta u\| \\ &\leq \quad R_n^{-2}\|\Delta\chi_1\|_\infty + 2R_n^{-1}\|\nabla\chi_1\|_\infty\|\nabla u\| + \|(1 - \chi_{R_n})\Delta u\| \end{aligned}$$

tend vers zéro lorsque $n \to \infty$. ∎

Remarque 6.2.20. *Dans la preuve de $\tilde{\mathcal{D}}_0 \subset \operatorname{dom} t_0$ on aurait pu essayer aussi de dire*

$$\nabla(\chi u) = (\nabla\chi)u + \chi\nabla u \in L^2(\Omega)$$

mais cela nous donne seulement $\chi u \in \mathcal{H}^1(\Omega)$.

On va maintenant perturber H_0 au sens des formes de la faé con suivante : soit

$$V_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}^1(\Omega), \mathcal{H}^{-1}(\Omega))$$

on pose

$$t_1(u, v) := \langle V_1 u, v\rangle$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne les crochets de dualité entre $\mathcal{H}^1(\Omega)$ et $\mathcal{H}^{-1}(\Omega)$. On suppose aussi que V_1 est localisé sur l'ouvert $\Omega_1 \subset \Omega$ dans le sens

$$\forall \chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d),\ \chi = 1 \text{ sur } \Omega_1, \quad \chi V_1 = V_1 \chi. \tag{6.48}$$

Enfin on suppose que t_1 est symétrique et t_0 borné avec borne relative strictement inférieure à 1. Alors $t := t_0 + t_1$ est symétrique bornée inférieurement et fermée et $C_0^\infty(\Omega)$ est un cœur pour t, voir le théorème VI.1.33 de [37].

Soit H l'opérateur représentant la forme t, c'est-à-dire

$$\forall u \in \operatorname{dom} H,\ v \in \operatorname{dom} t, \quad t(u,v) = (Hu, v)$$

on a (voir [58] le théorème VIII.15) pour une version abstraite de ces affirmations)

$$\operatorname{dom} H = \{u \in \operatorname{dom} t_0,\ -\Delta u + V_1 u \in L^2(\Omega)\} \quad \text{et} \quad Hu = -\Delta u + V_1 u.$$

Encore une fois, $-\Delta u + V_1 u \in L^2(\Omega)$ doit se comprendre au sens des distributions. On peut énoncer

Lemme 6.2.21. *Soit n_0 tel que pour tout $n \geq n_0$ on ait $\chi_{R_n} = 1$ sur Ω_1. L'ensemble*

$$\mathcal{D} := \{\chi_{R_n} u,\ u \in \operatorname{dom} H,\ n \geq n_0\}$$

est un cœur pour H.

Preuve. Soit

$$\tilde{\mathcal{D}} := \{\chi u,\ u \in \operatorname{dom} H,\ \chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d),\ \chi = 1 \text{ sur } \Omega_1\}$$

Comme $\operatorname{dom} H \subset \operatorname{dom} t = \operatorname{dom} t_0$ on a comme dans le lemme précédent $\tilde{\mathcal{D}} \subset \operatorname{dom} t$. Soit $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ tel que $\chi = 1$ sur Ω_1, comme

$$\begin{aligned} (-\Delta + V_1)\chi u &= (-\Delta\chi)u - 2\nabla\chi\nabla u - \chi\Delta u + V_1\chi u \\ \text{(propriété de } V_1) \qquad &= (-\Delta\chi)u - 2\nabla\chi\nabla u - \chi\Delta u + \chi V_1 u \\ &= (-\Delta\chi)u - 2\nabla\chi\nabla u + \chi H u \in L^2(\Omega) \end{aligned}$$

ce qui prouve que $\tilde{D} \subset \operatorname{dom} H$. On a en particulier pour χ_{R_n} avec n assez grand pour que $\chi_{R_n} = 1$ sur Ω_1 que

$$H\chi_{R_n} u - Hu = (-\Delta\chi_{R_n})u - 2\nabla\chi_{R_n}\nabla u + (1 - \chi_{R_n})Hu$$

qui tend vers zéro lorsque $n \to \infty$. Reste à vérifier que $\mathcal{D}$ est un espace vectoriel : preuve analogue au cas précédent. ∎

Remarque 6.2.22. *En fait on a besoin seulement de supposer que V_1 commute avec χ_{R_n} pour n assez grand.*

On illustre cette construction sur un exemple. Soit t la forme quadratique sur $L^2(\mathbb{R})$ définie par

$$\operatorname{dom} t := \mathcal{H}^1(\mathbb{R}), \quad t[u] = \|u'\|^2 + \sum_{i=1}^{N} g_i |u(x_i)|^2$$

où $x_1 < x_2 < \ldots < x_N$ sont N points de l'axe réel. On pose $t_0[u] := \|u'\|^2$ avec $\mathrm{dom}\, t_0 = \mathrm{dom}\, t$ et $t_1 := t - t_0$. Il est standard de vérifier que t_1 est symétrique et t_0 bornée avec borne relative nulle. On pose

$$V_1 : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}) \to \mathcal{H}^{-1}(\mathbb{R}), \quad V_1 u := \sum_{i=1}^{N} g_i \delta(x - x_i) u(x_i)$$

on a bien que $V_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}^1(\mathbb{R}), \mathcal{H}^{-1}(\mathbb{R})$ et qu'en posant $\Omega_1 = (x_1 - a, x_n + a)$ avec $a > 0$ quelconque que $V_1\chi = \chi V_1$ pour toute application de $C_0^\infty(\mathbb{R})$ donc en particulier pour celles égales à 1 sur Ω_1.

6.2.6 Le courant dans la limite de volume infini : preuve du théorème 2.4.12

(i)$\bar{R} - \bar{R}^D$ est de rang fini

Soit H_L^D l'opérateur obtenu à partir de H_L en ajoutant une condition de Dirichlet en $\pm a$. Pour démontrer que $[\bar{R}_L, \bar{\Pi}_L]$ est de rang fini il suffit de prouver que $R_L - R_L^D$ est de rang fini puisqu'on a la propriété suivante

$$[R_L^D, \Pi_L] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\bar{R}_L, \bar{\Pi}_L] = [\bar{R}_L - \bar{R}_L^D, \bar{\Pi}_L].$$

On rappelle que H_L est défini en (2.18). En particulier $\mathrm{dom}\, H_L \subset \mathcal{H}_0^1(\Gamma_L)$ et donc les opérateurs $\tau^\pm$ qui prennent la trace d'un élément de $\mathrm{dom}\, H_L$ en $\pm a$

$$\forall u \in \mathrm{dom}\, H_L, \quad \tau^\pm u := u(\pm a).$$

sont continus de $\mathcal{H}^1(\Gamma_L)$ dans $\mathbb{C}$.

On précise maintenant la définition et quelques propriétés de H_L^D : son domaine de forme est

$$\mathrm{dom}\, t_L^D := \mathcal{H}_0^1(-L, -L - a) \oplus \mathcal{H}_0^1(-a, a) \oplus \mathcal{H}_0^1(a + L, L),$$

et par conséquent H_L^D se décompose en une somme directe

$$H_L^D = H_L^- \oplus H_L^s \oplus H_L^+.$$

Son domaine est $\mathrm{dom}\, H_L^D = \mathrm{dom}\, H_L^- \oplus \mathrm{dom}\, H_L^s \oplus \mathrm{dom}\, H_L^+$ avec

$$\mathrm{dom}\, H_L^b = \{u \in \mathrm{dom}\, t_L^b,\ -\Delta u + V^s u \in L^2(\Gamma_L^b)\}, \quad b \in \{-, s, +\}.$$

On rappelle que le "potentiel" d'échantillon a été introduit en (2.19). Cette hypothèse est assez générale et ne suppose pas en particulier que V^s est local. On note que grâce aux hypothèses (2.21) et (2.22) les opérateurs qui prennent la trace des dérivées à gauche et à droite de $\pm a$ des éléments de $\mathrm{dom}\, H_L^D$ sont continus et par conséquent on peut définir les opérateurs $\tau_1^\pm : \mathrm{dom}\, H_L^D \to \mathbb{C}$:

$$\tau_1^\pm u := u'(\pm a + 0) - u'(\pm a - 0).$$

Pour pouvoir énoncer le lemme suivant, on définit les opérateurs :

$$A_L := (A_L^-, A_L^+) : L^2(\Gamma_L) \to \mathbb{C}^2, \quad B_L := (B_L^-, B_L^+) : L^2(\Gamma_L) \to \mathbb{C}^2 \tag{6.49}$$

où

$$A_L^\epsilon := \tau^\epsilon R_L, \quad B_L^\epsilon := \tau_1 R_L^D, \quad \epsilon \in \{+, -\} \tag{6.50}$$

et

$$K_L := \begin{pmatrix} \tau^- R_L \tau^{-\star} & \tau^- R_L \tau^{+\star} \\ \tau^+ R_L \tau^{-\star} & \tau^+ R_L \tau^{+\star} \end{pmatrix} : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2. \tag{6.51}$$

Lemme 6.2.23. *Soient $R_L := (H_L + 1)^{-1}$ et $R_L^D := (H_L^D + 1)^{-1}$, alors*

$$\begin{aligned} R_L - R_L^D &= B^\star A = A^\star B \\ &= \sum_{\epsilon=\pm} B^{\epsilon\star} A^\epsilon = \sum_{\epsilon=\pm} A^{\epsilon\star} B^\epsilon \end{aligned} \tag{6.52}$$

$R_L - R_L^D$ reste de rang fini si le paramètre spectral est autre que -1 si l'on choisit un paramètre spectral qui appartient à l'intersection des spectres des Hamiltoniens H_L et H_L^D. Ces formules restent valables dans lorsque L est égal á l'infini.

Preuve : on montre ici que le terme $R_L - R_L^D$ est de rang deux. Pour cela, on calcule $\forall u, v \in \mathcal{H}_L$

$$\begin{aligned} ((R_L - R_L^D)u, v) &= ((R_L - R_L^D)u, v) \\ &= (R_L u, v) - (u, R_L^{D\star} v) = (\hat{u}, H_L^D \hat{v}) - (H_L \hat{u}, \hat{v}), \end{aligned}$$

où l'on a défini $\hat{u} := R_L u$ et $\hat{v} := R_L^{D\star} v$. Ainsi on a

$$\begin{aligned} \left(\left(R_L - R_L^D\right) u, v\right) &= \hat{u}(-a)\left[\bar{\hat{v}}'(-a+) - \bar{\hat{v}}'(-a-)\right] + \hat{u}(a)\left[\bar{\hat{v}}'(a+) - \bar{\hat{v}}'(a-)\right] \\ &= \tau^- \hat{u}\, \overline{\tau_1^- \hat{v}} + \tau^+ \hat{u}\, \overline{\tau_1^+ \hat{v}} \\ &= (\tau^- R_L u, \tau_1^- R_L^{D\star} v)_{\mathbb{C}} + (\tau^+ R_L u, \tau_1^+ R_L^{D\star} v)_{\mathbb{C}} \\ &= \sum_{\epsilon=\pm} ((\tau_1^\epsilon R_L^{D\star})^\star \tau^\epsilon R_L u, v)_{\mathbb{C}} \end{aligned} \tag{6.50}$$

On a donc l'expression suivante pour l'opérateur $R_L - R_L^D$:

$$\begin{aligned} R_L - R_L^D &= \sum_{\epsilon=\pm} (\tau_1^\epsilon R_L^{D\star})^\star \tau^\epsilon R_L \qquad (6.51) \\ &= \sum_{\epsilon=\pm} B^{\epsilon\star} A^\epsilon \\ &= \sum_{\epsilon=\pm} A^{\epsilon\star} B^\epsilon \quad \text{car } R_L - R_L^D \text{ est autoadjoint} \qquad (6.51) \end{aligned}$$

Comme A^ϵ est de rang 1 pour chaque ϵ, $R_L - R_L^D$ est (au plus) de rang 2. Il est évident que les calculs sont les mêmes si on change le paramétre spectral -1 des résolvantes en z n'appartenant pas aux spectres de H et H^D. On voit aussi que la propriété $\operatorname{rg} A^\epsilon = 1$ reste valabe si $L = \infty$. ∎

Lemme 6.2.24. *Dans le cas du "modèle ponctuel", où $a = 0$, l'opérateur $R_L - R_L^D$ s'exprime comme :*

$$R_L - R_L^D = A^\star B = B^\star A = A^\star K^{-1} A, \quad A := \tau R_L,\ B := \tau_1 R_L^{D\star},\ K := \tau R \tau^\star \tag{6.51}$$

où

$$\begin{aligned} \tau : \mathcal{H}^1(\mathbb{R}) &\rightarrow \mathbb{C} \\ u &\rightarrow u(0) \end{aligned} \tag{6.51}$$

et

$$\begin{aligned} \tau_1 : dom H_L^D &\rightarrow \mathbb{C} \\ u &\rightarrow u'(0+) - u'(0-) \end{aligned} \tag{6.51}$$

Ces résultats restent valables lorsque L est égal à l'infini.

(ii)Convergence du courant

Théorème 6.2.25. *Le courant pour le système tronqué défini dans (2.59) converge quand L tend vers l'infini vers*

$$j_\eta^{\pm}(t) = -i\mathrm{tr}\left((H+1)\rho_\eta(t)(H+1)[R,\Pi^{\pm}]\right) \tag{6.51}$$

Pour démontrer le théorème 2.4.12 on doit appliquer le lemme 6.2.26

Lemme 6.2.26. *Soit A_L un opérateur qui converge faiblement vers la limite A lorsque L tend vers l'infini. Soit B_L un opérateur qui converge dans la norme trace vers B. Alors tr$(A_L B_L)$ converge vers tr(AB).*

Preuve : comme $A_L \overset{w}{\rightarrow} A$, on sait que

$$M := \sup_{L>0} \|A_L\| < \infty$$

Comme B est à trace, on a

$$\forall \epsilon > 0, \exists B_\epsilon, B_\epsilon^c, \text{tels que} B = B_\epsilon + B_\epsilon^c$$

où B_ϵ est de rang fini et $\|B_\epsilon^c\|_1 < \epsilon$. Enfin, comme $B_L \overset{\|.\|_1}{\rightarrow} B, \exists L_0 > 0$,

$$\forall L > L_0, \|B_L - B\|_1 < \epsilon.$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\left(A_L B_L - AB\right) &= \mathrm{tr}\left(\left(A_L - A\right)B\right) + \mathrm{tr}\left(A_L\left(B_L - B\right)\right) \\ &= \mathrm{tr}\left(\left(A_L - A\right)B_\epsilon\right) + \mathrm{tr}\left(\left(A_L - A\right)B_\epsilon^c\right) + \mathrm{tr}\left(A_L\left(B_L - B\right)\right) \end{aligned}$$

et donc, on a

$$\left|\mathrm{tr}\left(A_L B_L - AB\right)\right| < \left|\mathrm{tr}\left(\left(A_L - A\right)B_\epsilon\right)\right| + 3M\epsilon$$

Il reste à montrer que $\lim_{L\rightarrow+\infty} \mathrm{tr}\left(A_L B_L - AB\right)B_\epsilon = 0$. Mais comme B_ϵ est de rang fini, il suffit de considérer le cas où B_ϵ est de rang 1, c'est-à-dire $B_\epsilon = (.,\varphi)\,\psi$. Alors, en utilisant le lemme 6.2.27 énoncé et démontré ci-dessous :

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\left(\left(A_L - A\right)(.,\varphi)\,\psi\right) &= \mathrm{tr}\left((.,\varphi)\left(A_L - A\right)\psi\right) \\ &= \left(\left(A_L - A\right)\psi, \varphi\right) \overset{L\rightarrow+\infty}{\rightarrow} 0 \quad \blacksquare \end{aligned} \tag{6.49}$$

Lemme 6.2.27. *Soit $P := (\cdot, u)v$ un opérateur de rang 1 dans un espace de Hilbert séparable $\mathcal{H}$ alors*

$$\operatorname{tr} P = (v, u)$$

Preuve. Si u ou v est nul, alors c'est évident. Sinon soit $\mathcal{B} := \{\phi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ une base orthonormée de $\mathcal{H}$ qui contient $\phi_1 := u/\|u\|$, alors

$$\operatorname{tr} P = \sum_{n=1}^{\infty}(P\phi_n, \phi_n) = \sum_{n=1}^{\infty}((\phi_n, u)v, \phi_n) = (v, u).((\phi_1, u)v, \phi_1).$$

On a besoin du lemme suivant pour pouvoir appliquer le lemme 6.2.26 et prouver la convergence du courant.

Lemme 6.2.28. *L'opérateur $\bar{H}_L\bar{\rho}_{\eta,L}(t)\bar{H}_L$ converge faiblement vers $H\rho_\eta(t)H$ lorsque L tend vers moins l'infini.*

Preuve : on commence par montrer que $(H_L + 1)\rho_{\eta,L}(t)(H_L + 1)$ est borné uniformément par rapport à t, L et η.

Lemme 6.2.29.

$$\sup_{L,\eta} \|(H_L + 1)\rho_{\eta,L}(H_L + 1)\| < +\infty \tag{6.49}$$

Preuve : on définit (on rappelle que $U_{\eta,L}(t, s)$ a été défini en (2.4.1)) :

$$F(t, s) := U_{\eta,L}(t, s)^\star(H_{\eta,L}(t) + 1)U_{\eta,L}(t, s)R_L \tag{6.49}$$

On a tout d'abord pour tout $\varphi, \psi \in \mathrm{dom}H_L$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(F(t, s)\varphi, \psi) &= \frac{d}{dt}((H_{\eta,L}(t) + 1)U_{\eta,L}(t, s)R_L\varphi, U_{\eta,L}(t, s)\psi)\\ &= \eta(\dot\chi(\eta t)V_L U_{\eta,L}(t, s)R_L\varphi, U_{\eta,L}(t, s)\psi)\end{aligned} \tag{6.49}$$

Comme le membre de droite dans (6.49) est une forme bilinéaire bornée par

$$\eta\,\|\dot\chi(\eta t)\|\,\|V_L\|\,\|\varphi\|\,\|\psi\|$$

on peut donc étendre cette estimation à tout $\varphi, \psi \in \mathcal{H}_L$ par densité. Cela montre que $F(t, s)$ est dérivable par rapport a t en norme et que

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}F(t, s) &= \eta U_{\eta,L}(t, s)^\star\dot\chi(\eta t)V_L U_{\eta,L}(t, s)R_L\\ &= \eta U_{\eta,L}(t, s)^\star\dot\chi(\eta t)V_L R_{\eta,L}\,(H_{\eta,L} + 1)\,U_{\eta,L}(t, s)R_L\\ &= \eta U_{\eta,L}(t, s)^\star\dot\chi(\eta t)V_L R_{\eta,L}U_{\eta,L}(r, s)F(t, s)\end{aligned}$$

où $R_{\eta,L} := (H_{\eta,L} + 1)^{-1}$. En intégrant par rapport à t on trouve

$$F(t, s) = F(s, s) + \eta\int_s^t U_{\eta,L}(r, s)^\star\dot\chi(\eta r)V_L R_{\eta,L}(r)U_{\eta,L}(r, s)F(r, s)dr$$

Soit encore

$$\begin{aligned}\|F(t,s)\| &\leq \|F(s,s)\| + \eta \int_s^t |\dot\chi(\eta r)|\, \|V_L\|\, \|R_{\eta,L}(r)\|\, \|F(r,s)\|\, dr \\ &\leq \|F(s,s)\| + \sup_r \|V_L\|\, \|R_{\eta,L}(r)\| \int_s^t |\eta\dot\chi(\eta r)|\, \|F(r,s)\|\, dr\end{aligned}$$

et en appliquant le lemme de Gronwal

$$\begin{aligned}\|F(t,s)\| &\leq \|F(s,s)\| + \int_s^t \|F(s,s)\|\, dr\, |\eta\dot\chi(\eta r)|\, e^{\int_r^t |\eta\dot\chi(\eta\sigma)|d\sigma} \\ &\leq C + \int_{-\infty}^t dr C\, |\eta\dot\chi(\eta r)|\, e^{\|\dot\chi\|_{1,\mathbb{R}_-}} \\ &= C\left(1 + \|\dot\chi\|_{1,\mathbb{R}_-}\, e^{\|\dot\chi\|_{1,\mathbb{R}_-}}\right)\end{aligned}$$

où l'on a posé

$$C := \sup_{s\leq 0} \|F(s,s)\| \quad \text{et} \quad \|\dot\chi\|_{1,\mathbb{R}_-} = \int_{-\infty}^0 dr\, |\dot\chi(r)|$$

Il est facile de vérifier que C est borné uniformément par rapport à L et η car

$$\|F(r,r)\| = \|(H_{\eta,L}(r)+1)\, R_L\| \leq 1 + \|\chi\|_{\infty,\mathbb{R}_-}\, \|V_L\|\, \|R_L\|$$

(on rappelle que R_L converge fortement lorsque L tend vers l'infini).
On obtient ainsi que $\|F(t,s)\|$ est borné uniformément par rapport à s, t dans $\mathbb{R}_-$, $L>0$ et $\eta>0$. Comme $\chi(\eta t)V_L$ est borné uniformément par rapport à t,η et L, il suit que $(H+1)U_{\eta,L}(t,s)R_L$ est aussi borné uniformément en t,η et L, et donc $(H_L+1)\Omega_{\eta,L}(t,s)R_L$ est borné uniformément par rapport à t,η et L. Finalement, on obtient :

$$\sup_{s,t\leq 0, L,\eta>0} \|(H_L+1)\Omega_{\eta,L}(t,s)R_L\| < +\infty \tag{6.41}$$

et donc en particulier

$$\sup_{t\leq 0, L,\eta>0} \|(H_L+1)\Omega_{\eta,L}(t)R_L\| < +\infty$$

Pour terminer la démonstration, il suffit de remarquer que

$$\sup_{L>0} \left\|(H_L+1)^2 f_L\right\| < +\infty \quad \blacksquare$$

On retourne à la preuve du lemme 6.2.28. Soit $u, v \in \mathrm{dom}\bar H_L$, alors

$$\left((\bar H_L+1)\bar\rho_{\eta,L}(t)(\bar H_L+1)u, v\right) = \left(\rho_{\eta,L}(t)(\bar H_L+1)u, (\bar H_L+1)v\right)$$

converge vers

$$(\rho_\eta(t)(H+1)u, (H+1)v) = ((H+1)\rho_\eta(t)(H+1)u, v)$$

d'après la proposition 6.2.11 et le théorème 2.4.11. Cela prouve la convergence faible sur $\mathrm{dom}H$ et donc sur $\mathcal{H}$ puisque $(H_L+1)\rho_{\eta,L}(t)(H_L+1)$ est borné uniformément par rapport à L. ∎
Preuve du théorème 2.4.12 : c'est une conséquence des lemmes 6.2.29, 2.4.14 et 6.2.26. ∎

6.3 Annexe au chapitre 4

6.3.1 La formule de Landauer-Büttiker : démonstration du théorème 5.1.2 .

On rappelle le théorème :

Théorème 6.3.1. *On note $\mathcal{T}_v^{u,\widehat{u}}(E)$ le coefficient de transition entre les deux fils u et $\widehat{u}$ où $\widehat{u} = -u, u = \pm$ pour un biais de potentiel v et pour un paramètre spectral E. Le courant traversant le fil u est donné par la formule de Landauer-Büttiker et s'exprime comme suit :*

$$j_u = 2\pi \int_{\sigma(H_{v_-}^-)\cap\sigma(H_{v_+}^+)} (f(E - v_{\widehat{u}}) - f(E - v_u))\, \mathcal{T}_v^{u\widehat{u}}(E)\, dE \tag{6.41}$$

Preuve : Soit E_1 l'énergie du premier mode transverse et

$$\widetilde{P}_E^{\sigma,n} := (., \widetilde{\psi}_E^{\sigma,n})\widetilde{\psi}_E^{\sigma,n}, \quad \sigma = \pm$$

le projecteur propre sur $\sigma_{ac}(H^\sigma) = [E_1, \infty[$ le spectre absolument continu de $H^\sigma = -\Delta$ sur $L^2(\Gamma^\sigma)$ avec condition de Dirichlet sur $\partial\Gamma^s$. On récrit alors

$$(H_V^D + a)^2 f(H^D) = \int_{E_1}^\infty dE \sum_{n\in N(E)} \sum_{\sigma=\pm} (E + v_\sigma + a)^2 f(E) \widetilde{P}_E^{\sigma,n}$$

Soit

$$\psi_E^{\sigma,n} := \Omega_0^+(H_V, H_V^D)\widetilde{\psi}_E^{\sigma,n}, \quad \text{et} \quad P_E^{\sigma,n} := \Omega_0^+(H_V, H_V^D)\widetilde{P}_E^{\sigma,n}\ \Omega_0^{+\star}(H_V, H_V^D) = (., \psi_E^{\sigma,n})\psi_E^{\sigma,n}$$

On a

$$\begin{aligned}
X &= \Omega_0^+ \int_{E_1}^\infty dE \sum_{n\in N(E)} \sum_{\sigma=\pm} (E + v_\sigma + a)^2 f(E)\, \widetilde{P}_E^{\sigma,n}\ \Omega_0^{+\star} \\
&= \Omega_0^+ \int_{\widehat{v}+E_1}^\infty dE \sum_{n\in N(E)} \sum_{\sigma=\pm} (E + a)^2 f(E - v_\sigma)\, \widetilde{P}_{E-v_\sigma}^{\sigma,n}\ \Omega_0^{+\star} + \\
&+ \Omega_0^+ \int_{\widetilde{v}+E_1}^{\widehat{v}+E_1} dE (E + a)^2 f(E - v_{\widetilde{\sigma}})\, \widetilde{P}_{E-\widetilde{v}}^{\widetilde{\sigma},n}\ \Omega_0^{+\star}
\end{aligned}$$

où on a défini $\widehat{v}, \widetilde{v}$ et $v_{\widetilde{\sigma}}$ comme suit :

$$\widehat{v} := \max\{v_-, v_+\}, \quad \widetilde{v} := \min\{v_-, v_+\} = v_{\widetilde{\sigma}}.$$

Il suit

$$\begin{aligned}
X &= \int_{\widehat{v}+E_1}^\infty dE \sum_{n\in N(E)} \sum_{\sigma=\pm} (E + a)^2 f(E - v_\sigma) P_{E-v_\sigma}^{\sigma,n} + \\
&+ \int_{\widetilde{v}+E_1}^{\widehat{v}} dE \sum_{n\in N(E)} (E + a)^2 f(E - \widetilde{v}) P_{E-\widetilde{v}}^{\widetilde{\sigma},n} \\
X\Delta R\Pi^u &= \int_{\widehat{v}+E_1}^\infty dE \sum_{n\in N(E)} \sum_{\sigma=\pm} (E + a)^2 f(E - v_\sigma) P_{E-v_\sigma}^{\sigma,n}\, \Delta R\Pi^u + \\
&+ \int_{\widetilde{v}+E_1}^{\widehat{v}+E_1} dE \sum_{n\in N(E)} (E + a)^2 f(E - \widetilde{v}) P_{E-\widetilde{v}}^{\widetilde{\sigma},n}\, \Delta R\Pi^u
\end{aligned}$$

Il vient

$$\begin{aligned}
2\mathrm{Im}\ \mathrm{tr}\, X\Delta R &= 2\mathrm{Im}\int_{\widehat{v}+E_1}^{\infty} dE \sum_{n\in N(E)}\sum_{\sigma=\pm}(E+a)^2 f(E-v_\sigma)\mathrm{tr}\,(\Delta R\Pi^u, \psi^{\sigma,n}_{E-v_\sigma})\psi^{\sigma,n}_{E-v_\sigma} + \\
&+ 2\int_{\widetilde{v}+E_1}^{\widehat{v}+E_1} dE \sum_{n\in N(E)}(E+a)^2 f(E-v_{\widetilde{\sigma}})\mathrm{tr}\,(\Delta R\Pi^u, \psi^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}})\psi^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}} \\
&= 2\int_{\widehat{v}+E_1}^{\infty} dE \sum_{n\in N(E)}\sum_{\sigma=\pm}(E+a)^2 f(E-v_\sigma)\mathrm{Im}\ <\Delta R\Pi^u\psi^{\sigma,n}_{E-v_\sigma}, \psi^{\sigma,n}_{E-v_\sigma}> + \\
&+ 2\int_{\widetilde{v}+E_1}^{\widehat{v}+E_1} dE \sum_{n\in N(E)}(E+a)^2 f(E-v_{\widetilde{\sigma}})\mathrm{Im}\ <\Delta R\Pi^u\psi^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}, \psi^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}> \\
&= \jmath_u + \widehat{\jmath}_u \qquad (6.31)
\end{aligned}$$

Lemme 6.3.2.

$$\widehat{j_u} = 0$$

Preuve du lemme 6.3.2 : on a

$$\Delta R\Pi_u\psi^{\sigma,n}_E = \delta_{\sigma,u}\Delta R\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_E - \Delta R\Pi_u(R^D_V - R_E(a) - i0+)^{-1}T(R(E))\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_E$$

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Im}\ <\Delta R\Pi^u\psi^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}, \psi^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}> \\
=\ &\delta_{u\widetilde{\sigma}}\mathrm{Im}\ <\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}, T(R(E))\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-\widetilde{v}}> - \\
&-\mathrm{Im}\ <\Pi_u(R^D_V - R_E(a) - i0+)^{-1}\Delta R T(R(E))\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}, T(R(E))\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}> \\
=\ &\frac{\delta_{u\widetilde{\sigma}}}{(E+a)^2}\mathrm{Im}\,\overline{T}^{\widetilde{\sigma}\widetilde{\sigma}}_{nn}(E) - \mathrm{Im}\ <(R^u_V - R_E(a) - i0+)^{-1}T(R(E))\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}, T(R(E))\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}>
\end{aligned} \qquad (6.28)$$

Or pour $E\in(E_1+\widetilde{v}, E_1+\widehat{v})$ on a $T^{\widetilde{\sigma}\widehat{\sigma}}_{nn'}(E)=0$, d'où pour u fixé,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Im}\ &<(R^u_V - R_E(a) - i0+)^{-1}\Delta R T(R(E))\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}, T(R(E))\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}> \\
&= \int_{E_1}^{\infty}\sum_{n'\in N(E)}\frac{1}{R(\lambda)-R_E(a)-i0+}|<T(R(E))\widetilde{\psi}^{\widetilde{\sigma},n}_{E-\widetilde{v}}, \widetilde{\psi}^{u,n'}_{E-v_u}>|^2 dE \\
&= -\sum_{n'\in N(E)}\frac{\pi}{(E+a)^2}|T^{\widetilde{\sigma}\widetilde{\sigma}}_{nn'}(E)|^2\delta_{u,\widetilde{\sigma}} \qquad (6.27)
\end{aligned}$$

On utilise le théoèrme optique pour récrire

$$\begin{aligned}
\mathrm{Im}\,T^{\widetilde{\sigma}\widetilde{\sigma}}_{nn}(E) &= -\pi\sum_{n',\sigma}|T^{\widetilde{\sigma}\sigma}_{nn'}(E)|^2 \\
&= -\pi\sum_{n'}|T^{\widetilde{\sigma}\widetilde{\sigma}}_{nn'}(E)|^2 - \pi\sum_{n'}|T^{\widetilde{\sigma}\widehat{\sigma}}_{nn'}(E)|^2 = -\pi\sum_{n'}|T^{\widetilde{\sigma}\widetilde{\sigma}}_{nn'}(E)|^2 \qquad (6.27)
\end{aligned}$$

car $T^{\widetilde{\sigma}\widehat{\sigma}}_{nn'}(E)=0$ pour $E\in(E_1+\widetilde{v}, E_1+\widehat{v})$. En remplaçant (6.27) et (6.27) dans (6.28) on a alors que $\widehat{\jmath_u}$ est nul. ∎

On revient à la preuve du théorème 5.1.2. Il reste à montrer

$$\jmath_u = j_u = 2\pi \int_{\widehat{v}+E_1}^{\infty} dE \sum_{n,n' \in N(E)} \left(f(E-v_{\widehat{u}}) - f(E-v_u)\right) |T^{u\widehat{u}}_{nn'}(E)|^2$$

On utilise la formule de Lippmann Schwinger (voir Annexe 6.3.3) :

$$\begin{aligned}
& \mathrm{Im} \ < \Delta R \Pi^u \psi^{\sigma,n}_{E-v_\sigma}, \psi^{\sigma,n}_{E-v_\sigma} >= \\
= \ & \mathrm{Im} \ \delta_{u\sigma} < \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma}, T(R(E)) \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma} > - \\
& \quad - < \Pi_u (R^D_V - R_E(a) - i0+)^{-1} T(R(E)) \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma}, T(R(E)) \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma} > \\
= \ & \frac{\delta_{u\sigma}}{(E+a)^2} \mathrm{Im} \ \overline{T}^{\sigma\sigma}_{nn}(E) - \mathrm{Im} \ < \Pi_u (R^D_V - R_E(a) - i0+)^{-1} T(R(E)) \widetilde{\psi}^{u,n}_{E-v_\sigma}, T(R(E)) \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma} >
\end{aligned} \tag{6.24}$$

Ainsi, en utilisant la formule de Sokotskii-Plemelj pour u fixé :

$$\begin{aligned}
& \mathrm{Im} \quad < (R^u_V - R_E(a) - i0+)^{-1} T(R(E)) \widetilde{\psi}^{u,n}_{E-v_\sigma}, T(R(E)) \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma} >= \\
= \ & \mathrm{Im} \int_{\mathrm{spect}(H^u_{v_u})} \sum_{n' \in N(\lambda)} \frac{1}{R(\lambda) - R_E(a) - i0+} d < P^{u,n'}_{E-v_u} T(R(E)) \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma}, T(R(E)) \widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E-v_\sigma} > \\
= \ & \mathrm{Im} \int_{E_1+}^{\infty} \sum_{n' \in N(\lambda)} \frac{1}{R(\lambda) - R_E(a) - i0+} \frac{T^{u\sigma}_{nn'}(E) \overline{T}^{\sigma u}_{nn'}(E)}{(E+a)^4} d\lambda \\
= \ & -\frac{\pi}{(E+a)^2} \sum_{n' \in N(E)} |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2
\end{aligned} \tag{6.22}$$

On a alors

$$\int_{\widehat{v}+E_1}^{\infty} dE \sum_{n,n' \in N(E)} \sum_{\sigma=\pm} f(E-v_\sigma) \left(\pi |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2 + \mathrm{Im} \, \overline{T}^{\sigma\sigma}_{nn}(E) \delta_{u,\sigma}\right) \tag{6.23}$$

$$= \int_{\widehat{v}+E_1}^{\infty} dE \sum_{n,n' \in N(E)} \sum_{\sigma=u,\widehat{u}} \left(\pi |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2 f(E-v_\sigma) + \mathrm{Im} \, \overline{T}^{uu}_{nn}(E) f(E-v_u)\right) \tag{6.24}$$

On récrit grâce qu théorème optique :

$$\mathrm{Im} \, T^{uu}_{nn}(E) = -\pi \sum_{n',\sigma} |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2$$

La ligne de calcul (6.24) devient donc

$$\pi \int_{\widehat{v}+E_1}^{\infty} dE \sum_{n,n' \in N(E)} \sum_{\sigma=u,\widehat{u}} \left(f(E-v_\sigma) |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2 - f(E-v_u) |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2\right)$$

On a

$$\sum_{\sigma=u,\widehat{u}} \left(f(E-v_\sigma) |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2 - f(E-v_u) |T^{u\sigma}_{nn'}(E)|^2\right) = \left(f(E-v_{\widehat{u}}) - f(E-v_u)\right) |T^{u\widehat{u}}_{nn'}(E)|^2$$

Soit $\mathcal{T}^{u\widehat{u}}_{nn'}(E) = \sum_{n,n' \in N(E)} |T^{u\widehat{u}}_{nn'}(E)|^2$, alors, l'expression du courant est :

$$j_u = 2\pi \int_{\widehat{v}+E_1}^{\infty} \left(f(E-v_{\widehat{u}}) - f(E-v_u)\right) \mathcal{T}^{u\widehat{u}}_{nn'}(E) dE \quad \blacksquare$$

6.3.2 Formule de Krein et transmittance

Dans cette partie, on explicite une formule clé des chapitres 4 et 5. En effet, on se base sur ladite **formule de Krein** pour exprimer la transmittance, et par conséquent, la matrice de diffusion dans la formule de Landauer-Büttiker. En effet, on traite de la diffusion entre un système totalement couplé $\Omega \in \mathbb{R}^n$ décrit par l'opérateur Hamiltonien H dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\Omega)$ et un système découplé décrit par l'Hamiltonien H^D dans $L^2(\Omega) \approx L^2(\Omega_-) \oplus L^2(\Omega_s) \oplus L^2(\Omega_+)$.

Soit $\tau^\pm$ et τ^s les opérateurs de trace tels que

$$\tau^\pm : \mathcal{H} \to L^2(\partial\Omega_\pm), \quad \tau^s : \mathcal{H} \to L^2(\partial\Omega_s) \tag{6.24}$$

et agissant sur les fonctions $f \in \mathcal{H}$ comme suit : $\tau^{\pm/s}u(x) = u(x), x \in \partial\Omega^{\pm/s}$. On définit

$$\begin{aligned} A_z &: \mathcal{H} \to \bigoplus_{a\in-,s,+} L^2(\partial\Omega^a), \quad A_z u = \sum_a A_z^a u, \quad A_z^a := \tau^a R_V(z) \\ B_z &: \mathcal{H} \to \bigoplus_{a\in-,s,+} L^2(\partial\Omega^a), \quad B_z u = \sum_a B_z^a u, \quad B_z^a := \tau_1^a R^D = \tau^a \partial_n R^D(\bar{z}) \end{aligned} \tag{6.23}$$

On rappelle la formule de Krein (voir Annexe 6.3.2) :

$$R(z) - R^D(z) = B_{\bar{z}}^\star A_z = \sum_{a\in\{-,s,+\}} B_{\bar{z}}^{a\star} A_z^a \tag{6.23}$$

On peut énoncer le théorème suivant :

Théorème 6.3.3. *L'opérateur T définit précédemment est donné par*

$$T(R(E) + i0+) = -B_z^\star L_E^{-1} B_z,$$

où L_E^{-1} est défini comme suit :

$$A_E = -L_E^{-1} B_E$$

Preuve : on rappelle

$$T(R(E + i0+)) = \Delta R_z - \Delta R_z (R_V - R_E(a) - i0+)^{-1} \Delta R_z \tag{6.23}$$

où $\Delta R_z = R_V(z) - R_V^D(z)$. La formule de Krein dit que $R_V(z) = (H_V - z)^{-1} = R_V^D(z) - B_{\bar{z}}^\star L_z^{-1} B_z$, ce qui permet de récrire $T(R(E + i0+)$ comme suit :

$$\begin{aligned} T(R(E) + i0+) &= \Delta R_z - \Delta R_z (R_V - R_E(a) - i0+)^{-1} \Delta R_z \\ &= -B_z^\star (L_z^{-1} + L_z^{-1}(B_z (R_V - R_E(a) - i0+)^{-1} B_z^\star L_z^{-1})) B_z \end{aligned} \tag{6.23}$$

On appelle

$$\alpha := -\frac{1 + i\epsilon(E + a)}{E + a}, \quad \beta := \frac{E - i\epsilon(E + a)a}{1 + i\epsilon(E + a)}, \quad R_V(-a) := (H_V + a)^{-1}, \quad R_E(a) := (E + a)^{-1},$$

et il vient

$$R_V - R_E(a) - i\epsilon = -\frac{H_V - E}{(E + a)(H_V + a)} - i\epsilon = \alpha \left(R_V(-a)(H_V - \beta)\right) \tag{6.23}$$

Grâce aux identités suivantes :$\alpha(a+\beta) = -1$, $\alpha^{-2}(a+\beta)^{-1} = -\alpha^{-1}$, et $\alpha^{-2}(a+\beta)^{-2} = 1$, on inverse (6.3.2) et on obtient

$$(R_V - R_E(a) - i\epsilon)^{-1} \quad = \quad \alpha^{-1}(1 + (a+\beta)R_V(\beta)) = \alpha^{-1} - \alpha^{-2}R_V^D(\beta) + \alpha^{-2}B_\beta^\star L_\beta^{-1}B_\beta \tag{6.23}$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned}
& B(R_V - R_E(a) - i\epsilon)^{-1}B^\star \\
= \quad & \sum_{a,a'}(\alpha^{-1}\tau_1^a R_V^{D2}\tau_1^{a'\star}) - \alpha^{-2}BR_V^D(\beta)B^\star + \alpha^{-2}BB_\beta^\star L_\beta^{-1}B_\beta B^{a'\star} \\
= \quad & \sum_{a,a'}(\alpha^{-1}\tau_1^a R_V^{D2}\tau_1^{a'\star} - \alpha^{-2}\tau_1^a R_V^D R_V(\beta)^D B^\star + \sum_{cc'}\alpha^{-2}\tau_1^a R_V^D R_V^D(\beta)\tau_1^{c'\star}(L^{c'c})_\beta^{-1}\tau_1^c R_V^D(\beta)R_V^D\tau_1^{a'\star}) \\
= \quad & \sum_{a,a'}(\alpha^{-1}\tau_1^a R_V^{D2}\tau_1^{a'\star} + \frac{\alpha^{-2}}{a+\beta}(\tau_1^a R_V^D B^\star - \tau_1^a R_V^D(\beta)B^\star)) - \\
- \quad & \sum_{a,a'}\sum_{c,c'}(\frac{\alpha^{-2}}{(a+\beta)^2}\tau_1^a(R_V^D - R_V^D(\beta))\tau_1^{c'\star}(L^{c'c})_\beta^{-1}\tau_1^c(R_V^D(\beta) - R_V^D)\tau_1^{a'\star}) \\
= \quad & \sum_{a,a'}\alpha^{-1}\tau_1^a R_V^{D2}\tau_1^{a'\star} - \alpha^{-1}(\tau_1^a R_V^{D2}\tau_1^{a'\star} - \tau_1^a R_V^D(\beta)R_V^D\tau_1^{a'\star}) - (L_z - L_z L_\beta^{-1}L_z - L_\beta + L_z) \\
= \quad & \sum_{a,a'}\frac{\alpha^{-1}}{a+\beta}(\tau_1^a R_V^D(\beta)\tau_1^{a'\star} - \tau_1^a R_V^D\tau_1^{a'\star}) - 2L_z + L_\beta - L_z L_\beta^{-1} \\
= \quad & -L_\beta + L_z - 2L_z + L_\beta + L_z L_\beta^{-1}L_z \\
= \quad & -L_z + L_z L_\beta^{-1}L_z
\end{aligned} \tag{6.16}$$

On a donc :

$$\begin{aligned}
T(R(E+i0+)) \quad &= \quad -B_z^\star(L_z^{-1} + L_z^{-1}(-1 + L_z L_\beta^{-1}))B_z \\
&= \quad -B_z^\star L_\beta^{-1}B_z \quad \blacksquare
\end{aligned} \tag{6.16}$$

On définit les éléments de matrice $T_{nn'}^{\alpha\alpha'}(E)$ de la manière suivante :

$$T_{nn'}^{\alpha\alpha'}(E) := < T(E)\widetilde{\psi}_E^{\alpha,n}, \widetilde{\psi}_E^{\alpha',n'} >$$

où $\alpha = \pm$ et $n, n' \in N(E)$, $N(E = \{n \geq 1, E \geq E_n + \widehat{v}\}$. On a alors

Proposition 6.3.4.

$$T_{nn'}^{\sigma\sigma'}(E) = (E+a)^2 < T(R(E) + i0+)\widetilde{\psi}_E^{\sigma,n}, \widetilde{\psi}_E^{\sigma',n'} >$$

Preuve : on sait grâce au principe d'invariance (voir [60],théorème XI.11) que l'on a

$$S(H_V, H_V^D) = S(-R_V, -R_V^D)$$

car la fonction $R : x \longmapsto \frac{1}{x+a}$ est admissible. On sait, voir le théorème XI.42 de [60] que la matrice S est donnée par :

$$S(E, E') = \delta(E - E') - 2i\pi\delta(E - E')T(E, E') \tag{6.16}$$

S est totalement déterminée par les valeurs de $T(E,E')$ telles que $E=E'$. On appelle cet ensemble de valeurs la matrice T "on-shell." On sait donc que l'on doit avoir

$$\delta(E-E^{'})<T(E^{'}+i0+)\widetilde{\psi}^{u}_{E},\widetilde{\psi}^{v}_{E'}>=\delta(R(E)-R(E'))<T(R(E^{'})+i0+)\widetilde{\psi}^{u}_{E},\widetilde{\psi}^{v}_{E'}>$$

Comme $\delta(R(E)-R(E'))=\delta\left((E-E')R'(E)\right)=\frac{1}{|R'(E)|}\delta(E-E')=(E+a)^2\delta(E-E')$. Il vient alors

$$T(E^{'}+i0+)=(E+a)^2T(R(E^{'})+i0+)\Rightarrow T^{\sigma\sigma'}_{nn'}(E)=(E+a)^2<T(R(E^{'})+i0+)\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E},\widetilde{\psi}^{\sigma',n'}_{E}> \quad \blacksquare \tag{6.16}$$

Lemme 6.3.5.

$$\Delta R\psi^{\sigma,n}_{E}=T(R(E))\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E}$$

Preuve. Ce lemme est la conséquence de (5.5) et du théorème d'absorption limite voir [16] :

$$w\psi^{\sigma,n}_{E}=w\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E}-\lim_{\epsilon\searrow 0}w(R^{D}_{V}-R_{E}(a)-i\epsilon)^{-1}w\{w^{-1}\Delta Rw^{-1}\}w\psi^{\sigma,n}_{E}$$

$$w\psi^{\sigma,n}_{E}=w\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E}-\lim_{\epsilon\searrow 0}w\left(R_{V}-R_{E}(a)-i\epsilon\right)^{-1}w\{w^{-1}\Delta Rw^{-1}\}w\widetilde{\psi}^{\sigma,n}_{E}$$

où ω est un poids choisi judicieusement. $\blacksquare$

6.3.3 Formule de Lippmann Schwinger

Lemme 6.3.6. *On a les deux relations suivantes :*

$$\psi^{\sigma}_{k_\sigma}=\widetilde{\psi^{\sigma}_{k_\sigma}}-(R^{D}-R(\lambda)-i0+)^{-1}\Delta R\psi^{\sigma}_{k_\sigma} \tag{6.14}$$

$$\psi^{\sigma}_{k_\sigma}=(1-(R-R(\lambda)-i0+)^{-1}\Delta R)\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma} \tag{6.14}$$

Preuve : on écrit

$$R(H)\psi^{\sigma}_{k_\sigma}=R(\lambda)\psi^{\sigma}_{k_\sigma}\Rightarrow(\Delta R+R^{D}-R(\lambda))\psi^{\sigma}_{k_\sigma}=0$$

$$(R^{D}-R(\lambda))(1+(R^{D}-R(\lambda)-i0^{+})^{-1}\Delta R)\psi^{\sigma}_{k_\sigma}=0\Rightarrow(1+(R^{D}-R(\lambda)-i0^{+})^{-1}\Delta R)\psi^{\sigma}_{k_\sigma}=\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma}$$

et finalement :

$$\psi^{\sigma}_{k_\sigma}=\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma}-(R^{D}-R(\lambda)-i0^{+})^{-1}\Delta R\psi^{\sigma}_{k_\sigma}, \quad \blacksquare$$

Preuve de (6.3.6) : on calcule cette fois

$$R^{D}(H)\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma}=R(\lambda)\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma}\Rightarrow(\Delta R+R-R(\lambda))\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma}=0$$

$$(R-R(\lambda))(1-(R-R(\lambda)-i0^{+})^{-1}\Delta R)\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma}=0\Rightarrow(1-(R-R(\lambda)-i0^{+})^{-1}\Delta R)\widetilde{\psi}^{\sigma}_{k_\sigma}=\psi^{\sigma}_{k_\sigma} \quad \blacksquare$$

6.4 Annexe du chapitre 5

On donne ici le théorème utile pour la première partie de la preuve du théorème principal du chapitre 5. Ce théorème est tiré de l'article de de Oliviera et Vierri de 2011, intitulé "On norm resolvent and quadratic form convergences in asymptotic thin spatial waveguides", voir [55].

Théorème 6.4.1. *Soient deux suites de formes quadratiques, sesquilinéaires, fermées et positives* $(a_\varepsilon)_\varepsilon$ *et* $(q_\varepsilon)_\varepsilon$ *dans un espace d'Hilbert* $\mathcal{H}$ *séparable et avec* $\mathrm{dom}\,(a_\varepsilon) = \mathrm{dom}\,(q_\varepsilon) = \mathcal{D}$ *pour tout* $\varepsilon > 0$ *et* A_ε, Q_ε *les opérateurs auto-adjoints associés à* $(a_\varepsilon)_\varepsilon$ *et* $(q_\varepsilon)_\varepsilon$ *respectivement. On suppose qu'il existe un* λ *tel que* $a_\varepsilon, q_\varepsilon \geq \lambda$ *pour tout* $\varepsilon > 0$ *et que*

$$|a_\varepsilon(\psi) - q_\varepsilon(\psi)| \leq q(\varepsilon) q_\varepsilon(\psi), \quad \forall \psi \in \mathcal{D}$$

avec $q(\varepsilon) \to 0$ *lorsque* $\varepsilon \to 0$. *Alors, il existe un* $\tilde{C} > 0$ *tel que, pour* $\varepsilon > 0$ *et assez petit, on a*

$$||A_\varepsilon^{-1} - Q_\varepsilon^{-1}|| \leq \tilde{C} q(\varepsilon).$$

Bibliographie

[1] Albeverio S., Cacciapuoti C., Finco D., *Coupling on the singular limit of thin quantum waveguides*, J. Math. Phys. **48**, 032103, (2007).

[2] Attal S., Joye A, Pillet C.-A.,*Open quantum systems I : the Marovian approach*, Lectures notes in mathematics, Springer 1880 (2006).

[3] Attal S., Joye A, Pillet C.-A.,*Open quantum systems II : the Markovian approach*, Lectures notes in mathematics, Springer 1881 (2006).

[4] Attal S., Joye A, Pillet C.-A.,*Open quantum systems III : Recent developments*, Lectures notes in mathematics, Springer 1882 (2006).

[5] Aschbacher W., Jakšić V., Pautrat Y., Pillet C.-A.,*Transport properties of quasi-free fermions*, J. Math. Phys. **48**, 032101 (2007).

[6] Attal S., Joye A., PilletC-A, *Open Quantum Systems III*, Lecture Notes in Math.,**vol.1882**, C.-A. eds, Springer, Berlin (2006).

[7] Avron J.E., Elgart A., Graf G.M., Sadun L., Schnee K., *Adiabatic charge pumping in open quantum systems*, Comm. Pure. App. Math. **57**, 528-561 (2004).

[8] Avron J.E., Elgart A., Graf G.M., Sadun L., *Transport and dissipation in quantum pumps*, J. Stat. Phys. **116**, 425-473 (2004).

[9] Baranger H. U., Stone, A. D., *Electrical linear-response theory in an arbitrary magnetic field : A new Fermi-surface formulation*, Phys. Rev. B **40**, 8169-8193 (1989).

[10] Bratelli O., Robinson D.W.,*Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 2*, Springer-Verlag : Berlin, Heidelberg, New York, Second Edition, (1997).

[11] Bollé D., Geszetesy F., Wilk S.F.J, *A complete treatment of low-energy scattering in one dimension, J.operator theory*, **13**, 3 -31, (1985).

[12] Büttiker M., *Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multiprobe conductors*, Phys. Rev. B **38**, 9375 (1988).

[13] Büttiker M., Prêtre A., Thomas H., *Dynamic conductance and the scattering matrix for small conductors*, Phys. Rev. Lett. **70**, 4114-4117 (1993).

[14] Caroli C., Combescot R., Nozieres P., Saint-James D., *Direct calculation of the tunneling current*, J. Phys. C : Solid State Phys. **4** (8), 916-929 (1971).

[15] Chenaud B., Duclos P., Freitas P., Krejčiřík D., *Geometrically induced discrete spectrum in curved tubes*, Differential Geom. Appl. **23**, no. 2, pp. 95-105, (2005).

[16] Cornean H., Duclos P., Nenciu G., Purice R., *Adiabatically switched-on electrical bias and the Landauer-Büttiker formula*, J. Math. Phys., **49**, 102106 (2008).

[17] Cacciapuoti C., Exner P., *Non trivial edge couling from a Dirichlet network squeezing : the case of a bent waveguide*, J.Phys. A : Math. Theor. **40**, F511-F523, (2007).

[18] Castro Neto A. H, Guinea F, Peres N.M.R, Novoselov K.S, Geim A.K, *The electronics properties of graphene*, Review Modern Physics **81**, p109-162, (2009).

[19] Cornean H.D, Gianesello C, Zagrebnov V,*A partition-free approach to transient and steady-state charge currents*, J. Phys.A : math Theor. **42** 474011 (15pp), (2010).

[20] Cini M., *Time-dependent approach to electron transport through junctions : General theory and simple applications*, Phys. Rev. B. **22**, 5887 - 5899 (1980).

[21] Cornean, H.D, Jensen, A., Moldoveanu, V., *A rigorous proof of the Landauer-Büttiker formula*, J. Math. Phys. **46** (4), 042106, (2005).

[22] Cornean H.D., Jensen, A., Moldoveanu, V. : *The Landauer-Büttiker formula and resonant quantum transport*, Mathematical physics of quantum mechanics, 45-53, Lecture Notes in Phys. **690**, Springer, Berlin, (2006).

[23] Cornean H., Neidhardt H., Zagrebnov, V. : *Time-dependent coupling does not change the steady state*, Annales Henri Poincaré **10** (1), 61-93 (2009).

[24] Doyan B., Andrei N., *Universal aspects of nonequilibrium currents in a quantum dot*, Phys. Rev. B. **73**, 245326-30 (2006).

[25] Duclos P., Exner P., *Curvature-induced bound states in quantum waveguides in two and three dimensions*, Reviews in Mathematical Physics, 7 :73, 102, (1995).

[26] Exner P., Seba P., *Bound states in a curved wave guide*, J.Math. Phys., **Vol 30**, pp 2574-2580, (1989).

[27] Eigler D.M., Schweiser E.K., *Positioning Single Atoms With a Scanning Tunneling Microscope*, Nature 344, 524 (1990).

[28] Exner P., Turek O., *Approximations of singular vertex coupling in quantum graphs*, Ann. Phys **325**, pages 548-578, (2010).

[29] Fisher D.S., Lee P.A., *Relation between conductivity and transmission matrix*, Phys. Rev. B **23**, 6851-6854 (1981).

[30] Friedlander L., Solomyak M., *On the spectrum of the Dirichlet Laplacian in a narrow strip*, Israeli Math. J.170, no 1,337-354, (2009).

[31] Gianesello C, *Schrödinger operator in the limit of shrinking wave-guide cross section and singularity scaled twisting*, arXiv :1110.6627v1 (2011).

[32] The rise of graphene, Geim A.K., Novoselov K.S., Nature Material, **6**, 183-191, (mars 2007).

[33] C.Y.H. Tsao and W.A. Gambling Curvilinear optical fiber waveguide : characterization of bound modes and radiative field, Proc. R. Soc. Lond. A 425, p1-161, (1989).

[34] A.Jensen, G.Nenciu, A unified approach to resolvent expansions at threshlods, (2000).

[35] Jakšić V., Ogata Y., Pillet, C.-A., *The Green-Kubo formula for locally interacting fermionic open systems*, Ann. Henri Poincaré **8** (6), 1013–1036 (2007).

[36] Jakšić V., Pillet C.-A., *Mathematical theory of non-equilibrium quantum statistical mechanics*, J. Statist. Phys. **108**, no. 5-6, 787–829 (2002).

[37] Kato T., *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, (1966).

[38] Kohler, S., Lehmann, J., Hanggi, P, *Driven quantum transport on the nanoscale*, Phys. Rep. **406**, 379-443 (2005)

[39] Krejčiřík D., Twisting versus bending in quantum waveguides, Analysis on Graphs and its Applications, Proceedings of Symposia in Pure Mathematics, American Mathematical Society,

[40] Krejčiřík D., Zuazua E., *The Hardy inequality and the heat equation in twisted tubes*, J.Math.Pure Appl. **94** (2010) 277-303.

[41] Krejčiřík D., Zuazua E., The asymptotic behabiour of the heat equation in a Dirichlet-Neumann waveguide, J. Differential Equations 250, 2334-2346, (2011).

[42] D. Krejčiřík, *The Hardy inequality and the asymptotic behaviour of the heat equation in twisted waveguides*, talk at the conference in honor of Pierre Duclos, Quantum Dynamics, Marseille, November 2010.

[43] Kurth S., Stefanucci G., Almbladh C.-O., Rubio A., Gross E. K. U., *Time-dependent quantum transport : A practical scheme using density functional theory*, Phys. Rev. B **72**, 035308 (2005).

[44] Kuchment P., *Graphs models for waves in thin structures, published in Waves in Random media*, 12, no. 4,R1-R24, (2002).

[45] Landau L.D, *Zur Theorie der phasenumwandlungen II*, Phys.Z.Sowjetunion, 11, 26-35, (1937).

[46] Landauer R., *Spatial Variation of Currents and Fields due to Localized Scatterers in Metallic Conduction*, IBM J. Res. Dev. **1**, 233 (1957).

[47] Landauer R., *Electrical Resistance of Disordered One-Dimensional Lattices*, Philos. Mag. **21**, 863 (1970).

[48] Langreth D. C., Abrahams E., *Derivation of the Landauer conductance formula*, Phys. Rev. B **24**, 2978-2984 (1981).

[49] Lieb E.H., Robinson D.W. : *The finite group velocity of quantum spin systems*, Comm. Math. Phys. **28**, 251–257 (1972).

[50] Molchanov, S Vainberg, Transition from a network of thin fibers to the quantum graph : an explicit solvable model, (2006).

[51] Moldoveanu V., Gudmundsson V., Manolescu A., "*Nonadiabatic transport in a quantum dot turnstile*, Phys. Rev. B. **76** (16), 165308 (2007).

[52] Moldoveanu, V., Gudmundsson, V., Manolescu, A. : *Theoretical investigation of modulated currents in open nanostructures*, Phys. Rev. B. **80** (20), 205325 (2009).

[53] Moldoveanu, V., Gudmundsson, V., Manolescu, A. : *Time-dependent transport via the generalized master equation through a finite quantum wire with an embedded subsystem*, New Journal of Physics **11**, 113007 (2009).

[54] Nenciu G., *Independent electrons model for open quantum systems : Landauer-Bucttiker formula and strict positivity of the entropy production*, J. Math. Phys. **48**, 033302 (2007).

[55] de Oliviera, Vierri A., *On norm resolvent and quadratic form convergences in asymptotic thin spatial waveguides*, Proceedings of Spectral Days 2010, Santiago, Chile, in the book series "Operator Theory : Advances and Application," Birkhäuser, Basel.

[56] Peierls R., *Quelques propriétés typiques des corps solides*, Ann.I.H.Poincaré **vol 5**, 177-222 (1935).

[57] Ruelle D., *Smooth dynamics and new theoretical ideas in non equilibrium statistical mechanics*,J. Stat. Phys. **95**, 393-468 (1999).

[58] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics I : Functional Analysis*, Academic, New York, (1981).

[59] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics II : Fourier Analysis, Self Adjointness*,Academic, New York, (1978).

[60] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics III : Scattering Theory*, Academic, New York, (1978).

[61] Reed M., Simon B., *Methods of Modern Mathematical Physics IV : functional analysis*, Academic, New York, (1978).

[62] Ruelle D., *Natural Nonequilibrium States in Quantum Statistical Mechanics*, J. Stat. Phys. **98** (1-2), 57-75 (2000).

[63] Šedováková H., *Quantum Waveguides under Mild Regularity Assumptions*, Diploma Thesis, Czech Technical University - Prague, FJFI (2011).

[64] Stefanucci G., *Bound states in ab initio approaches to quantum transport, A time-dependent formulation*, Phys. Rev. B. **75**, 195115 (2007).

[65] Stefanucci G., Almbladh C.-O. : *Time-dependent partition-free approach in resonant tunneling systems*, Phys. Rev. B. **69**, 195318 (2004).

[66] Myohanen P., Stan A., Stefanucci G., van Leeuwen R., *Kadanoff-Baym approach to quantum transport through interacting nanoscale systems : From the transient to the steady-state regime*, Phys. Rev. B. **80**, 115107 (2009).

[67] Taylor J.R, Wiley J. and Sons, *Scattering Theory, The Quantum Theory On Nonrelativistic Collisions*, Inc, (1972).

[68] Yafaev D. R., *Mathematical scattering theory. General theory*, Translations of Mathematical Monographs **105**, American Mathematical Society, Providence, RI, (1992).

Céline Gianesello

Centre de Physique Théorique, Université du Sud Toulon-Var

Formules de courant dans les systèmes mésoscopiques

Le sujet principal de la thèse est le transport dans les systèmes mésoscopiques. Dans une première partie de la thèse, on étudie le cas d'un branchement adiabatique d'un biais de potentiel sur un système unidiensionnel sans répartition initiale. On démontre que le courant complet est uniformément borné par rapport à la vitesse de branchement adiabatique, lorsque celle-ci tend vers zéro. On démontre l'existence de la partie linéaire de l'état et du courant. La seconde partie de la thèse a donné lieu à a publication d'un article et elle consiste en l'étude d'un modèle discret, sans répartition initiale. On démontre que, dans ce système et après une perturbation électrochimique, il existe un état stationnaire hors équilibre, et on retrouve la formule de Landauer-Büttiker pour ce modèle. La dernière partie de la thèse, qui a également donné lieu à un article, porte sur l'étude de l'approximation des guides d'onde quantiques par des graphes quantiques. On s'intéresse à un guide d'onde localement torsadé. On étudie moins le Laplacien sur ce guide d'onde torsadé. Lorsque e diamètre du guide tend vers zéro et, simultanément, lorqsue le support de la courbure tend vers zéro, on démontre que le graphe limite est la ligne droite, et que l'opérateur limite est moins le Laplacien sur L^2 (R) plus une condition de Dirichlet à l'origine. Cette condition de Dirichlet est la conséquence des rétrécissements faits. En Annexe, on donne des démonstrations et explications plus détaillées et utiles pour la compréhension de points clés de la thèse.

Mot clés : guide d'onde, torsion, courant, répartition initiale, Landauer-Büttiker, diffusion.

Current formulas in mesoscopics systems

The main topic of the thesis is the transport in mesoscopic systems. In the first part of the work, we study the case of a connection through an adiabatic potential on a one dimensional system without initial distribution, we said a "partition-free approach". It is shown that the full current is uniformly bounded with respect to the adiabatic speed of connection, when it goes to zero. We prove the existence of the linear part of the state and current. The second part of the thesis has led to publication of an article and deals with the study of a discrete model without initial distribution. We prove that in this system and after an electrochemical disturbance there exists a nonequilibrium steady state, and the Landauer-Büttiker formula is demonstrated for this model. The last part of the thesis, which also has led to an article, concerns the study of the approximation of quantum waveguides by quantum graphs. We are interested in a waveguide locally twisted. We studyminus the Laplacian on this locally twisted waveguide. When the diameter of the guide goes to zero and simultaneously when the support of the twisting goes to zero, we prove that the limit graph is the straight line, and the limit operator is minus the Laplacian on the straight line plus a Dirichlet condition at the origin. The Dirichlet condition is the consequence of the shrinking done. In the appendix, we give usefull detailed explanations,and demonstrations for understanding the key points of the thesis.

Keywords : wave guide, twisting, current, partition-free, Landauer-Büttiker, scattering.