



HAL
open science

Propriétés spectrales de modèles de graphène périodique et désordonné

Sylvain Zalczer

► **To cite this version:**

Sylvain Zalczer. Propriétés spectrales de modèles de graphène périodique et désordonné. Mathématiques générales [math.GM]. Université de Toulon, 2020. Français. NNT : 2020TOUL0003. tel-03125655v2

HAL Id: tel-03125655

<https://theses.hal.science/tel-03125655v2>

Submitted on 3 May 2021

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.

ÉCOLE DOCTORALE 548 – Mer et Sciences
Centre de physique théorique

THÈSE présentée par:

Sylvain ZALCZER

soutenue le : **18 juin 2020**

pour obtenir le grade de Docteur en mathématiques

Propriétés spectrales de modèles de graphène périodique et désordonné

THÈSE dirigée par :

M. Jean-Marie BARBAROUX

Professeur des universités, université de Toulon

JURY :

M. Peter HISLOP

Professeur, université du Kentucky

Rapporteur

M. Alain JOYE

Professeur des universités, université Grenoble Alpes

Rapporteur

M. Jean-Marie BARBAROUX

Professeur des universités, université de Toulon

Directeur de thèse

M. Horia D. CORNEAN

Professeur, université d'Aalborg

M. Claude-Alain PILLET

Professeur des universités, université de Toulon

M. Loïc LE TREUST

Maître de conférences, Aix-Marseille Université

Mme Constanza ROJAS-MOLINA Maître de conférences, CY Cergy Paris Université

Table des matières

Introduction	5
I Milieux périodiques	7
I.1 Généralités	7
I.1.1 Réseaux de Bravais	7
I.1.2 Opérateurs de Schrödinger à potentiel périodique	8
I.1.3 Isolants et conducteurs	11
I.2 Modèles de graphène	12
I.2.1 Modèle de Fefferman et Weinstein	13
I.2.2 Modèle de liaisons étroites	15
I.2.3 Modèle avec l'opérateur de Dirac	16
I.3 Faire du graphène un semi-conducteur : quelques possibilités	18
I.3.1 Nanotubes et nanorubans	18
I.3.2 Graphène périodiquement perturbé	23
I.3.3 Généralisation au graphène multi-couches	26
II Milieux désordonnés	40
II.1 Localisation d'Anderson	40
II.1.1 Opérateurs aléatoires	40
II.1.2 Le phénomène de localisation	43
II.2 Preuve de la localisation : l'analyse multi-échelles	43
II.2.1 Fonctions propres généralisées	44
II.2.2 Opérateurs en volume fini	45
II.2.3 L'analyse multi-échelles	47
II.3 Résultats pour l'opérateur de Dirac	50
II.3.1 Modèle et énoncé des résultats	50
II.3.2 Preuve de la localisation	55
II.3.3 Résultat sur la densité d'états	65
Perspectives de recherche future	71
A Transformation de Bloch pour les opérateurs pseudo-différentiels	72
B Analyse multi-échelles	74
C Emplacement du spectre de l'opérateur de Dirac aléatoire	76
D Inégalités de Combes-Thomas	79

Remerciements

Mes premiers remerciements iront tout naturellement à Jean-Marie Barbaroux qui m'a fait l'honneur de diriger cette thèse. Depuis trois ans, il a été d'une disponibilité totale malgré ses importantes fonctions administratives. En plus de me faire bénéficier de ses grandes qualités de mathématicien, il a toujours été attentif à ce que je puisse travailler avec d'autres chercheurs et que j'aie l'occasion de participer à des conférences. Qu'il soit donc ici très chaleureusement remercié.

Je remercie mes deux rapporteurs pour leur travail minutieux, Peter Hislop, avec qui j'ai pu avoir à diverses occasions des discussions toujours intéressantes, et Alain Joye que j'ai eu également l'occasion d'entendre présenter ses travaux à quelques reprises.

Je remercie également les autres membres de mon jury : Claude-Alain Pillet que j'ai eu le bonheur de côtoyer au CPT, Horia Cornean avec qui j'ai déjà eu une collaboration fructueuse, Loïc Le Treust avec qui j'ai pu avoir de loin en loin des conversations toujours intéressantes et Constanza Rojas-Molina qui m'a entre autres fait l'honneur de m'inviter à présenter mon premier séminaire.

J'adresse mes remerciements aux responsables du CPT, Thierry Martin à Luminy et Philippe Briet à Toulon, ainsi qu'au personnel administratif et technique : Catherine Levet, Lorenzo Bosi, Christelle Boyer, Christelle Chedaille, Stéphanie Suciú et Laura Trano au CPT et Patricia Casanova à l'école doctorale.

Je tiens aussi à remercier ceux de mes collaborateurs avec qui nous n'avons pas encore réussi à obtenir de résultat suffisamment abouti pour qu'il figure dans cette thèse, notamment Ioannis Anapolitanos et Hakim Boumaza.

Merci également à mes proches, à mon colocataire Clément pour sa présence, surtout en période de confinement, et pour toutes les conversations mathématiques (mais pas que) que nous avons pu avoir (et pour son enthousiasme à faire la vaisselle!), et à ma famille, Papa qui a su me donner le goût des sciences depuis mon enfance, Maman pour son sens des réalités, Éloi pour son soutien et sa bienveillance et Mamé pour sa persévérance à essayer de comprendre mon travail.

Avertissement

Les notations utilisées dans cette thèse sont les notations standards en français. On notera $\sigma(H)$ le spectre d'un opérateur H , $\rho(H)$ son ensemble résolvant. Une mesure de probabilité sera en général notée \mathbb{P} et \mathbb{E} désignera l'espérance associée. De plus, nous rappelons pour le lecteur non francophone que

- l'intervalle ouvert compris entre 2 réels a et b est noté $]a, b[$.
- on dit qu'un réel x est positif si $x \geq 0$. Si $x > 0$, on dit que x est strictement positif.

Introduction

Cette thèse traite de différents aspects de la théorie spectrale d'opérateurs utilisés pour modéliser le graphène. Le graphène est un matériau bidimensionnel fait d'atomes de carbone formant un réseau hexagonal. Bien qu'il ait été depuis les années 1940 l'objet d'études théoriques, il n'a été produit expérimentalement qu'en 2004. Sa découverte a représenté une avancée majeure pour la physique des solides car il s'agit du premier matériau bidimensionnel connu. Elle a ouvert la voie à un programme de recherche ambitieux susceptible de conduire à un grand nombre d'applications, principalement dans les domaines de l'électronique et de la photonique mais aussi éventuellement pour le stockage d'énergie ou dans le domaine biomédical [51].

L'émergence du graphène a conduit à de nouvelles questions en mathématiques. Certains ont étudié un modèle d'opérateur de Schrödinger classique en faisant intervenir la périodicité hexagonale [18, 20, 19]. Mais l'apparition de ce nouveau matériau a surtout conduit à relancer l'étude de l'équation de Dirac, en particulier en dimension 2. Celle-ci décrit à l'origine le comportement d'un électron relativiste [62]. Néanmoins, il est apparu qu'elle pouvait – à un changement d'échelle près – être utilisée pour modéliser le graphène. Plusieurs articles ont ainsi été publiés récemment, traitant par exemple des conditions au bord à utiliser pour définir l'opérateur sur un domaine n'étant pas l'espace entier [45, 60, 9] ou de modèles comportant un potentiel périodique [6, 5].

Ma thèse s'inscrit dans ce mouvement. Elle est constituée de deux grandes parties.

La première traite du cas périodique, c'est-à-dire sans désordre. Je commence par présenter brièvement la théorie générale des systèmes périodiques. J'introduis ensuite les différents modèles de graphène en les comparant. Enfin, je m'intéresse à différentes façons de rendre le graphène semi-conducteur. Je fais en particulier une étude de nanorubans de divers types et présente un résultat d'ouverture d'une lacune spectrale pour un opérateur pseudo-différentiel.

La deuxième partie traite du cas désordonné. Elle s'inscrit dans la filiation de la théorie des opérateurs de Schrödinger aléatoires qui est apparue à la suite des travaux de physique théorique d'Anderson [3] en 1958. Les premiers travaux de mathématiques sur le sujet datent des années 1970 : ils sont l'œuvre de Pastur [52, 53], Goldsheid, Molchanov et Pastur [31], Kunz et Souillard [43]. Je commencerai ma seconde partie par présenter la théorie générale des opérateurs aléatoires. Une des deux grandes méthodes pour montrer la localisation d'Anderson, qui est le phénomène le plus remarquable de la théorie des systèmes désordonnés, est appelée analyse multi-échelles. Elle a été développée initialement par Fröhlich et Spencer [23] puis a fait l'objet de nombreux raffinements donnant des résultats de plus en plus forts [14, 26, 27]. J'expliquerai succinctement les principales idées de cette méthode. Si de nombreux résultats ont pu être montrés grâce à elle, elle n'avait pas encore été appliquée à l'opérateur de Dirac. Je donnerai ici la preuve de la localisation pour un modèle de graphène ainsi qu'un résultat sur la densité d'états intégrée.

Je suppose connus les principaux éléments de théorie spectrale, notamment les notions

d'opérateur non borné, de spectre (y compris la décomposition en composantes purement ponctuelle, singulière continue et absolument continue), d'idéaux de trace, de convergence en résolvante. Le lecteur à qui ces concepts sont peu familiers pourra se reporter à l'ouvrage de référence de Reed et Simon [57].

Une connaissance au moins sommaire de la mécanique quantique pourra être profitable pour la compréhension des phénomènes physiques entrant en jeu. On trouvera des présentations très succinctes dans les introductions de [36] et de [62]. On pourra trouver un exposé plus complet dans l'ouvrage de Gustafson et Sigal [32].

Chapitre I

Milieux périodiques

I.1 Généralités

I.1.1 Réseaux de Bravais

Un cristal parfait est formé par la répétition périodique d'un motif élémentaire d'atomes ou de groupes d'atomes. Mathématiquement, cela est représenté à l'aide d'un réseau.

Définition I.1. Étant donné une famille libre $(\mathbf{a}_i)_{1 \leq i \leq m}$ de m vecteurs de \mathbb{R}^d ($m \leq d$), on appelle *réseau* un sous-groupe discret de \mathbb{R}^d .

Étant donné un réseau Γ , il existe une famille (\mathbf{a}_i) appelée *base* telle que

$$\Gamma = \{b_1 \mathbf{a}_1 + \dots + b_m \mathbf{a}_m, (b_1, \dots, b_m) \in \mathbb{Z}^m\} \subset \mathbb{R}^d.$$

La *cellule de base* (ou cellule de Wigner-Seitz) d'un réseau de dimension d est l'ensemble

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \mid \forall \gamma \in \Gamma, |\mathbf{x}| \leq |\mathbf{x} - \gamma|\}.$$

On notera que la base n'est pas définie de façon unique.

Un cristal peut alors être modélisé à partir d'un réseau par l'ensemble des translatés par le réseau d'un sous-ensemble fini de l'espace affine \mathbb{R}^d . L'intersection du cristal avec la cellule de base du réseau est appelée motif élémentaire.

Les réseaux peuvent être classifiés selon leur groupe de symétrie en familles appelées *réseaux de Bravais*. Ainsi, en dimension 2, on trouve les réseaux suivants :

- le réseau triangulaire où les vecteurs de base ont même norme et forment un angle de $\frac{2\pi}{3}$;
- le réseau carré où les vecteurs de base ont même norme et forment un angle de $\frac{\pi}{2}$;
- le réseau orthorhombique primitif où les vecteurs de base ont des normes différentes et forment un angle de $\frac{\pi}{2}$;
- le réseau orthorhombique centré où les vecteurs de base ont même norme et forment un angle différent de $\frac{\pi}{2}$;
- le réseau monoclinique correspondant aux autres cas.

Une classification semblable existe en dimension 3.

La périodicité invite à utiliser l'analyse de Fourier. Pour cela, nous avons besoin d'introduire le *réseau réciproque*. Si on essaie d'écrire formellement la transformée de Fourier d'une fonction définie sur un réseau Γ :

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \sum_{\gamma \in \Gamma} f(\gamma) e^{i\gamma \cdot \mathbf{k}},$$

on constate que $\hat{f}(\mathbf{k}) = \hat{f}(\mathbf{k}')$ pour tout f si et seulement si $(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\gamma} \in 2\pi\mathbb{Z}$ pour tout $\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma$. Les vecteurs \mathbf{b} vérifiant $\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\gamma} \in 2\pi\mathbb{Z}$ pour tout $\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma$ sont appelés vecteurs du réseau réciproque, il est facile de voir qu'ils forment un réseau dont la base est constituée des vecteurs (\mathbf{b}_i) vérifiant $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, où (\mathbf{a}_j) désigne la base du réseau Γ .

Définition I.2. Étant donné un réseau Γ et son réseau réciproque Γ^* , on appelle zone de Brillouin la cellule de base du réseau réciproque, c'est-à-dire l'ensemble

$$B = \{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^d \mid \forall \boldsymbol{\gamma} \in \Gamma^*, |\mathbf{k}| \leq |\mathbf{k} - \boldsymbol{\gamma}|\}.$$

La zone de Brillouin est l'espace standard pour la variable de Fourier.

Théorème I.3. Soit f une fonction sur un réseau Γ décroissant plus vite que tout inverse de polynôme. On définit sa transformée de Fourier comme

$$\mathcal{F}f(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{|B|}} \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}} f(\boldsymbol{\gamma}) \quad (\text{I.1.1})$$

pour \mathbf{k} appartenant à la zone de Brillouin B .

Alors \mathcal{F} s'étend en une transformation unitaire de $\ell^2(\Gamma)$ dans $L^2(B)$ et, pour $g \in L^2(B)$,

$$\mathcal{F}^*g(\boldsymbol{\gamma}) = \frac{1}{\sqrt{|B|}} \int_B e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}} g(\mathbf{k}) d\mathbf{k}.$$

I.1.2 Opérateurs de Schrödinger à potentiel périodique

La modélisation de la dynamique électronique dans un solide cristallin est a priori compliquée. En effet, celui-ci est composé d'un nombre très élevé (en pratique infini) d'électrons et de noyaux. Pour obtenir un modèle exploitable, plusieurs approximations sont faites. Premièrement, on suppose que les noyaux sont fixes et forment un réseau de Bravais (infini). Il n'y a pas de résultat mathématique qui justifie cette hypothèse, elle correspond seulement à ce qui est observé expérimentalement. D'autre part, on ignore les interactions entre les électrons, si bien qu'on peut décrire le mouvement d'un électron dans le solide par un hamiltonien de la forme :

$$H = -\Delta + V \text{ sur } L^2(\mathbb{R}^d) \quad (\text{I.1.2})$$

où V est un potentiel ayant la périodicité du réseau correspondant.

Les propriétés de tels opérateurs sont présentées dans [56, section XIII.16], nous allons les rappeler ici.

La propriété cruciale est la présence d'un groupe de symétrie très important : si, pour $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_d) \in \mathbb{Z}^d$, on définit l'opérateur $U(\mathbf{t})$ de translation selon le réseau de base $(\mathbf{a}_i)_{i=1\dots d}$ par

$$(U(\mathbf{t})\psi)(\mathbf{x}) = \psi\left(\mathbf{x} + \sum_{i=1}^d t_i \mathbf{a}_i\right),$$

alors on a pour tout \mathbf{t}

$$U(\mathbf{t})H = HU(\mathbf{t}). \quad (\text{I.1.3})$$

Le principal outil pour l'étude de ces opérateurs est la décomposition en intégrale directe, qui généralise la décomposition en somme directe d'espaces vectoriels.

Définition I.4. Soit $\mathcal{H} = L^2(M, d\mu; \mathcal{H}')$ où (M, μ) est un espace mesuré σ -fini et \mathcal{H}' un espace de Hilbert. On notera $\mathcal{L}(\mathcal{H}')$ l'espace des opérateurs bornés de \mathcal{H}' et

$$\mathcal{H} = \int_M^\oplus \mathcal{H}' d\mu.$$

Un opérateur borné A sur \mathcal{H} est *décomposé par une intégrale directe* s'il existe une fonction $A(\cdot)$ de $L^\infty(M, d\mu; \mathcal{L}(\mathcal{H}'))$ telle que, pour tout $\psi \in \mathcal{H}$,

$$(A\psi)(m) = A(m)\psi(m). \quad (\text{I.1.4})$$

Un tel A est dit *décomposable*, on écrit alors

$$A = \int_M^\oplus A(m) d\mu(m).$$

Les opérateurs $A(m)$ sont appelés les *fibres* de A .

Cette propriété s'étend de façon standard aux opérateurs auto-adjoints non bornés.

Définition I.5. Une fonction $A(\cdot)$ d'un espace mesuré (M, μ) dans l'ensemble des opérateurs auto-adjoints d'un espace de Hilbert \mathcal{H}' est dite *mesurable* si la fonction $(A(\cdot) + i)^{-1}$ l'est. À partir d'une telle fonction, on peut définir un opérateur (non borné) A sur $\mathcal{H} = \int_M^\oplus \mathcal{H}' d\mu$ de domaine

$$\text{Dom}(A) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi(m) \in \text{Dom}(A(m)) \mu\text{-presque partout, } \int_M \|A(m)\psi(m)\|_{\mathcal{H}'}^2 d\mu(m) < \infty\}$$

par

$$(A\psi)(m) = A(m)\psi(m)$$

pour tout $m \in M$ et $\psi \in \text{Dom}(A)$.

On écrit alors $A = \int_M^\oplus A(m) d\mu(m)$.

On a alors les propriétés suivantes.

Théorème I.6 ([56], théorème XIII.85). *Soit $A = \int_M^\oplus A(m) d\mu$ où (M, μ) est un espace mesuré et $A(\cdot)$ une famille mesurable d'opérateurs auto-adjoints. On a alors :*

(i) *L'opérateur A est auto-adjoint.*

(ii) *Un opérateur auto-adjoint A s'écrit $\int_M^\oplus A(m) d\mu$ si et seulement si $(A + i)^{-1}$ est un opérateur borné décomposable.*

(iii) *Pour toute fonction F borélienne bornée sur \mathbb{R} ,*

$$F(A) = \int_M^\oplus F(A(m)) d\mu. \quad (\text{I.1.5})$$

(iv) *$\lambda \in \sigma(A)$ si et seulement si pour tout $\epsilon > 0$*

$$\mu(\{m \mid \sigma(A(m)) \cap]\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon[\neq \emptyset\}) > 0.$$

(v) *λ est une valeur propre de A si et seulement si*

$$\mu(\{m \mid \lambda \text{ est une valeur propre de } A(m)\}) > 0.$$

(vi) *Si chacun des opérateurs $A(m)$ a un spectre purement absolument continu, alors le spectre de A l'est aussi.*

Si le spectre de l'opérateur somme est absolument continu lorsque celui de ses fibres l'est, la réciproque est fautive. Il est même possible que l'opérateur ait un spectre purement absolument continu alors que ses fibres ont toutes un spectre purement discret. Nous verrons d'ailleurs plus loin que ce cas est en fait le cas standard dans l'étude des solides cristallins.

Théorème I.7 ([56], théorème XIII.86). *Soit μ la mesure de Lebesgue sur $[0, 1]$ et \mathcal{H}' un espace de Hilbert séparable de dimension infinie. Soit $A = \int_{[0,1]}^{\oplus} A(m) d\mu(m)$ où chaque $A(m)$ est auto-adjoint. Supposons qu'il existe une suite $(\psi_n(\cdot))_{n \in \mathbb{N}}$ de fonctions continues de $[0, 1]$ dans \mathcal{H}' , analytiques sur $]0, 1[$ et une suite $(E_n(\cdot))_{n \in \mathbb{N}}$ de fonctions de $[0, 1]$ dans \mathbb{C} , analytiques sur un voisinage de $[0, 1]$ telles que :*

- (i) *Aucune des $E_n(\cdot)$ n'est constante.*
 - (ii) *$A(m)\psi_n(m) = E_n(m)\psi_n(m)$ pour tout $m \in [0, 1]$ et tout $n \in \mathbb{N}$.*
 - (iii) *Pour tout m dans $[0, 1]$, la famille $(\psi_n(m))_{n \in \mathbb{N}}$ est une base hilbertienne de \mathcal{H}' .*
- Alors le spectre de A est purement absolument continu.*

Afin de ramener le problème sur \mathbb{R}^d avec un potentiel périodique à un problème sur un ouvert borné, où les opérateurs différentiels ont un spectre discret, nous allons définir la transformation de Bloch-Floquet qui généralise celle de Fourier en tenant compte de la périodicité du réseau. On pourra trouver plus d'informations ainsi que les preuves des résultats ci-dessous dans [49].

Dans la suite, Γ sera un réseau, Q une cellule de base pour ce réseau et B la zone de Brillouin associée.

Définition I.8. Étant donné une fonction ψ de l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$, on définit sa transformée de Bloch-Floquet, $\mathcal{U}\psi \in L^2(Q \times B, \mathbb{C})$ par

$$(\mathcal{U}\psi)(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \sum_{\gamma \in \Gamma} e^{2i\pi\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \gamma)} \psi(\mathbf{x} + \gamma). \quad (\text{I.1.6})$$

On peut alors prolonger \mathcal{U} en un opérateur unitaire de $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ dans $L^2(Q \times B, \mathbb{C})$.

Proposition I.9. *L'inverse de la transformation de Bloch-Floquet est donné par*

$$(\mathcal{U}^* f)(\mathbf{x} + \gamma) = \int_B e^{-2i\pi\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \gamma)} f(\mathbf{x}, \mathbf{k}) d\mathbf{k}. \quad (\text{I.1.7})$$

Les principales propriétés de la transformation de Bloch-Floquet sont les suivantes.

Proposition I.10. 1. *Soit $c \in L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$ une fonction Γ -périodique. Alors, pour tout $f \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$,*

$$\mathcal{U}(cf)(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = c(\mathbf{x})(\mathcal{U}f)(\mathbf{x}, \mathbf{k}).$$

2. *Soit $f \in H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$. La fonction $\mathcal{U}f$ est dérivable par rapport à la première variable \mathbf{x} et pour tout $1 \leq j \leq d$, on a*

$$\mathcal{U} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \right) (\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \left(\frac{\partial_{per}}{\partial x_j} - 2i\pi k_j \right) \mathcal{U}f(\mathbf{x}, \mathbf{k})$$

où $\frac{\partial_{per}}{\partial x_j}$ est la dérivée partielle par rapport à la coordonnée j en \mathbf{x} avec conditions au bord périodiques.

Corollaire I.11. *L'opérateur $H = -\Delta + V$ avec V Γ -périodique sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ est unitairement équivalent à l'opérateur*

$$\mathcal{U}^* H \mathcal{U} = (-i\nabla_{per} - 2i\pi\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{x})$$

sur $L^2(Q \times B)$, où on a noté $\nabla_{per} = \left(\frac{\partial_{per}}{\partial x_j}\right)_{j=1\dots d}$.

Cette décomposition nous permet d'accéder aux propriétés spectrales du hamiltonien. On utilisera ici la notion de famille analytique de type (A) présentée dans [34, chapitre VII, §2].

Proposition I.12. *Soit V un potentiel périodique selon un réseau Γ dont les coefficients de Fourier sont dans ℓ^β où $\beta < (d-1)/(d-2)$ si $d \geq 3$ et $\beta = 2$ si $d = 2$ ou 3 . Pour $\mathbf{k}_0 \in \mathbb{R}^d$ et \mathbf{a} le premier vecteur de base de Γ , la famille d'opérateurs $(H(\mathbf{k}_0 + t\mathbf{a}))_{t \in \mathbb{R}}$ où*

$$H(\mathbf{k}) = (-i\nabla_{per} - 2i\pi\mathbf{k})^2 + V(\cdot) \text{ sur } L^2(Q, \mathbb{C})$$

est une famille analytique de type (A). De plus, $H(\mathbf{k})$ est à résolvante compacte pour tout $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^d$.

Il existe donc une suite $(E_n(\cdot))$ de fonctions analytiques et une suite de familles analytiques de fonctions de $L^2(Q, \mathbb{C})$ notée $(\psi_n(\cdot))$ telles que pour tous $t \in \mathbb{R}$ on ait

$$H(\mathbf{k}_0 + t\mathbf{a})\psi_n(t) = E_n(t)\psi_n(t).$$

De plus, pour chaque t , $(\psi_n(t))_{n \in \mathbb{N}}$ forme une base de $L^2(Q, \mathbb{C})$. Enfin, aucune des fonctions E_n n'est constante.

Corollaire I.13. *Le spectre de $-\Delta + V$, où V est un potentiel Γ -périodique dont les coefficients de Fourier sont dans ℓ^β où $\beta < (d-1)/(d-2)$ si $d \geq 3$ et $\beta = 2$ si $d = 2$ ou 3 , est purement absolument continu.*

Le spectre d'un tel hamiltonien est donc constitué d'une réunion d'intervalles appelés bandes correspondant aux images des fonctions E_n . Les intervalles réels de l'ensemble résolvant sont appelés *lacunes spectrales*.

I.1.3 Isolants et conducteurs

La théorie ci-dessus permet de décrire le comportement des électrons dans le solide. En particulier, elle permet de faire la distinction entre isolants et conducteurs. La différence entre les deux types est particulièrement remarquable : la résistivité d'un bon isolant peut être jusqu'à 10^{32} fois plus importante que celle d'un métal pur, ce qui représente une étendue particulièrement importante [39]. Si, en utilisant un modèle à un électron, nous négligeons les interactions entre électrons, il est en revanche nécessaire de prendre en compte le principe d'exclusion de Pauli. Lorsque le spectre est discret (par exemple dans le cas d'un atome isolé en dessous du spectre essentiel), celui-ci signifie que chaque état propre est occupé par au plus deux électrons, un pour chaque valeur du spin. Dans le cas d'un solide, où le spectre est absolument continu, on introduit la notion de densité d'états.

On considèrera ici un hamiltonien de la forme $H = -\Delta + V$, V étant périodique selon un réseau Γ de base $(\mathbf{a}_i)_{1 \leq i \leq d}$. On notera $H(\mathbf{k})$ la transformée de Bloch-Floquet du hamiltonien.

Définition I.14. Soit B la zone de Brillouin du réseau Γ et $E_n(\mathbf{k})$ les valeurs propres de $H(\mathbf{k})$. On définit la *densité d'états* comme la mesure ν sur \mathbb{R} définie par

$$\nu([a, b]) = \frac{2}{|B|} \sum_{n \in \mathbb{N}} |\{\mathbf{k} \in B | E_n(\mathbf{k}) \in [a, b]\}|.$$

La densité d'états permet de compter le « nombre d'électrons par unité de volume ». En effet, pour $L \in \mathbb{N}$, définissons l'opérateur H_L comme la restriction de H à l'ensemble

$$\left\{ \sum_{i=1}^d \lambda_i \mathbf{a}_i, \lambda_i \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right] \forall i \right\}$$

avec conditions au bord périodiques et E_L la famille de projecteurs spectraux associée.

Proposition I.15 ([56], théorème XIII.101). *Pour tout intervalle I , on a*

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2}{L^d} \text{tr}(E_L(I)) = \nu(I).$$

Supposons que le cristal soit constitué d'atomes possédant N électrons chacun. Il est alors raisonnable d'affirmer que les électrons remplissent les niveaux d'énergie les plus bas jusqu'à avoir en moyenne N électrons par atome, ce qui revient à dire que les niveaux sont occupés jusqu'à l'énergie E_F vérifiant $\nu(-\infty, E_F] = N$. Cette énergie est appelée *énergie de Fermi*. L'ensemble des \mathbf{k} de la zone de Brillouin vérifiant $E_n(\mathbf{k}) = E_F$ pour une valeur de n est appelé *surface de Fermi*.

Ce modèle permet de faire la différence entre les cristaux isolants et conducteurs. En effet, on a vu que le spectre d'un opérateur de Schrödinger périodique est constitué d'une réunion d'intervalles fermés, appelés bandes permises, les intervalles complémentaires étant appelés bandes interdites. Deux cas peuvent alors se présenter.

- Si l'énergie de Fermi est dans une bande permise, alors un champ électrique (c'est-à-dire une différence de potentiel) peut faire passer un électron d'énergie E_F à une énergie légèrement supérieure, ce qui permet la conduction.
- En revanche, si l'énergie de Fermi est au bas d'une bande interdite, alors il n'est pas possible de passer à une énergie immédiatement supérieure car on tomberait dans la bande interdite. Il ne peut donc pas y avoir de conduction : le cristal est isolant.

En réalité, d'autres cas sont à prendre en compte. En effet, les cristaux ne sont généralement pas au zéro absolu et leurs électrons sont donc dans un état excité même en l'absence de champ électrique. Si l'énergie de Fermi est au bas d'une bande interdite de petite taille, alors on parle de semi-conducteur. Si elle se trouve légèrement en dessous du bas d'une bande interdite, on parle de semi-métal.

I.2 Modèles de graphène

Avant de décrire les différents modèles de graphène, commençons par présenter ce matériau. Pour des informations détaillées, le lecteur pourra se référer à l'article [13] pour une synthèse détaillée des propriétés électroniques ou à [25, 51] pour des articles plus généraux. Ces articles sont les sources principales de cette introduction.

Le graphène est une forme allotropique bidimensionnelle du carbone. Il est fait d'atomes disposés sur une structure en nid d'abeille constituée d'hexagones. Plus précisément, parmi

les 4 électrons de valence de l'atome de carbone, trois sont engagés dans des liaisons covalentes avec les atomes voisins. En revanche, le quatrième est délocalisé et participe donc à la conduction.

Le graphène est en quelque sorte l'élément de base d'autres formes allotropiques. Ainsi, les fullerènes sont des feuilles de graphènes roulées en boule, les nanotubes de carbone sont des feuilles de graphène enroulées autour d'un axe et le graphite est constitué de feuilles de graphènes empilées et liées entre elles par la force de van der Waals.

Historiquement, le graphène a été découvert expérimentalement par Geim et Novoselov en 2004. Ce fut la première découverte d'un cristal bidimensionnel. L'existence de tels cristaux était auparavant considérée comme impossible à la suite de travaux de Landau et Peierls sur les fluctuations thermiques.

Cependant, les premiers travaux théoriques sur le graphène, visant en fait à expliquer les propriétés du graphite, remontent à 1947 et sont l'œuvre de Wallace [63]. Ce dernier calcule la structure de bandes d'une feuille de graphène et montre que celle-ci est semi-métallique et que la surface de dispersion a une singularité conique aux coins de la zone de Brillouin. De plus, cette singularité correspond précisément au niveau de Fermi. Cette propriété fait que la dynamique des électrons est semblable à celle de fermions sans masse, à la seule exception que la vitesse de la lumière doit être remplacée par une vitesse v_F 300 fois plus petite. La dynamique peut être décrite par l'équation de Dirac, qui provient de la mécanique quantique relativiste, bien que les électrons ne soient pas relativistes.

La structure cristalline du graphène est décrite par la répétition d'un motif formé de 2 atomes par un réseau triangulaire. Le réseau triangulaire est engendré par exemple par les vecteurs

$$\mathbf{a}_1 = l \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{a}_2 = l \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

où l est un paramètre de taille strictement positif. Les atomes du motif élémentaire sont alors les points \mathbf{A} et \mathbf{B} de coordonnées respectives $(0, 0)$ et $(\frac{l}{\sqrt{3}}, 0)$. On notera dans la suite Λ_h le réseau de base $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ et Γ_h le cristal formé par les translatés par Λ_h des deux points de base. Les points de Γ_h seront appelés *sites atomiques*. La structure de la feuille de graphène est représentée sur la figure I.1.

Le réseau réciproque est engendré par les vecteurs

$$\mathbf{b}_1 = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{b}_2 = q \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

où $q = \frac{4\pi}{l\sqrt{3}}$.

La zone de Brillouin du réseau triangulaire est un hexagone. Notons \mathbf{K} et \mathbf{K}' ses sommets définis par

$$\mathbf{K} = \frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \text{ et } \mathbf{K}' = \frac{1}{3}(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1).$$

Les six sommets de la zone de Brillouin peuvent être engendrés en appliquant une rotation R d'angle $\frac{2\pi}{3}$; ils se divisent en deux sous-ensembles correspondant aux orbites de \mathbf{K} et \mathbf{K}' sous l'action du groupe engendré par cette rotation.

I.2.1 Modèle de Fefferman et Weinstein

Le modèle le plus fondamental pour représenter le graphène consiste à considérer, selon la théorie décrite dans la section I.1.2, un opérateur de Schrödinger classique sur \mathbb{R}^2 avec

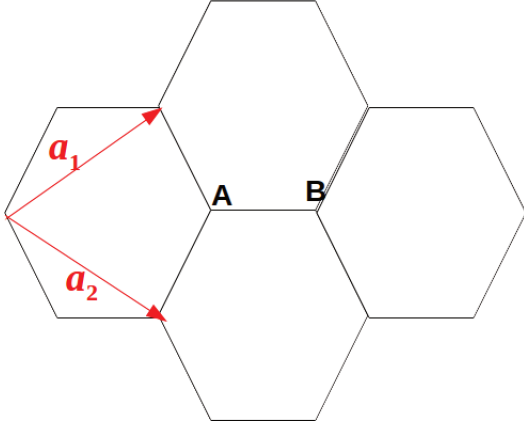


FIGURE I.1 – Structure du graphène.

un potentiel ayant la périodicité du cristal de graphène, appelé potentiel en nid d'abeille. C'est ce modèle qui est étudié par Fefferman et Weinstein dans [18]. On notera dans cette section R la rotation d'angle $\frac{2\pi}{3}$. De plus, pour toute fonction f définie sur \mathbb{R}^2 , on pose

$$\mathcal{R}[f](\mathbf{x}) = f(R^* \mathbf{x})$$

la fonction tournée de $\frac{2\pi}{3}$. On notera également Q la cellule de base du réseau triangulaire.

Définition I.16. Une fonction $V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$ est appelé *potentiel en nid d'abeille* s'il existe un point $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^2$ tel que $\tilde{V} = V(\cdot - \mathbf{x}_0)$ vérifie les propriétés suivantes :

- (i) \tilde{V} est Λ_h -périodique.
- (ii) \tilde{V} est pair, c'est-à-dire que $\tilde{V}(-\mathbf{x}) = \tilde{V}(\mathbf{x})$.
- (iii) \tilde{V} est invariant par \mathcal{R} , c'est-à-dire que $\mathcal{R}[\tilde{V}](\mathbf{x}) = \tilde{V}(\mathbf{x})$.

La répétition sur tous les sites atomiques d'une feuille de graphène d'un potentiel radial lisse et décroissant plus rapidement que tout inverse de polynôme satisfait les propriétés ci-dessus.

Le principal résultat sur la structure spectrale d'un hamiltonien de ce type est le résultat suivant, dû à Fefferman et Weinstein. Ceux-ci étudient le hamiltonien

$$H_\epsilon = -\Delta + \epsilon V \tag{I.2.1}$$

avec ϵ réel (pas forcément petit ni positif) et V un potentiel en nid d'abeille. Ils montrent que, sauf cas exceptionnel, la surface de dispersion de H_ϵ a une singularité conique.

Théorème I.17 ([18], théorème 5.1). *Soit V un potentiel en nid d'abeille. Supposons que le coefficient de Fourier V_{11} est non nul, c'est-à-dire que*

$$V_{11} = \int_Q e^{-i(b_1+b_2)\cdot \mathbf{y}} V(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \neq 0.$$

Alors il existe une partie dénombrable fermée de \mathbb{R} notée \mathcal{C} telle que pour tout sommet \mathbf{K}_ de la zone de Brillouin et tout $\epsilon \notin \mathcal{C}$ il existe deux familles de couples $(\mu_\pm^\epsilon(\mathbf{k}), \phi_\pm^\epsilon(\mathbf{k}))$ avec, pour chaque $\mathbf{k} \in B$, $\mu_\pm^\epsilon(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}$ et $\phi_\pm^\epsilon(\mathbf{k}) \in L^2(Q, \mathbb{C})$ telles que :*

(i) Les familles $(\mu_{\pm}^{\epsilon}(\mathbf{k}), \phi_{\pm}^{\epsilon}(\mathbf{k}))$ sont constituées de paires d'éléments propres de Bloch-Floquet, c'est-à-dire que

$$H_{\epsilon}(\mathbf{k})\phi_{\pm}^{\epsilon}(\mathbf{k}) = \mu_{\pm}^{\epsilon}(\mathbf{k})\phi_{\pm}^{\epsilon}(\mathbf{k}) \text{ où } H_{\epsilon}(\mathbf{k}) = -(\nabla_{per} + 2i\pi\mathbf{k})^2 + \epsilon V(\mathbf{x}) \text{ sur } L^2(Q, \mathbb{C}).$$

(ii) $\mu^{\epsilon}(\mathbf{K}_*) := \mu_{+}^{\epsilon}(\mathbf{K}_*) = \mu_{-}^{\epsilon}(\mathbf{K}_*)$ est une valeur propre de multiplicité 2 de $H_{\epsilon}(\mathbf{K}_*)$.

(iii) Il existe un voisinage \mathcal{V}_{ϵ} de \mathbf{K}_* , des fonctions lipschitziennes E_{\pm} définies sur \mathcal{V}_{ϵ} et nulles en \mathbf{K}_* et $\lambda^{\epsilon} > 0$ tels que pour tout $\mathbf{k} \in \mathcal{V}_{\epsilon}$

$$\mu_{+}^{\epsilon}(\mathbf{k}) - \mu^{\epsilon}(\mathbf{K}_*) = +\lambda^{\epsilon} |\mathbf{k} - \mathbf{K}_*|(1 + E_{+}(\mathbf{k})) \text{ et}$$

$$\mu_{-}^{\epsilon}(\mathbf{k}) - \mu^{\epsilon}(\mathbf{K}_*) = -\lambda^{\epsilon} |\mathbf{k} - \mathbf{K}_*|(1 + E_{-}(\mathbf{k})).$$

Remarque I.18. On peut montrer de plus qu'il existe $\epsilon^0 > 0$ tel que pour tout $\epsilon \in]-\epsilon^0, \epsilon^0[$, l'intersection conique correspond à celle entre les 1^{re} et 2^e bandes si $\epsilon V_{11} > 0$ et à celle entre les 2^e et 3^e bandes si $\epsilon V_{11} < 0$.

I.2.2 Modèle de liaisons étroites

Un autre modèle possible est de supposer que l'électron qui n'est pas engagé dans une liaison covalente est attaché à un atome et peut « sauter » d'un atome à un de ses voisins. Ce modèle, dit de liaisons étroites (*tight binding*), est le plus couramment utilisé par les physiciens [13, 63]. On pourra trouver une description mathématique de ce modèle dans la section 1.2 de [20].

L'électron est donc supposé vivre sur les sites atomiques du réseau, sa fonction d'onde est donc dans $\ell^2(\Gamma_h)$. Le hamiltonien est donné par le laplacien discret, c'est-à-dire la matrice d'adjacence du graphe (infini) dont les sommets sont les points de Γ_h et les arêtes relient entre eux les plus proches voisins (ce qui correspond physiquement aux liaisons covalentes).

Plus précisément, notons la fonction d'onde

$$(\psi_{\mathbf{A}}^{(n,m)}, \psi_{\mathbf{B}}^{(n,m)})_{(n,m) \in \mathbb{Z}^2} \in \ell^2(\mathbb{Z}^2, \mathbb{C}^2),$$

$\psi_{\mathbf{A}}^{(n,m)}$ (resp. $\psi_{\mathbf{B}}^{(n,m)}$) représentant la valeur de la fonction d'onde au point $\mathbf{A} + n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ (resp. $\mathbf{B} + n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$). La hamiltonien est alors défini par

$$H \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{A}}^{(n,m)} \\ \psi_{\mathbf{B}}^{(n,m)} \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{B}}^{(n,m)} + \psi_{\mathbf{B}}^{(n,m-1)} + \psi_{\mathbf{B}}^{(n-1,m)} \\ \psi_{\mathbf{A}}^{(n,m)} + \psi_{\mathbf{A}}^{(n+1,m)} + \psi_{\mathbf{A}}^{(n,m+1)} \end{pmatrix} \quad (\text{I.2.2})$$

pour un certain paramètre de couplage t .

Notons $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ et \mathbf{e}_3 les vecteurs reliant le point \mathbf{A} à chacun de ses voisins. En faisant une transformation de Fourier, on montre que ce hamiltonien est unitairement équivalent à

$$\int_B^{\oplus} t H_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} \text{ où } H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & h(\mathbf{k}) \\ \bar{h}(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \text{ avec } h(\mathbf{k}) = \sum_{j=1,2,3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_j}$$

et B est la zone de Brillouin.

Les matrices $H_{\mathbf{k}}$ ont deux valeurs propres

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |h(\mathbf{k})| = \pm |1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2}|. \quad (\text{I.2.3})$$

Le spectre de cet opérateur est donc $[-3|t|, 3|t|]$. En traçant la surface de dispersion, on observe bien les singularités coniques aux sommets de la zone de Brillouin.

La question naturelle à ce stade est de se demander si ce modèle est d'une façon ou d'une autre un cas limite du modèle précédent. La réponse positive a été apportée par Fefferman, Lee-Thorp et Weinstein dans [20]. Ils étudient un modèle de liaison forte, c'est-à-dire un hamiltonien de la forme $-\Delta + \lambda^2 V$ pour λ tendant vers l'infini. V est un potentiel en nid d'abeille (au sens de la sous-section précédente) négatif à support compact suffisamment petit. Notons $\mu_1^\lambda(\mathbf{k}) \leq \mu_2^\lambda(\mathbf{k}) \leq \dots$ les valeurs propres de Bloch-Floquet du hamiltonien. Sous de bonnes hypothèses, Fefferman, Lee-Thorp et Weinstein prouvent le résultat suivant.

Théorème I.19 ([20], théorèmes 1.1 et 6.1). *Pour $\lambda > \lambda^*$ suffisamment grand, les fonctions de dispersion $\mathbf{k} \mapsto \mu_1^\lambda(\mathbf{k})$ et $\mathbf{k} \mapsto \mu_2^\lambda(\mathbf{k})$ convergent uniformément (à un changement d'échelle près) vers les fonctions de dispersion $E_\pm(\mathbf{k})$ du modèle de liaison étroite. Plus précisément, il existe une énergie E_D^λ et $\rho_\lambda > 0$ telles que*

$$(\mu_1^\lambda(\mathbf{k}) - E_D^\lambda)/\rho_\lambda \rightarrow E_-(\mathbf{k}) \text{ et } (\mu_2^\lambda(\mathbf{k}) - E_D^\lambda)/\rho_\lambda \rightarrow E_+(\mathbf{k}) \quad (\text{I.2.4})$$

quand λ tend vers l'infini, uniformément en \mathbf{k} dans la zone de Brillouin.

De plus, il existe des constantes c_1, C'_1, c_2, C'_2 telles que pour λ assez grand $C'_1 e^{-c_1 \lambda} \leq \rho_\lambda \leq C'_2 e^{-c_2 \lambda}$.

I.2.3 Modèle avec l'opérateur de Dirac

Un troisième modèle possible pour le graphène utilise l'opérateur de Dirac. Les propriétés de cet opérateur sont décrites dans le livre de Thaller [62].

Dans sa version standard, l'opérateur de Dirac bidimensionnel est utilisé pour décrire la dynamique d'un électron relativiste. Il agit sur $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$ et s'écrit

$$H_0 = -i\hbar c \left(\sigma_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \sigma_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) + \sigma_3 m c^2$$

où les σ_i sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.2.5})$$

et \hbar, c et m sont respectivement la constante de Planck divisée par 2π , la vitesse de la lumière et la masse de la particule. Son domaine est l'espace de Sobolev $H^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$.

Pour décrire le graphène, on utilisera un opérateur semblable où la masse m est prise égale à 0 et où la vitesse de la lumière est remplacée par une vitesse environ 300 fois plus petite appelée vitesse de Fermi v_F . Afin d'éviter l'écriture de constantes, on se place dans le système d'unités où $\hbar = v_F = 1$. L'opérateur que nous considérerons dans toute la suite est donc défini par

$$\text{Dom}(D_0) = H^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2), \quad D_0 \psi = \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla \psi) = \sigma_1 \frac{-i\partial \psi}{\partial x_1} + \sigma_2 \frac{-i\partial \psi}{\partial x_2}. \quad (\text{I.2.6})$$

Cet opérateur est clairement auto-adjoint.

En faisant une transformation de Fourier, on voit que cet opérateur est unitairement équivalent à l'opérateur de multiplication par la matrice

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 & p_1 + ip_2 \\ p_1 - ip_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

On calcule alors facilement que chacune de ces matrices a deux valeurs propres égales à $\pm|\mathbf{p}|$. On a donc le résultat suivant.

Proposition I.20. *Le spectre de D_0 est égal à \mathbb{R} et est purement absolument continu.*

De plus, il est facile de voir que la surface de dispersion a une singularité conique à l'origine. Ce phénomène a conduit les physiciens à parler de « points de Dirac » pour désigner les singularités de la surface de dispersion des hamiltoniens décrivant le graphène (cf. [13]). Les physiciens utilisent parfois le modèle avec l'opérateur de Dirac dans des calculs numériques concernant le graphène et trouvent des résultats proches de ceux calculés avec le modèle de liaisons étroites sous de bonnes conditions [12, 55, 54].

Du point de vue des mathématiques, l'utilisation de l'équation de Dirac pour décrire la dynamique effective d'un électron dans un potentiel en nid d'abeille a été étudiée par Fefferman et Weinstein dans [19]. Ils montrent que la dynamique est effectivement gouvernée par l'équation de Dirac lorsque la donnée initiale est spectralement concentrée autour des sommets de la zone de Brillouin.

Ici, V sera un potentiel tel que les conclusions du théorème I.17 sont vérifiées. On fixe alors un point de Dirac \mathbf{K}_* . On sait alors que la valeur propre de Bloch-Floquet associée à ce point $\mu(\mathbf{K}_*)$ est de multiplicité 2. On note alors Φ_1 et Φ_2 les deux fonctions propres associées étendues périodiquement à \mathbb{R}^2 . On considère alors une donnée initiale de la forme

$$\psi_0^\delta(\mathbf{x}) = \delta e^{i\mathbf{K}_* \cdot \mathbf{x}} (\alpha_{10}(\delta \mathbf{x}) \Phi_1(\mathbf{x}) + \alpha_{20}(\delta \mathbf{x}) \Phi_2(\mathbf{x}))$$

où α_{10} et α_{20} sont dans l'espace de Schwartz et δ est un réel positif supposé petit. Le facteur δ est présent uniquement pour que l'état ait une norme d'ordre de grandeur constant quand δ tend vers 0.

On posera alors

$$\vec{\alpha}_0(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \alpha_{10}(\mathbf{X}) \\ \alpha_{20}(\mathbf{X}) \end{pmatrix}.$$

Le résultat de Fefferman et Weinstein est le suivant.

Théorème I.21 ([19], théorème 5.1). *Soit $\vec{\alpha}(\mathbf{X}, T)$ la solution de l'équation de Dirac*

$$i\partial_T \vec{\alpha}(\mathbf{X}, T) = \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla_{\mathbf{X}} \vec{\alpha}(\mathbf{X}, T))$$

pour λ défini dans le théorème I.17 (iii) avec $\vec{\alpha}(\mathbf{X}, 0) = \vec{\alpha}_0(\mathbf{X})$.

D'autre part, soit ψ^δ vérifiant l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t \psi^\delta = (-\Delta + V(\mathbf{x})) \psi^\delta \tag{I.2.7}$$

avec $\psi^\delta(\mathbf{x}, 0) = \psi_0^\delta(\mathbf{x})$.

Fixons $\rho > 0$, $\epsilon_1 > 0$ et $N = (n_1, n_2) \in \mathbb{N}^2$. Alors (I.2.7) admet une unique solution s'écrivant

$$\psi^\delta(\mathbf{x}, t) = e^{i(\mathbf{K}_* \cdot \mathbf{x} - \mu(\mathbf{K}_*)t)} \left(\sum_{j=1}^2 \delta \alpha_j(\delta \mathbf{x}, \delta t) \Phi_j(\mathbf{x}) + \eta^\delta(\mathbf{x}, t) \right)$$

où les α_j sont les coordonnées de $\vec{\alpha}$ et, pour tout multi-indice β , $|\beta| \leq N$

$$\sup_{0 \leq t \leq \rho \delta^{-2+\epsilon_1}} \|\partial_{\mathbf{x}}^\beta \eta^\delta(\mathbf{x}, t)\|_{L^2(\mathbb{R}_{\mathbf{x}}^2)} = o(\delta^\tau)$$

pour un certain $\tau > 0$ quand δ tend vers 0.

I.3 Faire du graphène un semi-conducteur : quelques possibilités

Les propriétés électroniques remarquables du graphène en font un candidat de choix pour remplacer le silicium dans l'électronique [51]. Néanmoins, il serait nécessaire pour cela d'avoir un dispositif semi-conducteur conçu à partir de graphène. Plusieurs solutions sont proposées [16].

La plus élémentaire, que nous détaillerons dans la première sous-section, est de prendre un nanoruban de graphène. Nous verrons que cette méthode donne des résultats dépendant fortement de la façon dont le nanoruban est découpé dans la feuille de graphène et que la lacune spectrale éventuellement ouverte a une taille inversement proportionnelle à la largeur du ruban, ce qui limite le courant susceptible de passer. Nous considérerons également le cas des nanotubes de carbone qui, s'ils ne constituent pas à proprement parler des dérivés du graphène, se traitent théoriquement d'une façon semblable.

Une autre approche, que nous décrirons dans la deuxième sous-section, consiste à modifier périodiquement une feuille de graphène, soit par des trous, soit par dopage chimique. Enfin, certains auteurs proposent d'utiliser l'interaction avec le substrat ou une déformation du réseau cristallin pour ouvrir une lacune spectrale. Ces approches ne seront pas traitées dans cette thèse.

I.3.1 Nanotubes et nanorubans

Nous utilisons pour décrire ces objets le modèle de liaisons étroites présenté dans la sous-section I.2.2. Notre principal outil sera la théorie spectrale des graphes infinis développée par exemple par Godsil et Mohar dans [30]. L'idée est de calculer le spectre du laplacien discret sur un graphe fini, où il s'agit d'une simple matrice, puis d'utiliser des résultats de convergence pour passer au graphe infini.

L'étude des graphes infinis généralise en quelque sorte celle des réseaux présentés dans la section I.1.1. Le lecteur désireux d'en savoir davantage sur le sujet pourra se référer à l'article de synthèse [48]. Un *graphe infini dénombrable* est défini par un ensemble dénombrable de sommets V et un ensemble d'arêtes reliant des sommets. La *matrice d'adjacence* du graphe est celle dont l'élément a_{uv} , pour $u, v \in V$, est égal au nombre d'arêtes reliant u et v . On appelle *degré d'un sommet* le nombre d'arêtes reliées à ce sommet. Un graphe est dit *localement fini* si les degrés de tous les sommets sont finis ; on appelle *degré du graphe* le maximum des degrés des sommets.

Définition I.22. Soit G et G_1, G_2, \dots des graphes sur un ensemble de sommets V . On dit que la suite (G_n) *converge vers* G si, pour toute paire (u, v) de sommets de G , il existe un rang $n_{(u,v)}$ tel que, pour tout $n \geq n_{(u,v)}$, uv est une arête de G_n si et seulement si uv est une arête de G .

On notera désormais $A(G)$ la matrice d'adjacence du graphe G et, étant donné deux sommets u et v , μ_{uv} la mesure spectrale pour cet opérateur attachée aux fonctions indicatrices des points u et v .

On a alors le résultat suivant.

Théorème I.23 ([30], théorème 4.2). *Si une suite (G_n) de graphes dénombrables et localement finis de degré borné converge vers un graphe G , alors les mesures spectrales $\mu_{uv}^{(n)}(\lambda)$ des graphes G_n convergent vers celle de G $\mu_{uv}(\lambda)$ partout où elle est continue.*

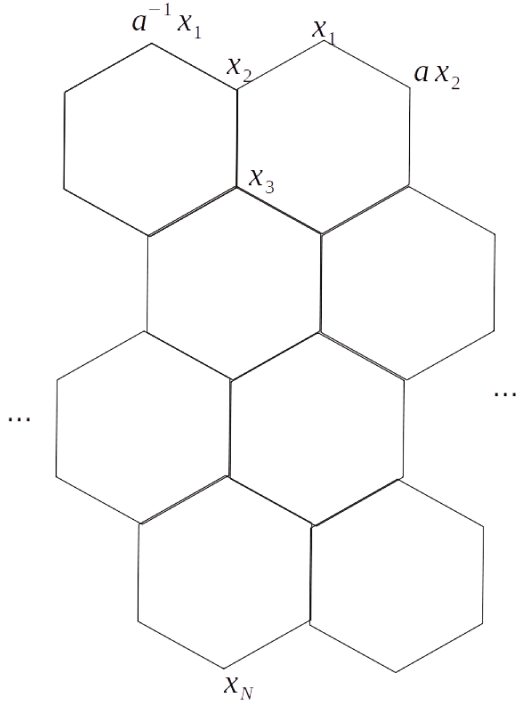


FIGURE I.2 – Nanoruban zig-zag.

Les propriétés électroniques d'un nanoruban de graphène dépendent de l'orientation de son axe par rapport aux vecteurs du réseau [59]. Nous nous intéresserons ici aux propriétés des 2 découpes les plus intéressantes par leur symétrie : le nanoruban dit de type zig-zag où l'axe du nanoruban est parallèle à un des vecteurs de base du réseau et celui de type chaise (*armchair*) où l'axe suit la bissectrice des 2 vecteurs de base.

Pour étudier le nanoruban zig-zag, on considère le graphe $Z_{N,K}$ représenté sur la figure I.2 formé d'un nano-anneau d'épaisseur N formé par la répétition de K motifs identiques (on suppose donc que l'extrémité droite rejoint l'extrémité gauche). Le cas du nanoruban correspondra donc à la limite où K tend vers l'infini.

Étant en dimension finie, on peut se permettre de faire des hypothèses sur la forme des vecteurs propres que l'on cherche. Un argument de dimension permettra ensuite d'affirmer qu'on les a tous trouvés. En l'occurrence, on cherche des vecteurs propres de la forme indiquée sur la figure I.2 : si on note v le vecteur correspondant à la translation d'un hexagone vers la droite, si le vecteur propre a une valeur x en un point P , il a une valeur ax au point $P + v$, avec $a^K = 1$. Pour chacune des K valeurs de a possibles, l'équation aux valeurs propres s'écrit

$$\begin{cases} \lambda x_j = (1+a)x_{j+1} + x_{j-1} & \text{si } j \text{ est impair} \\ \lambda x_j = x_{j+1} + (1+a^{-1})x_{j-1} & \text{si } j \text{ est pair} \end{cases}$$

pour j entier entre 1 et N , en posant $x_0 = x_{N+1} = 0$.

En cela revient à trouver les valeurs propres d'une matrice tridiagonale de taille $N \times N$ dont la diagonale est constituée de zéros, la sur-diagonale comprend alternativement $1+a$

et 1 et la sous-diagonale alternativement $1 + a^{-1}$ et 1 :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 + a & 0 & \dots \\ 1 + a^{-1} & 0 & 1 & \ddots \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

En particulier, si on prend $a = -1$, ce qui est possible si K est pair, alors 0 est valeur propre de cette matrice. En passant à la limite, on voit que 0 va appartenir au spectre du hamiltonien sur le nanoruban de type zig-zag et que celui-ci est donc semi-métallique. On constate de plus qu'il existe un vecteur propre dont le support est exclusivement au bord du nanoruban.

Le cas d'un nanoruban avec des bords de type « chaise » se traite d'une façon semblable. On commence là encore par considérer un graphe fini $A_{N,K}$ représentant un nano-anneau formé de la répétition de K motifs successifs, chacun de ces motifs étant constitué de N sommets. On voit que dans ce cas, N est toujours pair, on posera $N = 2M$. On cherche des vecteurs propres de la forme décrite sur la figure I.3, où a vérifie là encore $a^K = 1$.

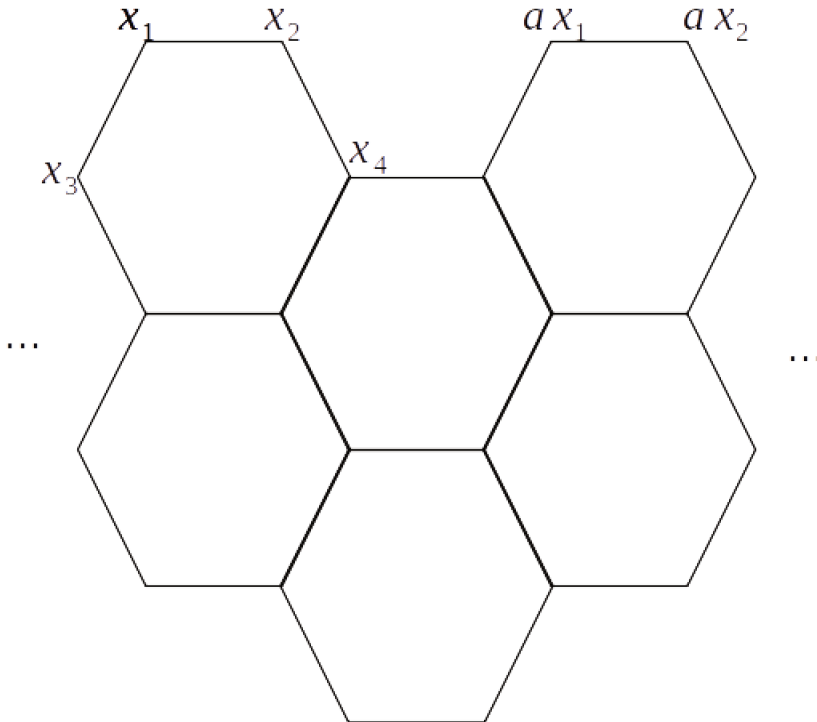


FIGURE I.3 – Nanoruban « chaise ».

La matrice obtenue est cette fois-ci une matrice pentadiagonale de taille $N \times N$:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \ddots & \\ 1 & 0 & 0 & a & 1 & \ddots \\ 0 & 1 & \bar{a} & 0 & 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Cette matrice est également celle d'un opérateur auxiliaire sur le graphe représenté sur la figure I.4.

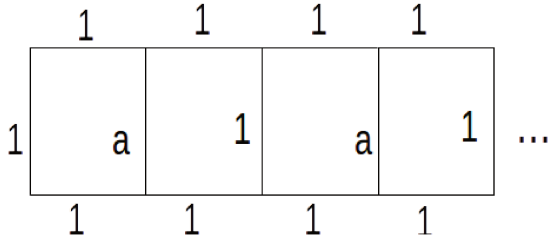


FIGURE I.4 – Graphe auxiliaire

En appelant (v_j) les valeurs du vecteur propre sur la ligne du haut et (u_j) celles sur la ligne du bas, l'équation aux valeurs propres revient à

$$\begin{cases} \lambda v_j = v_{j+1} + v_{j-1} + \alpha_j u_j \\ \lambda u_j = u_{j+1} + u_{j-1} + \bar{\alpha}_j v_j \end{cases}$$

pour tout j entier compris entre 1 et M , où $\alpha_j = 1$ si j est impair et a si j est pair. On pose $u_0 = v_0 = u_{M+1} = v_{M+1} = 0$.

Comme précédemment, la dimension finie nous permet de faire des hypothèses sur les vecteurs propres. On va chercher des solutions de la forme $v_j = f(j) \sin \frac{nj\pi}{M+1}$ et $u_j = g(j) \sin \frac{nj\pi}{M+1}$ pour n allant de 1 à M et où f et g sont des fonctions ne dépendant que de la parité de j . De tels vecteurs propres sont linéairement indépendants.

Après développement et simplification, le système devient

$$\begin{cases} \lambda f(j) = 2 \cos \frac{n\pi}{M+1} f(j+1) + \alpha_j g(j) \\ \lambda g(j) = 2 \cos \frac{n\pi}{M+1} g(j+1) + \bar{\alpha}_j f(j) \end{cases}$$

En notant $b = 2 \cos \frac{n\pi}{M+1}$, nous devons donc chercher les valeurs propres de la matrice de taille 4×4

$$\begin{pmatrix} 0 & b & 1 & 0 \\ b & 0 & 0 & a \\ 1 & 0 & 0 & b \\ 0 & \bar{a} & b & 0 \end{pmatrix}$$

En calculant et résolvant le polynôme caractéristique, on trouve que les valeurs propres vérifient

$$\lambda_{n,k,\pm}^2 = 1 + b^2 \pm \sqrt{b^2(2 + a + \bar{a})} = 1 + 4 \cos^2 \frac{n\pi}{M+1} \pm \sqrt{4 \cos^2 \frac{n\pi}{M+1} (2 + 2 \cos \frac{2k\pi}{K})}. \quad (\text{I.3.1})$$

En prenant toutes les valeurs entières de n entre 1 et M et toutes les valeurs entières de k entre 0 et $\frac{K}{2}$, on voit qu'on a trouvé $K \times N$ valeurs propres distinctes : il n'y en a pas d'autre.

Le spectre du nanoruban infini est donc

$$\bigcup_{n=1}^M \bigcup_{\theta \in [0,1]} \left\{ \lambda_{n,\pm,\pm}(\theta) = \pm \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{n\pi}{M+1} \pm \sqrt{4 \cos^2 \frac{n\pi}{M+1} (2 + 2 \cos 2\pi\theta)}} \right\}.$$

On voit en particulier que le minimum du spectre en valeur absolue est égal à $1 - 2 \cos \frac{n\pi}{M+1}$ pour un certain n . Il est égal à 0 si et seulement s'il existe n tel que $\cos \frac{n\pi}{M+1} = \frac{1}{2}$, c'est-à-dire que $\frac{n\pi}{M+1} = \frac{\pi}{3}$ donc $M+1 = 3n$. On voit donc que le nanoruban est métallique (pas de lacune spectrale) si $M+1$ est multiple de 3 et semi-conducteur dans les autres cas. Ce résultat est conforme à celui des physiciens [17]. De plus, un développement limité nous montre que la lacune spectrale a une taille de l'ordre de $\frac{1}{M+1}$.

Considérons maintenant le cas des nanotubes de carbone. Le lecteur pourra trouver un article de synthèse sur leurs propriétés de transport quantique dans [44]. Mathématiquement, un nanotube de carbone est représenté simplement comme le quotient d'une feuille de graphène décrite au début de la section précédente. Plus précisément, il s'agit de l'ensemble des images des deux points de base par le groupe $\Lambda_h / \langle \mathbf{v} \rangle$, où $\mathbf{v} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2$ est un vecteur de Λ_h appelé vecteur de chiralité du nanotube. Le spectre des nanotubes se calcule par transformation de Fourier. Il est facile de montrer que la transformée de Fourier d'une fonction sur $\Lambda_h / \langle \mathbf{v} \rangle$ est une fonction définie sur

$$B_{\mathbf{v}} = \{ \mathbf{k} \in B, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \in 2\pi\mathbb{Z} \}$$

où B est la zone de Brillouin associée à Λ_h . De plus, le même calcul que pour la feuille de graphène nous montre que la relation de dispersion s'écrit de la même façon que dans (I.2.3), à savoir

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2}|,$$

où \mathbf{k} est cette fois un élément de $B_{\mathbf{v}}$.

La présence d'une lacune spectrale autour de 0 dépend donc de si 0 appartient à l'image de cette relation de dispersion, c'est-à-dire de si les points \mathbf{K} ou \mathbf{K}' , zéros de E_{\pm} , sont dans $B_{\mathbf{v}}$.

Cela revient donc à résoudre l'équation

$$\frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2) \cdot (m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2) = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}$$

qui est équivalente à

$$m_1 - m_2 \in 3\mathbb{Z}.$$

On retrouve bien le résultat annoncé par les physiciens [44], à savoir que le nanotube de carbone est semi-conducteur si et seulement si $m_1 - m_2$ est multiple de 3. De plus, la relation de dispersion étant conique au voisinage des sommets de la zone de Brillouin et les lignes de $B_{\mathbf{v}}$ étant espacées de $\frac{1}{|\mathbf{v}|}$, on voit que la lacune spectrale a une largeur asymptotiquement de l'ordre de $\frac{1}{|\mathbf{v}|}$.

I.3.2 Graphène périodiquement perturbé

Un moyen envisagé par les physiciens pour produire du graphène semi-conducteur est de modifier périodiquement la feuille de graphène par des obstacles. Il peut s'agir de trous [55] ou de défauts d'autres types. Nous présenterons ici principalement les travaux de Barbaroux, Cornean et Stockmeyer [6] qui utilisent le modèle avec l'opérateur de Dirac.

Il est important dans ce contexte de mentionner un phénomène propre à l'opérateur de Dirac nommé *paradoxe de Klein*. Nous présenterons cet effet uniquement en dimension 1, d'une façon un peu différente de celle de Thaller [62, section 4.5]. Considérons l'opérateur de Dirac avec un potentiel « classique » (multiplication par une fonction scalaire) V à valeurs réelles que l'on supposera continu (pas forcément périodique). L'opérateur s'écrit alors

$$D_V = -i\sigma_1 \frac{d}{dx} + V \text{ sur } L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2). \quad (\text{I.3.2})$$

On va chercher une fonction propre généralisée que l'on notera $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ et qui est associée à une valeur propre généralisée que l'on notera λ . L'équation à résoudre est donc

$$\begin{cases} -i\psi_2'(x) + V(x)\psi_1(x) & = \lambda\psi_1(x) \\ -i\psi_1'(x) + V(x)\psi_2(x) & = \lambda\psi_2(x) \end{cases}. \quad (\text{I.3.3})$$

En posant $f = \psi_1 + \psi_2$ et $g = \psi_1 - \psi_2$, on trouve que ce système est équivalent à

$$\begin{cases} -if'(x) + V(x)f(x) & = \lambda f(x) \\ ig'(x) + V(x)g(x) & = \lambda g(x) \end{cases}.$$

On trouve alors deux équations différentielles linéaires d'ordre 1 indépendantes que l'on peut résoudre explicitement : on trouve

$$\begin{cases} f(x) & = C e^{i(\lambda x - W(x))} \\ g(x) & = C' e^{-i(\lambda x - W(x))} \end{cases} \quad (\text{I.3.4})$$

où W est une primitive de V et $C, C' \in \mathbb{R}$.

Si on pose χ_n une fonction lisse bornée à support dans l'intervalle $[-n, n]$, valant 1 dans l'intervalle $[-n+1, n-1]$ et dont la dérivée ne prend pas de valeur plus grande que 2, on voit que pour tout n la fonction $\begin{pmatrix} \chi_n \psi_1 \\ \chi_n \psi_2 \end{pmatrix}$, pour $\psi_1 = \frac{f+g}{2}$ et $\psi_2 = \frac{f-g}{2}$ avec f et g les fonctions définies par (I.3.4), est dans $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}^2)$. De plus, il est facile de voir que $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\|(\chi_n \psi_1, \chi_n \psi_2)\|} (D_V - \lambda) \begin{pmatrix} \chi_n \psi_1 \\ \chi_n \psi_2 \end{pmatrix} = 0$. Ainsi, par le critère de Weyl, λ appartient au spectre de D_V . Comme cela est valable pour tout λ , $\sigma(D_V) = \mathbb{R}$. En outre, pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$,

$$|\psi(\mathbf{x})|^2 = |\psi_1(\mathbf{x})|^2 + |\psi_2(\mathbf{x})|^2 = \frac{1}{2}(|f(\mathbf{x})|^2 + |g(\mathbf{x})|^2) = \frac{C^2 + C'^2}{2}.$$

L'électron n'est donc pas arrêté par les obstacles.

Une solution pour créer une barrière consiste à prendre des potentiels portés par la matrice σ_3 . Nous allons voir que Barbaroux, Cornean et Stockmeyer ont montré dans [6] que ce type de potentiels ouvrait une lacune spectrale sous certaines conditions. Leur preuve, visant à étudier des modèles de graphène, est en dimension 2 mais peut facilement être adaptée à la dimension 1.

On rappelle qu'en dimension 2 l'énergie cinétique est donnée par l'opérateur défini sur $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$ par

$$H_0 = \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla) = \begin{pmatrix} 0 & -i\partial_1 - \partial_2 \\ -i\partial_1 + \partial_2 & 0 \end{pmatrix}$$

où $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2)$ et les σ_j sont les matrices de Pauli définies dans l'équation (I.2.5).

La modification périodique est modélisée par une fonction bornée $\chi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dont le support est un compact inclus dans $\Omega =]-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^2$ vérifiant

$$\int_{\Omega} \chi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \Phi > 0 \text{ et } \int_{\Omega} |\chi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1.$$

En unités physiques, le hamiltonien décrivant le graphène périodiquement perturbé est donné par

$$\tilde{H}(\alpha, \mu, L) = \hbar v_F H_0 + \sigma_3 \mu \sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^2} \chi\left(\frac{\mathbf{x} - L\gamma}{\alpha L}\right)$$

où \hbar est la constante de Planck divisée par 2π et v_F la vitesse de Fermi dans le graphène. Le paramètre $\mu \geq 0$ représente l'intensité de la perturbation et L sa période, alors que α est un facteur donnant l'étendue de la zone affectée par la perturbation. Afin de simplifier les notations, on notera $\beta = \frac{\mu L}{\hbar v_F}$ et on réalisera le changement de variable $\mathbf{x} \mapsto L\mathbf{x}$ pour obtenir un hamiltonien dépendant de 2 paramètres seulement $H(\alpha, \beta) = \frac{L}{\hbar v_F} \tilde{H}(\alpha, \mu, L)$.

Le hamiltonien étudié sera alors

$$H(\alpha, \beta) = H_0 + \beta \sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^2} \chi\left(\frac{\mathbf{x} - \gamma}{\alpha}\right) \sigma_3. \quad (\text{I.3.5})$$

Le résultat obtenu par Barbaroux, Cornean et Stockmeyer est le suivant, où on note $\rho(T)$ l'ensemble résolvant d'un opérateur auto-adjoint T .

Théorème I.24 ([6], théorème 1.1). *Il existe 2 constantes $C > 0$ et $\delta \in]0, 1]$, avec $C\delta < \Phi$, telles que pour tout $\alpha \in]0, 1/2]$ et $\beta > 0$ vérifiant $\alpha\beta < \delta$ on a*

$$[-\alpha^2\beta(\Phi - C\alpha\beta), \alpha^2\beta(\Phi - C\alpha\beta)] \subset \rho(H(\alpha, \beta)).$$

Du point de vue de la physique, cela revient à dire que pour $\frac{\alpha\mu L}{\hbar v_F}$ suffisamment petit s'ouvre une lacune spectrale de largeur au moins $\mu\phi\alpha^2$. En revanche, cette largeur est indépendante de L .

Nous ne donnerons pas ici les détails de la preuve. Sa première étape consiste à utiliser la transformation de Bloch-Floquet pour se ramener à un problème sur un domaine borné. Notons que la période du potentiel ne correspond pas ici à un réseau atomique. Ensuite, utilisant la base formée des $\psi_{\mathbf{m}}(\mathbf{x}) = e^{2i\pi\mathbf{m}\cdot\mathbf{x}}$, on commence par montrer que chacun des opérateurs fibres restreint au sous-espace engendré par $\psi_{\mathbf{0}}$, possède une lacune spectrale. On utilise enfin le lemme de Feschbach qui nous permet d'affirmer que la lacune est maintenue lorsqu'on passe à l'espace tout entier.

De la même façon que dans le cas de l'opérateur de Schrödinger, on peut montrer que le spectre d'un opérateur de Dirac avec un potentiel périodique est absolument continu. En nous inspirant de la preuve du théorème XIII.100 de [56], nous allons montrer le résultat suivant.

Théorème I.25. *Soit V un potentiel à valeurs dans l'espace des matrices hermitiennes $\mathcal{H}_2(\mathbb{C})$ Γ -périodique (pour un certain réseau Γ) borné. Alors l'opérateur $D_0 + V$, défini sur $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$, a un spectre purement absolument continu.*

Pour ce faire, nous allons regarder la transformée de Bloch-Floquet de cet opérateur, qui est

$$h(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla_{per} - 2\pi\mathbf{k}) + V.$$

On notera $h_0(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla_{per} - 2\pi\mathbf{k})$. Si $h(\mathbf{k})$ est défini a priori pour \mathbf{k} dans la zone de Brillouin, on peut l'étendre avec cette formule à \mathbb{C}^2 tout entier. Pour \mathbf{a} et $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^2$ et $z \in \mathbb{C}$, on va s'intéresser aux valeurs propres de $h_0(\mathbf{a} + z\mathbf{b})$. Le calcul nous montre qu'il s'agit des $E_m(z)$, pour $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^2$ où

$$E_m(z)^2 = 4\pi^2 \left((m_1 - b_1(\lambda + iy) - a_1)^2 + (m_2 - b_2(\lambda + iy) - a_2)^2 \right).$$

On va alors choisir \mathbf{b} tel que $b_1 = 1$ et $b_2 = 0$ et λ tel que $b_1\lambda + a_1 = \frac{1}{2}$.

Dans ce cas, la partie imaginaire de $E_m(z)^2$ est égale à $-8\pi^2 y(m_1 - \frac{1}{2})$ donc

$$|\text{Im}(E_m(z)^2)| \geq 2\pi|y|(|m_1| + 1).$$

D'autre part,

$$\text{Re}(E_m(z)^2) = 4\pi^2 \left((m_1 - \frac{1}{2})^2 + y^2 + (m_2 - a_2)^2 \right) \neq 0.$$

L'opérateur $h_0(\mathbf{a} + z\mathbf{b})$ est donc inversible et

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \|h_0(\mathbf{a} + z\mathbf{b})^{-1}\| = 0.$$

Considérons maintenant l'opérateur

$$A(t) = h(\mathbf{a} + t\mathbf{b})$$

pour $t \in \mathbb{R}$ et le \mathbf{b} choisi précédemment. Comme $h_0(\mathbf{k})$ a un spectre purement discret et que l'ensemble de ses valeurs propres n'a pas de point d'accumulation fini, il est à résolvante compacte pour tout \mathbf{k} . Comme d'autre part V est borné, l'opérateur $A(t)$ est à résolvante compacte pour tout t . Notons maintenant $E_j(0)$, où $j \in \mathbb{Z}$, les valeurs propres de $A(0)$ classées par ordre croissant en tenant compte des multiplicités. Comme $A(t)$ est une fonction analytique de t , on peut trouver une famille $(E_j(\cdot))$ de fonctions analytiques chacune définie sur un voisinage de 0 valant $E_j(0)$ en 0 et telles que $E_j(t)$ soit une valeur propre de $A(t)$ pour tout t . Or $\frac{dA}{dt} = -2\pi\boldsymbol{\sigma} \cdot (-2\pi\mathbf{b})$ donc $|\frac{dE_j}{dt}| \leq 4\pi|\mathbf{b}|$. Les fonctions E_j sont donc bornées sur tout intervalle compact, elles peuvent donc être définies sur \mathbb{R} tout entier.

Montrons maintenant qu'aucune des fonctions E_j n'est constante. On a vu que $h_0(\mathbf{a} + z\mathbf{b})$ est inversible. Le potentiel V étant borné, on voit que $h(\mathbf{a} + z\mathbf{b})$ est également inversible si $\text{Im}(z)$ est assez grand et

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \|h(\mathbf{a} + (\lambda + iy)\mathbf{b})^{-1}\| = 0. \quad (\text{I.3.6})$$

Or, si $E_j(t) = C$ pour tout t , alors par prolongement analytique C est valeur propre de $A(z)$ pour tout $z \in \mathbb{C}$. On voit donc que C ne peut pas être 0 car $A(z)$ est inversible pour $\text{Im}(z)$ assez grande. De plus, $\frac{1}{C}$ est valeur propre de $A(z)^{-1}$. On a alors

$$\|A(z)^{-1}\| \geq \frac{1}{C},$$

ce qui contredit (I.3.6). Aucune des E_j ne peut donc être constante.

On peut alors conclure la preuve du théorème. On peut écrire tout point situé à l'intérieur de la cellule fondamentale du réseau réciproque comme $\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2$. En considérant l'opérateur $A(t) = h(t\mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2)$ pour k_2 fixé et en appliquant le théorème I.7, on conclut la preuve.

Il est raisonnable de se demander dans quelle mesure l'addition d'un potentiel de masse permet réellement de modéliser des trous dans la feuille de graphène. Cette question a été étudiée par Barbaroux, Cornean, Le Treust et Stockmeyer dans [5]. La première chose à faire est de définir l'opérateur de Dirac sur un domaine n'étant pas \mathbb{R}^2 , c'est-à-dire de trouver des conditions au bord adaptées. En effet, les conditions de Dirichlet ne donnent pas un opérateur auto-adjoint dans le cas de Dirac. La solution communément adoptée consiste à prendre les conditions dites de *masse infinie*. Ce nom est dû précisément au fait que l'opérateur défini sur un domaine avec ces conditions au bord est la limite d'opérateurs définis sur l'espace tout entier avec un potentiel de masse en dehors du domaine dont l'intensité tend vers l'infini.

Dans notre cas, nous considérerons l'ensemble $\tilde{\Omega} = \cup_{\gamma \in LZ^2} B_r(\gamma)$ pour $0 < r < L$. Les auteurs de [5] considèrent un cas plus général, mais nous ne nous intéresserons qu'à celui-ci pour ne pas avoir à introduire d'hypothèses longues. On définit également l'ouvert Ω comme le complémentaire de $\tilde{\Omega}$. Le hamiltonien défini sur tout l'espace est alors

$$H_m = H_0 + m \mathbf{1}_{\tilde{\Omega}} \sigma_3.$$

Pour définir les conditions au bord, définissons pour $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ la normale sortante à Ω en \mathbf{x} $\mathbf{n}_\Omega(\mathbf{x})$. On définit alors la matrice

$$B_\Omega(\mathbf{x}) = -i\sigma_3 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_\Omega(\mathbf{x})$$

et les projections $P_\pm = (1 \pm B_\Omega)/2$. On définit alors l'opérateur sur Ω avec conditions au bord de masse infinie par

$$H_\Omega \phi = H_0 \phi, \quad \phi \in \text{Dom}_\Omega = \{\phi \in H^1(\Omega, \mathbb{C}^2), P_- \text{tr}_\Omega \phi = 0\}.$$

On notera $R_m(z) = (H_m - z)^{-1}$ et $R_\Omega(z) = (H_\Omega - z)^{-1}$ lorsque z est dans les ensembles résolvants des opérateurs. On fera l'identification naturelle

$$L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2) \equiv L^2(\Omega, \mathbb{C}^2) \oplus L^2(\tilde{\Omega}, \mathbb{C}^2).$$

Le résultat de Barbaroux, Cornean, Le Treust et Stockmeyer est le suivant.

Théorème I.26 ([5], théorème 1.2). *Soit $K \subset \rho(H_\Omega)$ un compact. Il existe $m_0 > 1$ tel que pour tout $m > m_0$ on a $K \subset \rho(H_m)$ et il existe $C < \infty$ tel quel*

$$\sup_{z \in K} \|R_m(z) - R_\Omega(z) \oplus 0\| \leq \frac{C}{\sqrt{m}}.$$

Ce résultat implique en particulier que le spectre de H_m converge vers celui de H_Ω .

I.3.3 Généralisation au graphène multi-couches

Un problème intéressant est d'étudier les propriétés électroniques d'un matériau formé non pas d'une simple couche de graphène mais d'un empilement de plusieurs couches. Dans

ce cas, la dynamique de l'électron peut être approchée par un hamiltonien effectif qui est typiquement un opérateur de type Dirac d'ordre N , N étant le nombre de couches (voir [47] et ses références).

Dans cette sous-section, nous généraliserons le résultat de Barbaroux, Cornean et Stockmeyer présenté dans la sous-section précédente à des hamiltoniens d'ordre supérieur, y compris ceux modélisant le graphène multi-couches. Ce travail a été réalisé en collaboration avec Jean-Marie Barbaroux et Horia D. Cornean et a fait l'objet d'un article soumis à la *Revue roumaine de mathématiques pures et appliquées* et déposé sur arXiv [8].

Notre but est de montrer que l'addition d'une perturbation périodique ouvre une lacune dans le spectre de l'opérateur

$$H_0 = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-i\nabla)$$

sur $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$, où $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ désignent les matrices de Pauli définies par (I.2.5) et $\mathbf{F} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$. Plus, précisément, cela signifie que pour $\boldsymbol{\psi} \in \text{Dom}(H_0)$

$$H_0\boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) = \left(\mathcal{F}^{-1} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(\cdot) \mathcal{F}\boldsymbol{\psi}] \right) (\mathbf{x}),$$

où \mathcal{F} désigne la transformation de Fourier sur $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$

$$\mathcal{F}\boldsymbol{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

On suppose que la fonction \mathbf{F} satisfait les conditions suivantes.

Hypothèse I.27. (i) \mathbf{F} appartient à $\mathcal{C}^3(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^3)$.

(ii) Il existe des constantes $K'_0, K_i > 0$ telles que pour tout $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$,

$$\begin{aligned} K'_0 |\mathbf{p}|^d &\leq |\mathbf{F}(\mathbf{p})| \leq K_0 |\mathbf{p}|^d, \\ |D^i \mathbf{F}(\mathbf{p})| &\leq K_i \langle \mathbf{p} \rangle^{d-|i|} \end{aligned} \tag{I.3.7}$$

pour un certain $d > 0$ et tout multi-indice i tel que $1 \leq |i| \leq 3$. Ici, $\langle \mathbf{p} \rangle = \sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}$ et D^i désigne l'opérateur de dérivation partielle par rapport au multi-indice i .

(iii) Il existe une matrice 2×3 de rang 2 notée A telle que, dans un voisinage de 0,

$$\mathbf{F}(\mathbf{p}) = |\mathbf{p}|^{d-1} A\mathbf{p} + O(|\mathbf{p}|^{d+1}).$$

Proposition I.28. L'opérateur H_0 est unitairement équivalent à l'opérateur de multiplication par $\sigma_3 |\mathbf{F}|$. Il est donc auto-adjoint sur $\text{Dom}(H_0) = \mathcal{F}^{-1}(\text{Dom}(|\mathbf{F}(\cdot)|))$ et son spectre est donné par l'image essentielle de $\pm |\mathbf{F}|$, qui est \mathbb{R} sous les hypothèses I.27 (i) et (ii).

Démonstration. La preuve, identique à celle concernant l'opérateur de Dirac libre, vient directement de la définition de H_0 par la transformation de Fourier qui est unitaire (cf. [62, théorème 1.1]). \square

Afin d'ouvrir une lacune autour de l'énergie zéro, nous allons perturber H_0 avec un potentiel périodique défini de la façon suivante. Soit

$$\boldsymbol{\chi} = (\chi_1, \chi_2, \chi_3) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$$

où chacun des χ_i est une fonction bornée à support compact inclus dans le carré $\Omega =]-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^2$.

Soit $\beta > 0$ et $\alpha \in]0, 1]$. Le hamiltonien perturbé est

$$H(\alpha, \beta) = H_0 + \beta \sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^2} \chi \left(\frac{\mathbf{x} - \gamma}{\alpha} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}.$$

L'opérateur $H(\alpha, \beta)$ est \mathbb{Z}^2 -périodique et auto-adjoint sur $\text{Dom}(H_0)$.

Remarque I.29. Dans la sous-section précédente, nous avons vu que les auteurs de [6] ont traité le cas particulier correspondant à l'opérateur de Dirac libre sans masse, pour lequel $\mathbf{F}(\mathbf{p}) = (p_1, p_2, 0)$ et $\chi_1 = \chi_2 = 0$.

Notons $\Phi_i = \int_{\Omega} \chi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$, $1 \leq i \leq 3$, et définissons le vecteur à trois composantes

$$\boldsymbol{\Phi} = (\Phi_i)_{1 \leq i \leq 3} \in \mathbb{R}^3.$$

Nous noterons $\boldsymbol{\Phi}_{\parallel}$ la projection de $\boldsymbol{\Phi}$ sur $\text{Im}(A)$ et $\boldsymbol{\Phi}_{\perp}$ sa projection sur $\text{Im}(A)^{\perp}$.

Le résultat principal de cette sous-section est le suivant.

Théorème I.30. *Supposons que $\boldsymbol{\Phi}_{\perp} \neq 0$. Soit $d' = \min(d, 2)$. Il existe des constantes $\lambda_0, C > 0$ et $\delta \in]0, 1[$ avec $C\delta < \frac{|\boldsymbol{\Phi}_{\perp}|}{2}$ telles que pour tous $\alpha \in]0, 1/2]$ et $\beta > 0$ vérifiant $\alpha^2\beta < \lambda_0$, $\alpha^{d'}\beta < \delta$ l'intervalle*

$$\left[-\alpha^2\beta \left(\frac{|\boldsymbol{\Phi}_{\perp}|}{2} - C\alpha^{d'}\beta \right), \alpha^2\beta \left(\frac{|\boldsymbol{\Phi}_{\perp}|}{2} - C\alpha^{d'}\beta \right) \right]$$

est inclus dans l'ensemble résolvant $\rho(H(\alpha, \beta))$.

Remarque I.31. Dans le cas particulier de l'opérateur de Dirac, la condition est remplie étant donné que la partie cinétique du hamiltonien est dans le sous-espace engendré par σ_1 et σ_2 et le potentiel est dans $\text{Vect}(\sigma_3)$.

Comme dans [6], nous utilisons la transformation de Bloch-Floquet pour nous ramener à un problème sur le carré unité, où le gradient a une base propre bien connue. Ensuite, nous utilisons la méthode de Feshbach pour séparer les problèmes sur le mode constant et les modes non constants. Alors que l'estimation sur le sous-espace constant est directe, il nous faut utiliser la décroissance de la résolvante de l'opérateur libre et plusieurs applications successives de l'équation de la résolvante pour montrer l'inversibilité sur le sous-espace orthogonal.

La preuve sera présentée de la façon suivante. Dans un premier paragraphe, nous étudierons en détail le noyau intégral de l'opérateur libre, notamment ses singularités locales et sa décroissance hors diagonale. Dans un second paragraphe, nous donnerons la preuve du théorème principal. Nous présentons de plus en annexe les résultats sur la transformation de Bloch-Floquet utilisés dans notre cas.

Décroissance de la résolvante et noyau intégral Dans cette partie, nous étudions le noyau intégral de la résolvante de l'opérateur sans potentiel. Étant donné la forme de l'énergie cinétique, nous n'avons pas de formule explicite pour ce noyau intégral. Néanmoins, nous parvenons à prouver qu'il existe, que ses singularités locales sont intégrables et qu'il décroît suffisamment rapidement loin de la diagonale.

Le résultat est le suivant.

Proposition I.32. Soit M_d la fonction définie sur $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ par :

$$M_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^{2-d}} + 1 & \text{si } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq 1 \text{ et } d \neq 2; \\ -\log |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| + 1 & \text{si } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq 1 \text{ et } d = 2; \\ \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^3} & \text{si } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \geq 1. \end{cases}$$

L'opérateur $(H_0 - i)^{-1}$ a un noyau intégral, noté $(H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, tel que

$$\left| (H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \right| \leq M_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \quad (\text{I.3.8})$$

La preuve de la proposition s'appuie sur le lemme suivant et sera donnée à la fin du paragraphe.

Lemme I.33. Il existe $C > 0$ tel que pour tous \mathbf{f} et $\mathbf{g} \in L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$ on ait

$$|\langle \mathbf{f}, (H_0 \pm i)^{-1} \mathbf{g} \rangle| \leq C \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} |\mathbf{f}(\mathbf{x})| M_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}') |\mathbf{g}(\mathbf{x}')| d\mathbf{x} d\mathbf{x}'. \quad (\text{I.3.9})$$

Remarque I.34. Si $d > 2$ alors M_d est bornée alors que si $d < 2$, M_d a une singularité locale en $\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^{2-d}}$. C'est pourquoi nous définissons $d' = \min(d, 2)$; cela nous permet d'écrire, pour $d \neq 2$, $M_d \leq \frac{2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^{2-d'}}$.

Preuve du lemme I.33. Pour $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$, on définit la matrice 2×2

$$G(\mathbf{p}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{p}) - i)^{-1}.$$

L'opérateur de multiplication par G est borné sur $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$.

Rappelons que $\langle \mathbf{p} \rangle = \sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}$. On définit, pour $\epsilon > 0$, le noyau régularisé

$$\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p} = \mathcal{F}^{-1}(G e^{-\epsilon \langle \cdot \rangle})(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

Les inégalités (I.3.7) de l'hypothèse I.27(ii) impliquent que pour tout multi-indice N tel que $|N| \leq 3$ il existe $C_N > 0$ tel que

$$|D^N G(\mathbf{p})| \leq \frac{C_N}{\langle \mathbf{p} \rangle^{|N|+d}}. \quad (\text{I.3.10})$$

Pour $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ et $\mathbf{x}' = (x'_1, x'_2)$, on choisit $l \in \{1, 2\}$ tel que $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq \sqrt{2}|x_l - x'_l|$. Par intégrations par parties itérées, on trouve que pour tout entier $M \leq 3$ on a :

$$(x_l - x'_l)^M \mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = i^M \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\partial^M}{\partial p_l^M} (G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle}) d\mathbf{p}. \quad (\text{I.3.11})$$

De là,

$$|x_l - x'_l|^M |\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}')| \leq \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{\partial^M}{\partial p_l^M} (G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle}) \right| d\mathbf{p}. \quad (\text{I.3.12})$$

Prenons $M = 3$. Nous avons alors grâce à la formule de Leibniz, en notant $E(\mathbf{p}) = e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle}$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3}{\partial p_l^3} (G(\mathbf{p}) E(\mathbf{p})) &= \frac{\partial^3 G(\mathbf{p})}{\partial p_l^3} E(\mathbf{p}) + 3 \frac{\partial^2 G(\mathbf{p})}{\partial p_l^2} \frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial p_l} \\ &\quad + 3 \frac{\partial G(\mathbf{p})}{\partial p_l} \frac{\partial E(\mathbf{p})^2}{\partial p_l^2} + G(\mathbf{p}) \frac{\partial E(\mathbf{p})^3}{\partial p_l^3}. \end{aligned}$$

De plus,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial p_l} &= -\epsilon p_l \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle}, \\
\frac{\partial^2 E(\mathbf{p})}{\partial p_l^2} &= -\epsilon \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle} + \epsilon p_l^2 \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle^3} + \epsilon^2 p_l^2 \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle^2}, \\
\frac{\partial^3 E(\mathbf{p})}{\partial p_l^3} &= 3\epsilon p_l \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle^3} + 3\epsilon^2 p_l \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle^2} - 3\epsilon p_l^3 \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle^5} \\
&\quad - 3\epsilon^2 p_l^3 \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle^4} - \epsilon^3 p_l^3 \frac{E(\mathbf{p})}{\langle \mathbf{p} \rangle^3}.
\end{aligned} \tag{I.3.13}$$

Or, comme $x \mapsto x^k e^{-x}$ est bornée sur \mathbb{R}^+ pour tout k , il existe des constantes c_k telles que pour tous $\epsilon > 0$ et $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$

$$\epsilon^k e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \leq c_k \langle \mathbf{p} \rangle^{-k}. \tag{I.3.14}$$

Dans la suite, nous noterons C une constante générique *indépendante de ϵ* . Grâce à (I.3.13), à la majoration (I.3.14) et aux faits que $|E(\mathbf{p})| \leq 1$ et $\frac{|p_l|}{\langle \mathbf{p} \rangle} \leq 1$, nous obtenons que pour tout $j \in \{1, 2, 3\}$,

$$\left| \frac{\partial^j E(\mathbf{p})}{\partial p_l^j} \right| \leq \frac{C}{\langle \mathbf{p} \rangle^j}. \tag{I.3.15}$$

Par (I.3.10) et (I.3.15), nous trouvons que, pour $j \in \{0, 1, 2, 3\}$,

$$\int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{\partial^j}{\partial p_j^j} G(\mathbf{p}) \right| \left| \frac{\partial^{3-j}}{\partial p_j^{3-j}} E(\mathbf{p}) \right| d\mathbf{p} \leq C$$

Ainsi, d'après (I.3.12), nous avons $|\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}')| \leq \frac{C}{|x_l - x'_l|^3}$ donc

$$|\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}')| \leq \frac{C}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3}. \tag{I.3.16}$$

Cette inégalité nous servira uniquement dans le cas $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \geq 1$.

Considérons maintenant le cas $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq 1$. On peut écrire

$$\begin{aligned}
2\pi \mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \int_{|\mathbf{p}| \leq 1} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p} \\
&\quad + \int_{1 \leq |\mathbf{p}| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p} \\
&\quad + \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1} \leq |\mathbf{p}|} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p}.
\end{aligned} \tag{I.3.17}$$

Le premier terme du second membre de (I.3.17) peut être majoré simplement par

$$\left| \int_{|\mathbf{p}| \leq 1} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p} \right| \leq \int_{|\mathbf{p}| \leq 1} |G(\mathbf{p})| d\mathbf{p}, \tag{I.3.18}$$

qui est fini et indépendant de ϵ .

Pour majorer le deuxième terme du second membre de (I.3.17), on utilise le fait que, d'après l'hypothèse I.27(ii), $|G(\mathbf{p})| \leq \frac{C}{|\mathbf{p}|^d}$ ce qui nous donne

$$\left| \int_{1 \leq |\mathbf{p}| \leq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p} \right| \leq 2\pi \int_1^{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} \frac{C}{r^d} r dr \tag{I.3.19}$$

que l'on peut majorer par $C \left(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{2-d}} - 1 \right)$ pour $d \neq 2$ et par $C \log(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1})$ pour $d = 2$.

L'estimation du troisième terme du second membre de (I.3.17) demande plus de travail. Fixons $l \in \{1, 2\}$ comme précédemment tel que $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq \sqrt{2}|x_l - x'_l|$.

Calculons alors

$$\int_{|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} -(x_l - x'_l)^2 e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p},$$

ce qui correspond à l'intégrale que nous voulons estimer multipliée par $-(x_l - x'_l)^2$. Pour $\theta \in [0, 2\pi)$, définissons le vecteur $\mathbf{p}(\theta) = (|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1} \cos \theta, |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1} \sin \theta)$ et notons $p_l(\theta)$ sa l -ième composante. Nous trouvons alors, en intégrant par parties par rapport à la variable p_l et en appliquant le théorème de la divergence,

$$\begin{aligned} & \int_{|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} -(x_l - x'_l)^2 e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p} \\ &= - \int_0^{2\pi} e^{-\epsilon \langle \mathbf{p}(\theta) \rangle} i(x_l - x'_l) e^{i\mathbf{p}(\theta) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}(\theta)) p_l(\theta) d\theta \\ & \quad - \int_{|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} i(x_l - x'_l) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\partial}{\partial p_l} \left(G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \right) d\mathbf{p}. \end{aligned} \quad (\text{I.3.20})$$

Grâce à l'inégalité (I.3.10), nous trouvons que le premier terme est majoré par

$$2\pi \frac{C_0}{(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1})^d} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1} |x_l - x'_l| \leq 2\pi C_0 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^d. \quad (\text{I.3.21})$$

Pour estimer le deuxième terme du second membre de (I.3.20), on applique à nouveau une intégration par parties :

$$\begin{aligned} & - \int_{|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} i(x_l - x'_l) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\partial}{\partial p_l} \left(G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \right) d\mathbf{p} \\ &= \int_0^{2\pi} e^{i\mathbf{p}(\theta) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\partial}{\partial p_l} \left(G e^{-\epsilon \langle \cdot \rangle} \right) (\mathbf{p}(\theta)) p_l(\theta) d\theta \\ & \quad + \int_{|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\partial^2}{\partial p_l^2} \left(G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \right) d\mathbf{p}. \end{aligned} \quad (\text{I.3.22})$$

Utilisant encore que

$$\left| \frac{\partial}{\partial p_l} \left(G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \right) \right| \leq \frac{C}{|\mathbf{p}|^{d+1}} \quad \text{et} \quad \left| \frac{\partial^2}{\partial p_l^2} \left(G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \right) \right| \leq \frac{C}{|\mathbf{p}|^{d+2}},$$

nous pouvons majorer le premier terme du second membre de (I.3.22) par

$$2\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1} \frac{C}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-(d+1)}} = 2\pi C |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^d \quad (\text{I.3.23})$$

et le deuxième par

$$\int_{|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} \frac{C}{|\mathbf{p}|^{d+2}} d\mathbf{p} = \frac{2\pi C}{d} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^d. \quad (\text{I.3.24})$$

Les inégalités (I.3.21), (I.3.23) et (I.3.24) donnent ensemble que

$$\left| \int_{|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} d\mathbf{p} \right| \leq C |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{d-2}. \quad (\text{I.3.25})$$

En sommant les inégalités (I.3.18), (I.3.19) et (I.3.25), nous trouvons qu'il existe une constante $C > 0$ telle que, uniformément en ϵ ,

$$|\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}')| \leq C \left(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{2-d}} + 1 \right)$$

si $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq 1$, ce qui, avec l'inégalité (I.3.16) pour $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \geq 1$, permet de conclure que, uniformément en ϵ , on a

$$|\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}')| \leq CM_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'),$$

où M_d est la fonction définie dans l'énoncé du lemme.

Nous pouvons maintenant montrer la majoration (I.3.9) pour $(H_0 - i)^{-1}$. Soit \mathbf{f} et \mathbf{g} dans l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$. Alors,

$$\langle \mathbf{f}, (H_0 - i)^{-1} \mathbf{g} \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} \overline{\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{p})} G(\mathbf{p}) \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$$

par l'identité de Parseval. Par convergence dominée, on a

$$\int_{\mathbb{R}^2} \overline{\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{p})} G(\mathbf{p}) \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathbb{R}^2} \overline{\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{p})} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (\text{I.3.26})$$

et, par l'identité de Parseval à nouveau et en notant $*$ le produit de convolution entre $L^1(\mathbb{R}^2, \mathcal{M}_2(\mathbb{C}))$ et $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} \overline{\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{p})} G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle} \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} &= \int_{\mathbb{R}^2} \overline{\mathbf{f}(\mathbf{x})} (\mathbf{K}_\epsilon(\cdot, 0) * \mathbf{g})(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \overline{\mathbf{f}(\mathbf{x})} \mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{g}(\mathbf{x}') d\mathbf{x} d\mathbf{x}'. \end{aligned}$$

Étant donné que

$$\forall \epsilon > 0, |\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}')| \leq M_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}'),$$

nous trouvons, au vu de (I.3.26), que

$$|\langle \mathbf{f}, (H_0 - i)^{-1} \mathbf{g} \rangle| \leq \int_{\mathbb{R}^2} |\mathbf{f}(\mathbf{x})| M_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}') |\mathbf{g}(\mathbf{x}')| d\mathbf{x} d\mathbf{x}'.$$

Cela permet de conclure la preuve du lemme I.33. □

Nous pouvons maintenant donner la preuve de la proposition I.32.

Preuve de la proposition I.32. D'après l'équation (I.3.11), on sait que, pour $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$,

$$\mathbf{K}_\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{i}{(x_l - x'_l)^3} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\partial^3}{\partial p_l^3} (G(\mathbf{p}) e^{-\epsilon \langle \mathbf{p} \rangle}) d\mathbf{p}.$$

L'intégrande converge simplement vers $e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{\partial^3 G(\mathbf{p})}{\partial p_l^3}$. De plus, d'après la majoration (I.3.10), il est dominé par une fonction intégrable indépendante de ϵ . Ainsi, par convergence dominée, \mathbf{K}_ϵ converge simplement vers une fonction de \mathbf{x} et \mathbf{x}' qu'on notera $(H_0 - i)^{-1}(\cdot, \cdot)$ et qui vérifie évidemment l'inégalité (I.3.8).

De là, par convergence dominée, nous avons que pour tous \mathbf{f} et $\mathbf{g} \in L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$

$$\langle \mathbf{f}, (H_0 - i)^{-1} \mathbf{g} \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} \mathbf{f}(\mathbf{x}) (H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{g}(\mathbf{x}') d\mathbf{x} d\mathbf{x}'$$

et

$$|(H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')| \leq M_d(\mathbf{x}, \mathbf{x}').$$

□

Preuve du théorème principal Soit $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2, \mathbb{C})$ l'espace de Schwartz et $\Omega =]-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^2$. On rappelle que la transformation de Bloch-Floquet, définie par

$$\begin{aligned} \mathcal{U} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}) &\subset L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}) \rightarrow L^2(\Omega^2) \\ (\mathcal{U}\psi)(\mathbf{x}, \mathbf{k}) &= \sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}+\gamma)} \psi(\mathbf{x} + \gamma) \end{aligned} \quad (\text{I.3.27})$$

et étendue par densité à $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C})$, est un opérateur unitaire et que pour $f \in L^2(\Omega^2)$, $\mathbf{x} \in \Omega$ et $\gamma \in \mathbb{Z}^2$,

$$(\mathcal{U}^* f)(\mathbf{x} + \gamma) = \int_{\Omega} e^{-2i\pi\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}+\gamma)} f(\mathbf{x}, \mathbf{k}) d\mathbf{k}.$$

On peut alors définir composante par composante la transformation de Bloch-Floquet sur $L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2)$ que l'on notera abusivement \mathcal{U} aussi.

L'application de cette transformation (cf. proposition A.2 en appendice) nous donne

$$\begin{aligned} \mathcal{U}H(\alpha, \beta)\mathcal{U}^* &= \int_{\Omega}^{\oplus} h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) d\mathbf{k}, \\ h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-i\nabla_{\text{per}} - 2\pi\mathbf{k}) + \beta\boldsymbol{\chi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \quad (\text{I.3.28})$$

où, pour chaque \mathbf{k} , le hamiltonien fibre $h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta)$ est un opérateur défini sur $L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$. De même, on notera

$$h_{\mathbf{k}}^{(0)} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-i\nabla_{\text{per}} - 2\pi\mathbf{k}).$$

L'opérateur ∇_{per} désigne ici le gradient sur $L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ avec conditions au bord périodiques et $\boldsymbol{\chi}_{\alpha}(\mathbf{x}) = (\chi_{1,\alpha}(\mathbf{x}), \chi_{2,\alpha}(\mathbf{x}), \chi_{3,\alpha}(\mathbf{x})) := \boldsymbol{\chi}(\mathbf{x}/\alpha)$.

D'après le théorème I.6, le spectre de $H(\alpha, \beta)$ est donné par ceux des $h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta)$:

$$\text{Spec}(H(\alpha, \beta)) = \overline{\bigcup_{\mathbf{k} \in \Omega} \text{Spec}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta))}. \quad (\text{I.3.29})$$

Posant $\Psi_{\mathbf{m}} = e^{2i\pi\mathbf{m}\cdot\mathbf{x}}$ pour $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^2$ et $\mathbf{x} \in \Omega$, on trouve que la famille $(\Psi_{\mathbf{m}})$ est une base de vecteurs propres de $\mathbf{F}(-i\nabla_{\text{per}})$ vérifiant, si on note $\mathbf{F} = (F_1, F_2, F_3)$,

$$F_i(-i\nabla_{\text{per}})\Psi_{\mathbf{m}} = F_i(2\pi\mathbf{m})\Psi_{\mathbf{m}} \text{ pour } i = 1, 2, 3.$$

On définit alors, pour $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^2$, les projections

$$P_{\mathbf{m}} = |\Psi_{\mathbf{m}}\rangle\langle\Psi_{\mathbf{m}}| \otimes 1_{\mathbb{C}^2} \quad \text{et} \quad Q_{\mathbf{0}} = \text{Id} - P_{\mathbf{0}}.$$

Nous utiliserons la méthode de Feshbach (présentée par exemple dans le lemme 6.1 de [50]) pour ramener le problème spectral à une famille de problèmes sur $P_{\mathbf{0}}L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ et $Q_{\mathbf{0}}L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$. Le lemme affirme que $z \in \rho(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta))$ si $Q_{\mathbf{0}}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z)Q_{\mathbf{0}}$ est inversible sur $Q_{\mathbf{0}}L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ et si l'opérateur $\mathcal{F}_{P_{\mathbf{0}}}(z)$ défini sur $P_{\mathbf{0}}L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ par

$$\mathcal{F}_{P_{\mathbf{0}}}(z) = P_{\mathbf{0}}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z)P_{\mathbf{0}} - \beta^2 P_{\mathbf{0}}\boldsymbol{\chi}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma} Q_{\mathbf{0}}(Q_{\mathbf{0}}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z)Q_{\mathbf{0}})^{-1} Q_{\mathbf{0}}\boldsymbol{\chi}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma} P_{\mathbf{0}} \quad (\text{I.3.30})$$

est également inversible.

Nous prouvons d'abord que $P_{\mathbf{0}}h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta)P_{\mathbf{0}}$ a une lacune spectrale d'ordre $\alpha^2\beta$ autour de 0, puis que le second terme du second membre de (I.3.30) est suffisamment petit pour ne pas refermer la lacune dans le cas où z est dans l'intervalle donné dans le théorème. Pour montrer l'inversibilité de $P_{\mathbf{0}}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z)P_{\mathbf{0}}$, nous devons minorer $|\mathbf{F}(\mathbf{p}) + \lambda\boldsymbol{\Phi}|$, où nous rappelons que nous avons posé $\boldsymbol{\Phi} = (\Phi_i)_{1 \leq i \leq 3}$, $\boldsymbol{\Phi}_{\parallel}$ la projection de $\boldsymbol{\Phi}$ sur $\text{Im}(A)$ et $\boldsymbol{\Phi}_{\perp}$ sa projection sur $\text{Im}(A)^{\perp}$.

Lemme I.35. Soit $\alpha \in]0, 1[$ et $\beta > 0$. Alors, pour tout $\mathbf{k} \in \Omega$ et $\Psi \in P_0 L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$, on a pour $\alpha^2 \beta$ assez petit :

$$\|P_0 h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) P_0 \Psi\| \geq \frac{|\Phi_{\perp}|}{2} \alpha^2 \beta \|\Psi\|.$$

Démonstration. On a, pour $\mathbf{k} \in \Omega$:

$$P_0 h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) P_0 = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-2\pi\mathbf{k}) + \alpha^2 \beta \boldsymbol{\Phi} \cdot \boldsymbol{\sigma}) P_0.$$

Notons $\lambda = \alpha^2 \beta$. Pour $\Psi \in P_0 L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$,

$$\begin{aligned} \|P_0 h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) P_0 \Psi\|^2 &= \|\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{F}(-2\pi\mathbf{k}) + \lambda \boldsymbol{\Phi}) P_0 \Psi\|^2 \\ &\geq \inf_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2} |\mathbf{F}(\mathbf{p}) + \lambda \boldsymbol{\Phi}|^2 \|\Psi\|^2. \end{aligned}$$

La minoration dans le lemme viendrait directement si on pouvait prouver l'énoncé suivant : il existe $\lambda_0 > 0$ tel que

$$\inf_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2} |\mathbf{F}(\mathbf{p}) + \lambda \boldsymbol{\Phi}| \geq \frac{|\Phi_{\perp}|}{2} \lambda,$$

pour $0 \leq \lambda \leq \lambda_0$.

Afin de le prouver, posons M tel que $K'_0 M^d - |\boldsymbol{\Phi}| = \frac{|\Phi_{\perp}|}{2}$ où K'_0 est la constante figurant dans la première inégalité de (I.3.7) à l'hypothèse I.27(ii).

Pour $|\mathbf{p}| \geq M \lambda^{1/d}$ on a d'après la première inégalité de (I.3.7) :

$$|\mathbf{F}(\mathbf{p}) + \lambda \boldsymbol{\Phi}| \geq K'_0 |\mathbf{p}|^d - \lambda |\boldsymbol{\Phi}| \geq (K'_0 M^d - |\boldsymbol{\Phi}|) \lambda \geq \frac{|\Phi_{\perp}|}{2} \lambda. \quad (\text{I.3.31})$$

Pour $|\mathbf{p}| \leq M \lambda^{1/d}$, par l'hypothèse I.27(iii), on a pour un certain $K > 0$ et λ assez petit :

$$\begin{aligned} |\mathbf{F}(\mathbf{p}) + \lambda \boldsymbol{\Phi}| &= \left| |\mathbf{p}|^{d-1} A \mathbf{p} + \lambda \boldsymbol{\Phi}_{\parallel} + \lambda \boldsymbol{\Phi}_{\perp} \right| + O(|\mathbf{p}|^{d+1}) \geq \lambda |\Phi_{\perp}| - K |\mathbf{p}|^{d+1} \\ &\geq \lambda |\Phi_{\perp}| - K M^{d+1} \lambda^{(d+1)/d}. \end{aligned}$$

Fixons λ_0 tel que

$$|\Phi_{\perp}| - K M^{d+1} \lambda_0^{1/d} = \frac{|\Phi_{\perp}|}{2}.$$

Pour $\lambda \leq \lambda_0$, l'égalité ci-dessus implique que

$$|\mathbf{F}(\mathbf{p}) + \lambda \boldsymbol{\Phi}| \geq \frac{\lambda}{2} |\Phi_{\perp}|, \quad (\text{I.3.32})$$

pour tout $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$.

Le rapprochement des inégalités (I.3.31) et (I.3.32) permet de conclure. \square

L'inversibilité de $Q_0(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z)Q_0$ sur $Q_0 L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ nécessite plus de technique. Commençons par une série de majorations. On rappelle que $d' = \min(d, 2)$.

Lemme I.36. Il existe C tel que pour $|\alpha| \leq \frac{1}{2}$ et $\forall \mathbf{k} \in \Omega$ on a

$$\|\sqrt{|\chi_{\alpha}|} P_0\| \leq \alpha; \quad (\text{I.3.33})$$

$$\| |\chi_{\alpha}|^{1/2} (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1} |\chi_{\alpha}|^{1/2} \| \leq C \alpha^{d'}; \quad (\text{I.3.34})$$

$$\| |\chi_{\alpha}|^{1/2} (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1} \| \leq C \sqrt{\alpha^{d'}}, \quad (\text{I.3.35})$$

où $h_{\mathbf{k}}^{(0)}$ est défini dans l'équation (I.3.3).

Démonstration. Comme dans [6], pour montrer (I.3.33) nous calculons pour $\mathbf{f}, \mathbf{g} \in L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$:

$$|\langle \mathbf{f}, \sqrt{|\chi_\alpha|} P_0 \mathbf{g} \rangle| \leq |\langle \mathbf{f}, \sqrt{|\chi_\alpha|} \Psi_0 \rangle| |\langle \Psi_0, \mathbf{g} \rangle| \leq \|\chi_\alpha\|_1^{1/2} \|\mathbf{f}\|_2 \|\mathbf{g}\|_2 \leq \alpha \|\mathbf{f}\|_2 \|\mathbf{g}\|_2.$$

Pour les deux autres inégalités, nous allons introduire la notation suivante : étant donné un opérateur intégral T , on notera $T(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ son noyau intégral. Nous allons utiliser l'égalité suivante venant de la proposition A.1 figurant dans l'appendice :

$$(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \gamma - \mathbf{x}')} (H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x} + \gamma, \mathbf{x}').$$

Dans la suite, nous noterons C toute constante indépendante de α et \mathbf{k} . Supposons d'abord que $d \neq 2$. Soit $\Upsilon, \Psi \in L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ avec Υ à support dans $\Omega_\alpha = [-\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}]^2$. D'après le lemme I.33 et la proposition I.32, on a :

$$\begin{aligned} |\langle \Upsilon, (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1} \Psi \rangle| &\leq \sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^2} \iint_{\Omega_\alpha \times \Omega} |\Upsilon(\mathbf{x})| |(H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x} + \gamma, \mathbf{x}')| |\Psi(\mathbf{x}')| d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \\ &\leq \sum_{\gamma \neq 0} \iint_{\Omega_\alpha \times \Omega} |\Upsilon(\mathbf{x})| \frac{C}{|\mathbf{x} + \gamma - \mathbf{x}'|^3} |\Psi(\mathbf{x}')| d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \\ &\quad + \iint_{\Omega_\alpha \times \Omega} |\Upsilon(\mathbf{x})| \frac{C}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{2-d'}} |\Psi(\mathbf{x}')| d\mathbf{x} d\mathbf{x}'. \end{aligned}$$

Pour majorer le premier terme, nous voyons qu'il existe une constante C telle que pour tous $|\alpha| \leq \frac{1}{2}$, $\mathbf{x} \in \Omega_\alpha$, $\mathbf{x}' \in \Omega$ et $\gamma \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{0\}$, on a

$$\frac{1}{|\mathbf{x} + \gamma - \mathbf{x}'|^3} \leq \frac{C}{|\gamma|^3}.$$

Ainsi, le premier terme est majoré par

$$C \|\Upsilon\|_{L^1} \|\Psi\|_{L^1}.$$

Pour le second terme, il faut majorer

$$\iint_{\Omega_\alpha \times \Omega} |\Upsilon(\mathbf{x})| \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{2-d'}} |\Psi(\mathbf{x}')| d\mathbf{x} d\mathbf{x}'.$$

L'inégalité de Hardy-Littlewood-Sobolev (cf. [46, théorème 4.3]) nous donne qu'il existe C tel que :

$$\iint_{\Omega_\alpha \times \Omega} |\Upsilon(\mathbf{x})| \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{2-d'}} |\Psi(\mathbf{x}')| d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \leq C \|\Upsilon\|_{\frac{4}{2+d'}} \|\Psi\|_{\frac{4}{2+d'}}.$$

Par l'inégalité de Hölder,

$$\begin{aligned} \|\chi_\alpha^{1/2} \mathbf{f}\|_{\frac{4}{2+d'}} &= \left(\int_{\Omega} |\chi_\alpha|^{\frac{2}{2+d'}} |\mathbf{f}|^{\frac{4}{2+d'}} \right)^{\frac{2+d'}{4}} \\ &\leq \left(\|\chi_\alpha\|_{\frac{2}{2+d'}}^{\frac{2}{d'}} \|\mathbf{f}\|_{\frac{4}{2+d'}}^{\frac{4}{2+d'}} \right)^{\frac{2+d'}{4}} \\ &= \|\chi_\alpha\|_{\frac{2}{d'}}^{1/2} \|\mathbf{f}\|_2. \end{aligned}$$

Un simple changement de variable nous donne que $\|\chi_\alpha\|_{\frac{2}{d'}} = \alpha^{d'} \|\chi\|_{\frac{2}{d'}} \leq \alpha^{d'} \|\chi\|_\infty$.

Ainsi, poser $\Upsilon = \Psi = |\chi_\alpha|^{1/2} \mathbf{f}$ dans l'inégalité ci-dessus nous donne

$$\left| \langle \mathbf{f}, |\chi_\alpha|^{1/2} (h_{\mathbf{k}}^{(0)} \pm i)^{-1} |\chi_\alpha|^{1/2} \mathbf{f} \rangle \right| \leq C \|\chi_\alpha \mathbf{f}\|_1^2 + C \alpha^{d'} \|\mathbf{f}\|_2^2.$$

L'inégalité de Cauchy-Schwarz donne alors

$$\|\chi_\alpha \mathbf{f}\|_1 \leq \|\chi_\alpha\|_{L^2} \|\mathbf{f}\|_2 \leq \sqrt{3} \alpha \|\mathbf{f}\|_2.$$

Cela conclut la preuve de l'inégalité (I.3.34).

Celle de l'inégalité (I.3.35) est semblable : il faut prendre $\Upsilon = |\chi_\alpha| \mathbf{f}$ et $\Psi = \mathbf{f}$. Nous ne donnerons donc pas plus de détails.

Si $d = 2$, on peut montrer ces inégalités pour tout $\tilde{d} < 2$ puis prendre la borne supérieure. \square

Lemme I.37. *Pour $\mathbf{f} \in Q_0 \text{Dom}(h_{\mathbf{k}}^{(0)})$, on a $\|h_{\mathbf{k}}^{(0)} Q_0 \mathbf{f}\| \geq \pi^d K'_0 \|\mathbf{f}\|$.*

Démonstration. Nous montrons dans l'appendice la proposition A.2 qui affirme que, pour $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^2$ et $\mathbf{k} \in \Omega$,

$$P_{\mathbf{m}} h_{\mathbf{k}}^{(0)} P_{\mathbf{m}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(2\pi(\mathbf{m} - \mathbf{k})) P_{\mathbf{m}}.$$

De là, d'après l'inégalité (I.3.7) de l'hypothèse I.27(ii), on a pour $\mathbf{f} \in Q_0 \text{Dom}(h_{\mathbf{k}}^{(0)})$:

$$\begin{aligned} \|h_{\mathbf{k}}^{(0)} Q_0 \mathbf{f}\|^2 &= \sum_{\mathbf{m} \neq 0} \|\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(2\pi(\mathbf{m} - \mathbf{k})) P_{\mathbf{m}} \mathbf{f}\|^2 \geq K_0'^2 \sum_{\mathbf{m} \neq 0} (2\pi|\mathbf{m} - \mathbf{k}|)^{2d} \|P_{\mathbf{m}} \mathbf{f}\|^2 \\ &\geq K_0'^2 \pi^{2d} \sum_{\mathbf{m} \neq 0} \|P_{\mathbf{m}} \mathbf{f}\|^2. \end{aligned}$$

\square

Pour un opérateur auto-adjoint T et une projection orthogonale Q , on définit l'ensemble résolvant

$$\rho_Q(T) := \{z \in \mathbb{C} \text{ tels que } Q(T - z)Q : \text{Im}Q \rightarrow \text{Im}Q \text{ est inversible}\}.$$

On pose

$$\begin{aligned} R_0(z) &:= \left(Q_0(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - z) Q_0 \upharpoonright_{\text{Im}Q_0} \right)^{-1}, \quad z \in \rho_{Q_0}(h_{\mathbf{k}}^{(0)}), \\ R(z) &:= \left(Q_0(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z) Q_0 \upharpoonright_{\text{Im}Q_0} \right)^{-1}, \quad z \in \rho_{Q_0}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta)). \end{aligned}$$

Pour $i \in \{1, 2, 3\}$, on définit les opérateurs $U_i : L^2(\Omega, \mathbb{C}^2) \rightarrow \text{Im}Q_0$ et $W_i : \text{Im}Q_0 \rightarrow L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ par :

$$W_i = \sqrt{\beta} (\sqrt{|\chi_{i,\alpha}|} \sigma_i) Q_0 \text{ et } U_i = \sqrt{\beta} Q_0 \text{sgn}(\chi_{i,\alpha}) \sqrt{|\chi_{i,\alpha}|}.$$

Lemme I.38. *Il existe $C > 0$ indépendant de $\alpha \in]0, 1/2]$ et $\beta > 0$ tel que pour tout $|z| \leq K'_0 \pi^d / 2$ et tous j, l*

$$\|W_j R_0(z) U_l\| \leq C \alpha^{d'} \beta.$$

Démonstration. Grâce au lemme I.37, on a, pour $|z| \leq K'_0 \pi^d / 2$,

$$\|R_0(z)\| \leq \frac{2}{K'_0 \pi^d}. \quad (\text{I.3.36})$$

La première identité de la résolvante nous donne que pour $j, l = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} W_j R_0(z) U_l &= W_j R_0(i) U_l + (z - i) W_j R_0(i)^2 U_l \\ &\quad + (z - i)^2 W_j R_0(i) R_0(z) R_0(i) U_l. \end{aligned} \quad (\text{I.3.37})$$

Nous estimerons l'un après l'autre chacun des termes du second membre de (I.3.37).

Puisque $h_{\mathbf{k}}^{(0)}$ commute avec les projections P_m on a

$$R_0(i) = (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1} - (P_0(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)P_0 \upharpoonright_{\text{Im}P_0})^{-1}. \quad (\text{I.3.38})$$

Notons que, vu la définition de U_l et W_j , on a que pour tout z tel que $|z| \leq K'_0 \pi^d / 2$

$$W_j (P_0(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - z)P_0 \upharpoonright_{\text{Im}P_0})^{-1} U_l = 0. \quad (\text{I.3.39})$$

L'identité (I.3.38) avec les inégalités (I.3.34) et (I.3.39) impliquent qu'il existe $c > 0$ tel que pour $|\alpha| < 1/2$ et tout $\mathbf{k} \in \Omega$

$$\begin{aligned} \|W_j R_0(i) U_l\| &= \|W_j (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1} U_l\| \\ &\leq c \beta \alpha^{d'}. \end{aligned} \quad (\text{I.3.40})$$

Cela borne le premier terme du second membre de (I.3.37).

Pour estimer le deuxième, commençons par remarquer que

$$(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-2} = (Q_0(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)Q_0 \upharpoonright_{\text{Im}Q_0})^{-2} + (P_0(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)P_0 \upharpoonright_{\text{Im}P_0})^{-2}.$$

il est facile de voir que l'équation (I.3.39) reste vraie avec une puissance -2. Ainsi,

$$\begin{aligned} \|(z - i)W_j R_0(i)^2 U_l\| &= \|(z - i)W_j (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-2} U_l\| \\ &\leq \sqrt{1 + \frac{K_0'^2 \pi^{2d}}{4} \beta} \|\sqrt{|\chi_\alpha|} (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1}\| \|(h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1} \sqrt{|\chi_\alpha|}\| \\ &\leq C \beta \alpha^{d'}, \end{aligned} \quad (\text{I.3.41})$$

pour un certain $C > 0$ indépendant de α et β , où on a utilisé (I.3.35) dans la dernière inégalité.

Enfin, majorons le dernier terme du second membre de (I.3.37). On remarque que, d'après les inégalités (I.3.33) et (I.3.35), il existe $c, C > 0$ tels que pour tout $\alpha \leq 1/2$

$$\begin{aligned} \|\sqrt{|\chi_\alpha|} R_0(i)\| &\leq \|\sqrt{|\chi_\alpha|} (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1}\| + \|\sqrt{|\chi_\alpha|} P_0 (P_0(h_{\mathbf{k}} - i)P_0)^{-1}\| \\ &\leq c \sqrt{\alpha^{d'}} + c \alpha \leq C \sqrt{\alpha^{d'}}. \end{aligned}$$

De là, grâce à (I.3.36) et (I.3.35),

$$\begin{aligned} \|(z - i)^2 W_j R_0(i) R_0(z) R_0(i) U_l\| &\leq \beta |z - i|^2 \|\sqrt{|\chi_\alpha|} R_0(i)\| \|R_0(z)\| \|R_0(i) \sqrt{|\chi_\alpha|}\| \\ &\leq C \beta |z - i|^2 \alpha^{d'}. \end{aligned}$$

La somme de cette dernière inégalité, de (I.3.40) et de (I.3.41) (au vu de (I.3.37)) permet de conclure. \square

Lemme I.39. *Soit*

$$\mathcal{S} = \{z \in \rho_{Q_0}(h_{\mathbf{k}}^{(0)}) : \sup_{j,l} \|W_j R_0(z) U_l\| < 1/3\}.$$

Alors, pour tout $z \in \mathcal{S}$, on a $z \in \rho_{Q_0}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta))$.

Démonstration. Soit $z \in \mathcal{S} \cap \mathbb{R}$. Posons $z_\epsilon = z + i\epsilon$. L'ensemble \mathcal{S} étant ouvert, pour $\epsilon > 0$ assez petit $z_\epsilon \in \mathcal{S}$. Notons $\mathbf{U} = (U_1, U_2, U_3)$ et $\mathbf{W} = (W_1, W_2, W_3)$. La deuxième identité de la résolvante appliquée plusieurs fois nous donne que pour tout $N > 0$:

$$R(z_\epsilon) = R_0(z_\epsilon) \left(\sum_{n=0}^N (-1)^n (\mathbf{U}\mathbf{W}^T R_0(z_\epsilon))^n + T_{N+1} \right)$$

avec

$$T_{N+1} = (-1)^{N+1} (\mathbf{U}\mathbf{W}^T R_0(z_\epsilon))^N \mathbf{U}\mathbf{W}^T R(z_\epsilon).$$

Or on a

$$(\mathbf{U}\mathbf{W}^T R_0(z_\epsilon))^N = \sum_{i_1, \dots, i_N} U_{i_1} W_{i_1} R_0(z_\epsilon) U_{i_2} \dots W_{i_{N-1}} R_0(z_\epsilon) U_{i_N} W_{i_N} R_0(z_\epsilon)$$

donc

$$\left\| (\mathbf{U}\mathbf{W}^T R_0(z_\epsilon))^N \right\| \leq C 3^N \left(\sup_{j,l} \|W_j R_0(z_\epsilon) U_l\| \right)^{N-1}$$

qui tend vers 0 quand $N \rightarrow \infty$ car $z_\epsilon \in \mathcal{S}$.

Ainsi, à ϵ fixé, on a

$$R(z_\epsilon) = R_0(z_\epsilon) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (\mathbf{U}\mathbf{W}^T R_0(z_\epsilon))^n. \quad (\text{I.3.42})$$

Grâce à la définition de \mathcal{S} et à l'équation (I.3.36), on trouve que cette résolvante est bornée uniformément en ϵ . On peut donc passer à la limite quand $\epsilon \rightarrow 0$ et ainsi

$$\forall z \in \mathcal{S}; z \in \rho_{Q_0}(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta)).$$

□

Nous pouvons maintenant nous intéresser à l'inversibilité de l'opérateur de Feshbach $\mathcal{F}_{P_0}(z)$ pour $\alpha^{d'}\beta$ assez petit. À cet effet, nous allons utiliser les deux lemmes suivants (équivalents aux lemmes 2.2 et 2.3 de [6]) :

Lemme I.40. *Il existe une constante $\delta \in]0, 1[$ telle que, pour tous $\alpha \in]0, 1/2[$ et $\beta > 0$ vérifiant $\alpha^{d'}\beta < \delta$, $Q_0(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z)Q_0$ est inversible sur l'image de Q_0 pour tous $z \in [-K'_0\pi^d/2, K'_0\pi^d/2]$ et $\mathbf{k} \in \Omega$.*

Démonstration. La preuve de ce lemme vient directement du lemme I.39 car $z \in \mathcal{S}$ lorsque $\alpha^{d'}\beta$ est assez petit, d'après le lemme I.38. □

Posons

$$\mathcal{B}_{P_0}(z) = \beta^2 P_0 \chi_\alpha \cdot \sigma Q_0 (Q_0(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z) Q_0)^{-1} Q_0 \chi_\alpha \cdot \sigma P_0.$$

Lemme I.41. *Il existe deux constantes $\delta \in]0, 1[$ et $C > 0$ telles que, pour tous $\alpha \in]0, 1/2[$ et $\beta > 0$ vérifiant $\alpha^{d'}\beta < \delta$, on a*

$$\|\mathcal{B}_{P_0}(z)\boldsymbol{\psi}\| \leq C\beta^2\alpha^{2+d'}\|\boldsymbol{\psi}\|$$

pour tous $z \in [-K'_0\pi^d/2, K'_0\pi^d/2]$, $k \in \Omega$ et $\boldsymbol{\psi} \in L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$.

Démonstration. D'après l'équation (I.3.42), on a

$$\begin{aligned} R(z) &= R_0(z) + R_0(z) \sum_{n \geq 1} (-1)^n (\mathbf{U}\mathbf{W}^T R_0(z))^n \\ &= R_0(z) - R_0(z) \sum_{n \geq 0} (-1)^n \mathbf{U} (\mathbf{W}^T R_0(z) \mathbf{U})^n \mathbf{W}^T R_0(z) \\ &= R_0(z) - R_0(z) \mathbf{U} (I_3 + \mathbf{W}^T R_0(z) \mathbf{U})^{-1} \mathbf{W}^T R_0(z). \end{aligned}$$

Notons que $\mathbf{W}^T R_0(z) \mathbf{U}$ est un opérateur agissant sur $(L^2(\Omega, \mathbb{C}^2))^3$.

La définition de \mathcal{B}_{P_0} et ces inégalités nous donnent 2 termes à estimer. D'une part,

$$\begin{aligned} \beta^2 \|P_0 \boldsymbol{\chi}_\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma} R_0(z) \boldsymbol{\chi}_\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma} P_0\| &\leq \beta \|P_0 |\boldsymbol{\chi}_\alpha|^{1/2}\| \sum_{i,j} \|W_i R_0(z) U_j\| \| |\boldsymbol{\chi}_\alpha|^{1/2} P_0 \| \\ &\leq c\beta^2 \alpha^{2+d'}, \end{aligned}$$

où on a utilisé le lemme I.38 et (I.3.33).

D'autre part, en supposant que $\alpha^{d'}\beta$ est assez petit pour que $\|\mathbf{W}^T R_0(z) \mathbf{U}\| < 1/2$, on a

$$\begin{aligned} &\beta^2 \|P_0 \boldsymbol{\chi}_\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma} R_0(z) \mathbf{U} (I_3 + \mathbf{W}^T R_0(z) \mathbf{U})^{-1} \mathbf{W}^T R_0(z) \boldsymbol{\chi}_\alpha \cdot \boldsymbol{\sigma} P_0\| \\ &\leq \beta \|P_0 |\boldsymbol{\chi}_\alpha|^{1/2}\| \sum_{i,j} \|W_i R_0(z) U_j\| \|(I_3 + \mathbf{W}^T R_0(z) \mathbf{U})^{-1}\| \\ &\quad \times \sum_{i,j} \|W_i R_0(z) U_j\| \| |\boldsymbol{\chi}_\alpha|^{1/2} P_0 \| \leq c\beta^3 \alpha^{2+2d'}. \end{aligned}$$

Cette dernière inégalité ainsi que (I.3.3) permettent de conclure la preuve. \square

Preuve du théorème I.30. Au vu de (I.3.29), il suffit de montrer l'inversibilité de l'opérateur de Feshbach uniformément en $\mathbf{k} \in \Omega$. D'après les lemmes I.35 et I.41, on a que pour tout $\boldsymbol{\psi} \in P_0 L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$

$$\begin{aligned} \|\mathcal{F}_{P_0}(z)\boldsymbol{\psi}\| &\geq \|(P_0(h_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta) - z)P_0)\boldsymbol{\psi}\| - \|\mathcal{B}_{P_0}(z)\boldsymbol{\psi}\| \\ &\geq (\beta\alpha^2 \frac{|\Phi|}{2} - |z| - c\alpha^{2+d'}\beta^2) \|\boldsymbol{\psi}\|. \end{aligned}$$

On peut alors conclure en prenant $\alpha^{d'}\beta$ assez petit pour que $\frac{|\Phi|}{2} > c\alpha^{d'}\beta$. Le théorème est alors prouvé avec $C = \frac{c}{2}$. \square

Chapitre II

Milieux désordonnés

II.1 Localisation d'Anderson

II.1.1 Opérateurs aléatoires

Dans la première partie, nous avons étudié des cristaux idéaux, c'est-à-dire des systèmes rigoureusement périodiques. Néanmoins, les systèmes que l'on rencontre dans la nature ne sont pas exactement périodiques. Différents types de désordre peuvent apparaître : les atomes peuvent ne pas être précisément sur le point du réseau, le matériau peut être en fait un mélange de différents types d'atomes... Il est facile de voir que, lorsque le système n'est plus périodique, les théories utilisées dans la partie 1 (transformations de Fourier et de Bloch-Floquet) ne sont plus utilisables. Nous conserverons les principales hypothèses, à savoir que le solide remplit tout l'espace, que les noyaux sont fixes et que les interactions entre électrons sont négligeables. Le hamiltonien aura donc une forme ressemblant à celle de (I.1.2) :

$$H_\omega = -\Delta + V_\omega \text{ sur } L^2(\mathbb{R}^d) \quad (\text{II.1.1})$$

où V_ω dépend maintenant d'une variable aléatoire ω . On peut également considérer un modèle des liaisons étroites, pour lequel le hamiltonien s'écrira

$$H_\omega = -\Delta + V_\omega \text{ sur } \ell^2(\Gamma) \quad (\text{II.1.2})$$

où $-\Delta$ désigne ici le laplacien discret donné par la matrice d'adjacence du graphe. Enfin, et cela fera l'objet d'une section dédiée, nous pouvons aussi introduire de l'aléatoire dans un modèle utilisant l'opérateur de Dirac. Le hamiltonien est alors de la forme

$$H_\omega = D_0 + V_\omega \text{ sur } L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2). \quad (\text{II.1.3})$$

Il est donc nécessaire pour traiter ce genre de problèmes de disposer d'une théorie des opérateurs aléatoires. Nous allons en donner les principaux résultats, présentés par exemple dans [36].

Définition II.1. Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace de probabilité et \mathcal{H} un espace de Hilbert séparable.

Une famille $(A_\omega)_{\omega \in \Omega}$ d'opérateurs bornés est dite *faiblement mesurable* si chacune des fonctions $\omega \mapsto \langle \phi, A_\omega \psi \rangle$, pour $\phi, \psi \in \mathcal{H}$, est mesurable.

Une famille $(B_\omega)_{\omega \in \Omega}$ d'opérateurs non bornés est dite *mesurable* si pour toute fonction borélienne bornée $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ la famille $(f(A_\omega))$ est faiblement mesurable.

On appelle *opérateur aléatoire* sur $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ une famille mesurable d'opérateurs non bornés.

La propriété centrale de la théorie des opérateurs aléatoires est l'ergodicité. Grossièrement, cela consiste à dire que toutes les parties du système sont équivalentes.

Définition II.2. Soit $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé, I un ensemble et $(T_i)_{i \in I}$ une famille de fonctions de Ω dans lui-même préservant la mesure, c'est-à-dire telle que pour tout $A \in \mathcal{F}$ on ait $\mathbb{P}(T_i^{-1}A) = \mathbb{P}(A)$. Un ensemble $A \in \mathcal{F}$ est dit invariant par cette famille si $T_i^{-1}A = A$ pour tout $i \in I$. La famille (T_i) est dite *I-ergodique* si tout ensemble invariant a pour probabilité 0 ou 1.

Un opérateur aléatoire H_ω sur un espace \mathcal{H} est dit *ergodique* s'il existe une famille (U_i) d'opérateurs unitaires sur \mathcal{H} et une famille (τ_i) ergodique sur Ω telles que pour tout $i \in I$

$$H_{\tau_i \omega} = U_i H_\omega U_i^*. \quad (\text{II.1.4})$$

Le principal intérêt de l'ergodicité est que le spectre est alors déterministe, comme l'indique le théorème suivant dû à Pastur.

Théorème II.3 ([53], corollaire 1). *Soit H_ω un opérateur aléatoire ergodique auto-adjoint sur un espace de Hilbert séparable \mathcal{H} . Il existe un ensemble $\Sigma \subset \mathbb{R}$ tel que*

$$\mathbb{P}(\sigma(H_\omega) = \Sigma) = 1.$$

Mieux encore, la décomposition en composantes du spectre est elle aussi presque sûrement constante, comme l'indique le théorème suivant dû à Kunz et Souillard d'une part et à Kirsch et Martinelli d'autre part.

Théorème II.4 ([43], théorème IV.2, [37], théorème 1). *Soit H_ω un opérateur aléatoire ergodique auto-adjoint. Il existe des ensembles Σ_{pp} , Σ_{ac} et $\Sigma_{sc} \subset \mathbb{R}$ tels que*

$$\sigma_{ac}(H_\omega) = \Sigma_{ac} \text{ presque sûrement ;}$$

$$\sigma_{pp}(H_\omega) = \Sigma_{pp} \text{ presque sûrement ;}$$

$$\sigma_{sc}(H_\omega) = \Sigma_{sc} \text{ presque sûrement.}$$

Nous verrons que contrairement au cas périodique, le spectre n'est pas purement absolument continu. En revanche, on peut montrer que sous certaines conditions le spectre discret est vide. Il faut pour cela que la famille (U_i) soit « assez grande ». Ce résultat est présenté dans [35].

On appelle *ensemble total* une partie de \mathcal{H} dont l'orthogonal est nul. Pour $\phi \in \mathcal{H}$, on note $A_\phi = \{U_i^* \phi, i \in I\}$. Une famille d'opérateurs unitaires est dite *complète* s'il existe un ensemble total de $\phi \in \mathcal{H}$ tel que A_ϕ contienne une famille infinie de vecteurs deux à deux orthogonaux.

Le résultat est le suivant.

Théorème II.5 ([35], chapitre 4, théorème 3). *Soit H_ω un opérateur ergodique tel que la famille d'unitaires associée (U_i) est complète. Alors $\sigma_{dis}(H_\omega) = \emptyset$ \mathbb{P} -presque sûrement.*

Si le spectre purement ponctuel, c'est-à-dire l'adhérence de l'ensemble des valeurs propres, est le même pour presque tous les ω , les valeurs propres (de multiplicité finie) ne sont en revanche presque jamais les mêmes.

Proposition II.6 ([35], chapitre 4, corollaire 1). *Tout $\lambda \in \mathbb{R}$ n'est pas, avec probabilité 1, valeur propre de multiplicité finie de H_ω .*

Nous pouvons avoir plus d'informations sur le spectre d'un opérateur ergodique avec des hypothèses supplémentaires. Nous introduisons donc la notion d'opérateur ergodique au sens de Kirsch, d'après [35], qu'il ne faudra pas confondre avec celle d'opérateur standard au sens de Klein (définition II.14).

Définition II.7. On dit qu'une famille ergodique $(H_\omega)_{\omega \in \Omega}$ est standard au sens de Kirsch si :

1. Ω est un espace polonais et la tribu associée contient les boréliens de Ω .
2. Il existe un ensemble Ω_0 de probabilité 1 tel que H_ω est auto-adjoint pour tout $\omega \in \Omega_0$ et la fonction $\omega \mapsto H_\omega$ restreinte à Ω_0 est continue au sens que si $\omega_j \rightarrow \omega$ alors $H_{\omega_j} \rightarrow H_\omega$ avec une convergence forte en résolvante.

On a alors le résultat suivant.

Théorème II.8 ([35], chapitre 6, théorème 1). *Si H_ω est une famille ergodique standard (au sens de Kirsch) pour l'ensemble Ω_0 , alors*

$$\sigma(H_\omega) \subset \Sigma$$

pour tout $\omega \in \text{supp}(\mathbb{P}) \cap \Omega_0$.

La décomposition en composantes du spectre peut sembler à première vue très artificielle ; elle est en réalité fortement liée au comportement du système physique décrit par le hamiltonien. Les résultats sur ce sujet sont connus sous le nom de « théorème RAGE », d'après les initiales de Ruelle, Amrein, Georgescu et Enss qui ont, par leurs travaux successifs, prouvé ces résultats.

Théorème II.9 ([61], théorème 5.8). *Soit A un opérateur auto-adjoint sur un espace de Hilbert séparable \mathcal{H} et K_n une suite d'opérateurs relativement compacts qui converge vers l'identité. On a alors :*

$$\mathcal{H}_{pp} = \{\psi \in \mathcal{H}, \limsup_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|(1 - K_n)e^{-itA}\psi\| = 0\}, \quad (\text{II.1.5})$$

$$\mathcal{H}_c = \{\psi \in \mathcal{H}, \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|K_n e^{-itA}\psi\| dt = 0\}. \quad (\text{II.1.6})$$

Ce résultat a une interprétation très claire si l'on prend pour K_n l'opérateur de multiplication par la fonction indicatrice de la boule centrée sur l'origine et de rayon n . La première égalité dit alors que, si une particule est à l'instant initial dans un état de \mathcal{H}_{pp} , étant donné une erreur ϵ , il existe une boule de taille R telle que la particule restera dans cette boule pour des temps arbitrairement grands avec probabilité supérieure à $1 - \epsilon$. Les éléments de \mathcal{H}_{pp} sont donc appelés *états liés*.

La deuxième inégalité signifie que, si une particule est à l'instant initial dans un état de \mathcal{H}_c , étant donné une erreur ϵ , il existe une boule telle que, pour un temps T assez grand, la probabilité de présence moyenne de la particule dans la boule entre 0 et T est inférieure à ϵ . De tels états sont donc appelés *états de diffusion*.

II.1.2 Le phénomène de localisation

Le phénomène le plus remarquable de la théorie des opérateurs aléatoires est la *localisation d'Anderson*. Celle-ci a été mise en avant pour la première fois par Anderson en 1958 [3]. Elle consiste en l'absence de diffusion des ondes dans un milieu désordonné. En quelque sorte, le matériau désordonné devient isolant là où il devrait être conducteur, c'est-à-dire dans les bandes permises.

Mathématiquement, la localisation peut être définie des plusieurs façons. Les principales sont les suivantes.

Définition II.10. Soit H_ω un opérateur aléatoire ergodique et I un intervalle ouvert.

1. On dit que H_ω présente de la localisation spectrale dans I si son spectre dans I est purement ponctuel, c'est-à-dire que $\Sigma \cap I = \Sigma_{pp} \cap I \neq \emptyset$ et $\Sigma_{ac} \cap I = \Sigma_{sc} \cap I = \emptyset$.
2. On dit que H_ω présente de la localisation dynamique dans I si $\Sigma \cap I \neq \emptyset$ et, pour \mathbb{P} -presque tout ω , tout intervalle compact $J \subset I$ et tout $\psi \in \mathcal{H}$ à support compact, on a

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} \left\| \langle \mathbf{x} \rangle^{\frac{\alpha}{2}} E_\omega(J) e^{-itH_\omega} \psi \right\| < \infty \text{ pour tout } n \in \mathbb{N}. \quad (\text{II.1.7})$$

On voit que, d'après le théorème RAGE, la localisation dynamique implique la localisation spectrale. En revanche, la réciproque est fautive. Un contre-exemple est présenté dans [15]. Les auteurs considèrent l'opérateur défini sur $\ell^2(\mathbb{Z})$ par

$$H_\theta u(n) = u(n+1) + u(n-1) + V_\theta(n)u(n)$$

où

$$V_\theta(n) = 3 \cos(2\pi\alpha n + \theta) + \lambda \delta_{n0},$$

α étant un nombre irrationnel et $\lambda > 0$. Ils montrent que, d'une part, le spectre de H_θ est purement ponctuel pour presque tout $\theta \in \mathbb{R}$ et que, d'autre part, en notant $\langle x^2 \rangle(t) = \langle e^{-itH_\theta} \delta_0, x^2 e^{-itH_\theta} \delta_0 \rangle$, on a pour tout $\delta > 0$ que $\frac{\langle x^2 \rangle}{t^{2-\delta}}$ n'est pas borné quand t tend vers $\pm\infty$. Il n'y a donc pas de localisation dynamique. Cela provient du fait que les largeurs caractéristiques des vecteurs propres ne sont pas bornées.

II.2 Preuve de la localisation : l'analyse multi-échelles

Une des deux principales méthodes pour prouver des résultats de localisation s'appelle l'analyse multi-échelles. Elle trouve son origine dans les travaux de Fröhlich et Spencer [23] puis de Fröhlich, Martinelli, Scoppola et Spencer [24] pour des modèles sur \mathbb{Z}^d . Elle a été ensuite étendue aux modèles continus par Combes et Hislop [14] pour montrer la localisation spectrale. Une version améliorée permettant d'obtenir la localisation dynamique a été développée par Germinet et De Bièvre [26].

La version la plus aboutie, qui est celle que nous utilisons, est l'œuvre de Germinet et Klein [27]. Nous en donnons ici les éléments essentiels. Elle est présentée de façon synthétique dans le livre [40].

L'autre méthode, dont l'idée première revient à Aizenman et Molchanov dans [1], s'appelle la méthode des moments fractionnaires. Elle ne sera pas développée ici ; on pourra en trouver une présentation détaillée dans le livre d'Aizenman et Warzel [2].

II.2.1 Fonctions propres généralisées

L'idée pour montrer la localisation (spectrale mais aussi dynamique) est assez simple : il s'agit de prendre un élément du spectre et de montrer qu'il s'agit presque sûrement d'une valeur propre. Pour cela, il faut introduire la notion de fonction propre généralisée. Nous suivrons l'approche proposée par [40] qui reprend les travaux de Klein, Koines et Seifert dans [42].

On pose $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$. On introduit également des espaces à poids, pour $\nu > d/4$:

$$\mathcal{H}_{\pm} = L^2(\mathbb{R}^d, \langle \mathbf{x} \rangle^{\pm 4\nu} dx; \mathbb{C}^n).$$

Les fonctions de \mathcal{H}_- ont une croissance au plus polynomiale. On définit la dualité entre \mathcal{H}_+ et \mathcal{H}_- par

$$\langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{\mathcal{H}_+, \mathcal{H}_-} = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\phi_1(\mathbf{x})} \cdot \phi_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

lorsque $\phi_1 \in \mathcal{H}_+$ et $\phi_2 \in \mathcal{H}_-$. Notons T l'opérateur auto-adjoint défini sur \mathcal{H} par la multiplication par $\langle \mathbf{x} \rangle^{2\nu}$. Il est à noter que T^{-1} est borné.

Nous fixerons à partir de maintenant un $\nu > d/4$. Grossièrement, une fonction propre généralisée est une fonction propre qui n'est pas dans L^2 . L'existence des fonctions propres généralisées est garantie dès qu'est vérifiée la propriété suivante.

Propriété II.11 (GEE). *On dit qu'un opérateur ergodique H_{ω} possède la propriété des fonctions propres généralisées sur une intervalle I si*

1. *L'ensemble*

$$\text{Dom}_{+}^{\omega} = \{\phi \in \text{Dom}(H_{\omega}) \cap \mathcal{H}_+, H_{\omega}\phi \in \mathcal{H}_+\}$$

est dense dans \mathcal{H}_+ et un cœur pour H_{ω} avec probabilité 1.

2. *Il existe une fonction continue bornée f sur \mathbb{R} , strictement positive sur le spectre de H_{ω} , telle que*

$$\text{tr}_{\mathcal{H}} \left(T^{-1} f(H_{\omega}) E_{\omega}(I \cap J) T^{-1} \right) < \infty$$

avec probabilité 1.

Définition II.12. Une fonction mesurable $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}^n$ est une *fonction propre généralisée* de H_{ω} , associée à la *valeur propre généralisée* λ , si $\psi \in \mathcal{H}_- \setminus \{0\}$ et

$$\langle H_{\omega}\phi, \psi \rangle_{\mathcal{H}_+, \mathcal{H}_-} = \lambda \langle \phi, \psi \rangle_{\mathcal{H}_+, \mathcal{H}_-}, \quad \text{pour tout } \phi \in \text{Dom}_{+}^{\omega}.$$

Le premier point de (GEE) implique qu'une fonction propre généralisée qui est dans \mathcal{H} est une fonction propre *stricto sensu*. Le second point implique que la fonction qui à un borélien J associe

$$\mu_{\omega}(J) = \text{tr}_{\mathcal{H}} \left(T^{-1} f(H_{\omega}) E_{\omega}(I) T^{-1} \right)$$

est une mesure spectrale pour la restriction de H_{ω} à l'espace $E_{\omega}(I)\mathcal{H}$. On peut alors montrer que μ_{ω} -presque tout λ est une valeur propre généralisée. La preuve s'appuie sur le théorème de Radon-Nikodym et figure dans la section 3 de [42].

Nous aurons besoin d'une propriété uniforme pour pouvoir montrer des résultats en moyenne quadratique.

Propriété II.13 (SGEE). *On a (GEE) et*

$$\mathbb{E} \left\{ [\text{tr}(T^{-1} f(H_{\omega}) E_{\omega}(I) T^{-1})]^2 \right\} < \infty.$$

II.2.2 Opérateurs en volume fini

Il serait difficile, pour tenter de montrer la localisation, de regarder directement l'opérateur H_ω défini sur tout l'espace. En effet, son spectre est formé de bandes (que l'on espère densément remplies de valeurs propres) et son spectre discret est vide. Pour remédier à cela, on va définir des opérateurs tronqués qui posséderont un spectre discret. L'enjeu de l'analyse multi-échelles sera d'obtenir des informations sur l'opérateur agissant sur tout l'espace à partir de celles qu'on possède sur l'opérateur en volume fini. En l'occurrence, les volumes finis que nous considérons sont des (hyper)cubes appelés *boîtes*.

Dans toute la suite, nous utiliserons sur \mathbb{R}^d la norme *sup* : $|\mathbf{x}| = \max\{|x_i| : i = 1, \dots, d\}$. Par $\Lambda_L(\mathbf{x})$, nous noterons la boîte ouverte de taille $L > 0$ centrée en $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$:

$$\Lambda_L(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d; |\mathbf{y} - \mathbf{x}| < \frac{L}{2}\},$$

et par $\bar{\Lambda}_L(\mathbf{x})$ la boîte fermée. Pour pouvoir assembler les boîtes entre elles, on supposera en général que $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ et $L \in 2\mathbb{N}$. Dans ce cas, nous définissons la couronne périphérique par

$$\Upsilon_L(\mathbf{x}) = \bar{\Lambda}_{L-1}(\mathbf{x}) \setminus \Lambda_{L-3}(\mathbf{x}).$$

Nous noterons $\Lambda_l \sqsubset \Lambda_L(\mathbf{x})$ lorsqu'une petite boîte Λ_l est complètement entourée par la couronne $\Upsilon_L(\mathbf{x})$ d'une plus grande boîte $\Lambda_L(\mathbf{x})$. Plus précisément, cela signifie que si $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ et $L > l + 3$ on a $\Lambda_l \subset \Lambda_{L-3}(\mathbf{x})$.

Comme annoncé, nous allons chercher à définir des opérateurs pour lesquels « le désordre est uniquement dans une boîte $\Lambda_L(\mathbf{x})$ ». La façon traditionnelle de définir les opérateurs en volume fini est de restreindre le hamiltonien sur l'espace entier à la boîte, en mettant en général des conditions au bord périodiques. Dans notre étude de l'opérateur de Dirac dans la section suivante, nous suivrons la méthode déjà utilisée dans [14, 4] qui consiste à prendre un opérateur agissant sur tout l'espace en restreignant simplement le potentiel aléatoire à la boîte. La condition la plus générale, due à Klein, est la suivante.

Définition II.14 ([40], définition 4.3). On dit qu'un opérateur ergodique H_ω est standard au sens de Klein si pour tous $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$, $L \in \mathbb{N}$ il existe une fonction mesurable $H_{\cdot, \mathbf{x}, L}$ de Ω vers l'espace des opérateurs auto-adjoints sur $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ telle que

$$U(\mathbf{y})H_{\omega, \mathbf{x}, L}U(-\mathbf{y}) = H_{\tau_{\mathbf{y}}\omega, \mathbf{x}+\mathbf{y}, L}$$

où τ et U sont les opérateurs définis dans (II.1.4).

Les opérateurs en volume fini doivent vérifier plusieurs propriétés pour qu'on puisse utiliser l'analyse multi-échelles.

Définition II.15. Un événement est dit *basé dans une boîte* $\Lambda_L(\mathbf{x})$ s'il est déterminé par des conditions sur les opérateurs de volume fini $(H_{\omega, \mathbf{x}, L})_{\omega \in \Omega}$.

On note alors $R_{\omega, \mathbf{x}, L}(z) = (H_{\omega, \mathbf{x}, L} - z)^{-1}$ la résolvante de $H_{\omega, \mathbf{x}, L}$ et $E_{\omega, \mathbf{x}, L}(\cdot)$ la famille de projecteurs spectraux associée.

La première propriété est une propriété d'indépendance des événements distants.

Propriété II.16 (IAD). *Des événements basés dans des boîtes disjointes sont indépendants.*

Les propriétés suivantes sont à vérifier sur un intervalle fixé I . Introduisons ici quelques notations relatives aux boîtes. Pour $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ et $L > 0$, on note $\chi_{\mathbf{x},L}$ la fonction indicatrice de $\Lambda_L(\mathbf{x})$ et $\chi_{\mathbf{x}} := \chi_{\mathbf{x},1}$. Quand $L \in 2\mathbb{N}$, on notera $\Gamma_{\mathbf{x},L}$ la fonction indicatrice de $\Upsilon_L(\mathbf{x})$.

La première propriété à vérifier, appelée inégalité de Simon-Lieb, permet de relier les résolvantes des opérateurs à différentes échelles.

Propriété II.17 (SLI). *Pour tout intervalle compact $J \subset I$ il existe une constante finie γ_J telle que, étant donné $L, l', l'' \in 2\mathbb{N}$, $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{y}' \in \mathbb{Z}^d$ tels que $\Lambda_{l''}(\mathbf{y}) \sqsubset \Lambda_{l'}(\mathbf{y}') \sqsubset \Lambda_L(\mathbf{x})$, pour \mathbb{P} -presque tout ω , si $E \in J$ et $E \notin \sigma(H_{\omega,\mathbf{x},L}) \cup \sigma(H_{\omega,\mathbf{y}',l'})$ on a*

$$\|\Gamma_{\mathbf{x},L}R_{\omega,\mathbf{x},L}(E)\chi_{\mathbf{y},l''}\| \leq \gamma_J \|\Gamma_{\mathbf{y}',l'}R_{\omega,\mathbf{y}',l'}(E)\chi_{\mathbf{y},l''}\| \|\Gamma_{\mathbf{x},L}R_{\omega,\mathbf{x},L}(E)\Gamma_{\mathbf{y}',l'}\|. \quad (\text{II.2.1})$$

La deuxième propriété à vérifier permet d'obtenir une décroissance des fonctions propres généralisées à partir des résolvantes des opérateurs en volume fini.

Propriété II.18 (EDI). *Pour tout intervalle compact $J \subset I$ il existe une constante finie $\tilde{\gamma}_J$ telle que pour \mathbb{P} -presque tout ω , étant donné une fonction propre généralisée ψ de H_ω associée à une valeur propre généralisée $E \in J$, on a, pour tous $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ et $L \in 2\mathbb{N}$ avec $E \notin \sigma(H_{\omega,\mathbf{x},L})$:*

$$\|\chi_{\mathbf{x}}\psi\| \leq \tilde{\gamma}_J \|\Gamma_{\mathbf{x},L}R_{\omega,\mathbf{x},L}(E)\chi_{\mathbf{x}}\| \|\Gamma_{\mathbf{x},L}\psi\|.$$

La troisième propriété est une majoration du nombre moyen de valeurs propres d'un opérateur en volume fini dans un intervalle donné.

Propriété II.19 (NE). *Pour tout intervalle compact $J \subset I$, il existe une constante finie C_J telle que, pour tous $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ et $L \in 2\mathbb{N}$,*

$$\mathbb{E}(\text{tr}(E_{\omega,\mathbf{x},L}(J))) \leq C_J L^d.$$

La quatrième propriété est appelée *inégalité de Wegner*. Elle affirme qu'on peut majorer la probabilité qu'un opérateur en volume fini ait une valeur propre dans un intervalle donné par une puissance du volume et la longueur de l'intervalle.

Propriété II.20 (W). *Pour un certain $b \geq 1$, il existe pour tout sous-intervalle J de I une constante Q_J telle que*

$$\mathbb{P}\{\text{dist}(\sigma(H_{\omega,\mathbf{x},L}), E) < \eta\} \leq Q_J \eta L^{bd}, \quad (\text{II.2.2})$$

pour tous $E \in J$, $0 < \eta \leq 1$, $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ and $L \in 2\mathbb{N}$.

La dernière condition à vérifier est la décroissance de la résolvante d'un opérateur en volume fini qui nous permettra d'initialiser l'analyse multi-échelles. Contrairement aux précédentes, cette propriété dépend de 3 paramètres, $\theta > bd$, $L_0 \in 6\mathbb{N}$ et $E_0 \in \mathbb{R} \cap \rho(H_{\omega,\mathbf{0},L_0})$ pour au moins certaines valeurs de ω .

Propriété II.21 (H1(θ, E_0, L_0)).

$$\mathbb{P}\left\{\|\Gamma_{\mathbf{0},L_0}R_{\omega,\mathbf{0},L_0}(E_0)\chi_{\mathbf{0},L_0/3}\| \leq \frac{1}{L_0^\theta}\right\} > 1 - \frac{1}{841^d}.$$

II.2.3 L'analyse multi-échelles

Nous pouvons maintenant expliquer comment prouver la localisation lorsque les propriétés ci-dessus sont vérifiées.

Commençons par donner deux nouvelles façons, plus techniques de définir la localisation. H_ω sera toujours un opérateur aléatoire ergodique.

- Définition II.22.** 1. On dit que H_ω présente de la localisation exponentielle (EL) sur I si elle y présente de la localisation spectrale et que les fonctions propres généralisées sont exponentiellement décroissantes, au sens où, pour toute fonction propre généralisée ψ , il existe C et $m > 0$ tels que, pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, $\|\mathbf{x}\psi\| \leq C e^{-m|\mathbf{x}|}$.
2. On dit que H_ω présente de la décroissance sous-exponentielle forte du noyau en norme Hilbert-Schmidt (SSEHSKD) sur I si $\Sigma \cap I \neq \emptyset$ et pour tout sous-intervalle compact $J \subset I$ et tout $\zeta \in]0, 1[$, il existe une constante $C_{J,\zeta}$ telle que

$$\mathbb{E} \left\{ \sup_{\|f\|_\infty \leq 1} \|\chi_x E_\omega(J) f(H_\omega) \chi_y\|_2^2 \right\} \leq C_{J,\zeta} e^{-|x-y|^\zeta}, \quad (\text{II.2.3})$$

pour tous $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d$, la borne supérieure étant prise sur toutes les fonctions boréliennes f d'une variable réelle, avec $\|f\|_\infty = \sup_{t \in \mathbb{R}} |f(t)|$ et $\|\cdot\|_2$ la norme Hilbert-Schmidt.

On notera, à la suite de [40], Σ_{EL} (resp. $\Sigma_{SSEHSKD}$) l'ensemble des points dont il existe un voisinage sur lequel H_ω vérifie la propriété (EL) (resp. (SSEHSKD)).

Il est clair que chacune de ces 2 propriétés implique la localisation spectrale. De plus, (SSEHSKD) implique également la localisation dynamique. Nous chercherons donc à montrer ces propriétés, ce qui nous permettra d'obtenir les propriétés classiques de localisation.

Nous allons voir qu'on peut obtenir la localisation à partir de décroissances de résolvantes. L'idée de l'analyse multi-échelles est de partir de décroissances de résolvantes d'opérateurs sur des petites boîtes avec une certaine probabilité et d'obtenir des meilleures estimations sur des boîtes plus grandes avec une probabilité plus grande.

Définition II.23. Étant donné $E \in \mathbb{R}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ et $L \in 6\mathbb{N}$ avec $E \notin \sigma(H_{\omega,\mathbf{x},L})$, on dit que la boîte $\Lambda_L(\mathbf{x})$ est (ω, m, E) -régulière pour un certain $m > 0$ si

$$\left\| \Gamma_{\mathbf{x},L} R_{\omega,\mathbf{x},L}(E) \chi_{\mathbf{x},L/3} \right\| \leq e^{-mL/2}. \quad (\text{II.2.4})$$

Pour s'assurer qu'il y a un nombre entier de petites boîtes dans une grande boîte, on ne prend que des boîtes dont le côté est dans $6\mathbb{N}$. Ainsi, dans la suite, on notera

$$[L]_{6\mathbb{N}} = \sup\{n \in 6\mathbb{N} | n \leq L\}.$$

Définition II.24. Pour $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d$, $L \in 6\mathbb{N}$, $m > 0$ et $I \subset \mathbb{R}$ un intervalle, on note

$$\begin{aligned} R(m, L, I, \mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ = \{\omega; \text{pour tout } E' \in I, \Lambda_L(\mathbf{x}) \text{ ou } \Lambda_L(\mathbf{y}) \text{ est } (\omega, m, E')\text{-régulière.}\}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.5})$$

La région d'analyse multi-échelles Σ_{MSA} pour H_ω est l'ensemble des E dans le spectre presque sûr Σ tels qu'il existe un intervalle $I \ni E$ tel que, étant donné ζ , $0 < \zeta < 1$ et α ,

$1 < \alpha < \zeta^{-1}$, il existe une longueur $L_0 \in 6\mathbb{N}$ et une masse $m > 0$ telles que, si on pose $L_{k+1} = [L_k^\alpha]_{6\mathbb{N}}$, $k = 0, 1, \dots$, on a

$$\mathbb{P} \{R(m, L_k, I, \mathbf{x}, \mathbf{y})\} \geq 1 - e^{-L_k^\zeta}$$

pour tous $k \in \mathbb{N}$, $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d$ vérifiant $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| > L_k$.

Théorème II.25 (Analyse multi-échelles - [40], théorème 5.4p. 136). *Soit H_ω un opérateur ergodique standard au sens de Klein vérifiant (IAD), ainsi que les propriétés (SLI), (NE) et (W) sur un intervalle ouvert I . En notant Σ le spectre presque sûr de H_ω et, pour b comme dans (II.2.2), étant donné $\theta > bd$, pour chaque $E \in I$ il existe une longueur finie $\mathcal{L}_\theta(E) = \mathcal{L}_\theta(E, b, d) > 0$ bornée sur les sous-intervalles compacts de I telle que, si pour un $E_0 \in \Sigma \cap I$ donné on a (H1)(θ, E_0, L_0) à une échelle $L_0 \in 6\mathbb{N}$ avec $L_0 > \mathcal{L}_\theta(E_0)$, alors $E_0 \in \Sigma_{MSA}$.*

Nous ne donnerons pas en détail la preuve de ce théorème qui est très technique. Les différentes étapes du raisonnement sont présentées dans l'annexe B. Nous allons donner ici simplement la « philosophie » de l'analyse multi-échelles.

Cette analyse consiste en un raisonnement par récurrence. L'étape initiale est donnée, soit par la propriété (H1), soit par un résultat d'une précédente analyse multi-échelles. Voyons maintenant comment on passe d'une échelle à l'autre, disons de l'échelle l à l'échelle L . On cherche à obtenir une majoration sur des quantités de type

$$\|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L} \chi_{x,\frac{L}{3}}\|$$

à partir de majorations sur des

$$\|\Gamma_{y,l} R_{\omega,y,l} \chi_{y,\frac{l}{3}}\|$$

pour différents \mathbf{y} . La première étape va être de décomposer la quantité souhaitée en somme de quantités de la forme

$$\|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L} \chi_{y,\frac{l}{3}}\|$$

pour des \mathbf{y} tels que les $\Lambda_{\frac{l}{3}}(\mathbf{y})$ forment une partition de $\Lambda_{\frac{L}{3}}(\mathbf{x})$.

La propriété essentielle passer d'une échelle à l'autre est l'inégalité (SLI). Plus précisément, nous utilisons la variante suivante :

$$\|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L}(E) \chi_{y,l/3}\| \leq 3^d \gamma_J \|\Gamma_{y,l} R_{\omega,y,l}(E) \chi_{y,l/3}\| \|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L}(E) \Gamma_{y'',l/3}\| \quad (\text{II.2.6})$$

pour un certain $\mathbf{y}'' \in \frac{l}{3}\mathbb{Z}^d$ tel que $|\mathbf{y}'' - \mathbf{y}| = \frac{l}{3}$.

Si on suppose que la boîte $\Lambda_l(\mathbf{y})$ est (ω, m, E) -régulière, alors on a

$$\|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L}(E) \chi_{y,l/3}\| \leq 3^d \gamma_J e^{-m\frac{l}{3}} \|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L}(E) \Gamma_{y'',l/3}\|. \quad (\text{II.2.7})$$

On reconnaît dans le dernier facteur du second membre une quantité du même type que celle dans le premier membre. On va donc réitérer l'application de (II.2.6) et trouver

$$\|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L}(E) \chi_{y,l/3}\| \leq (3^d \gamma_J e^{-m\frac{l}{3}})^N \|\Gamma_{x,L} R_{\omega,x,L}(E) \Gamma_{\mathbf{y}_N,l/3}\| \quad (\text{II.2.8})$$

On peut continuer à faire ça tant que \mathbf{y}_N reste dans la boîte $\Lambda_L(\mathbf{x})$, c'est-à-dire jusqu'à N de l'ordre de $\frac{L}{l}$ au moins (puisqu'on se déplace d'une distance l à chaque fois). Nous n'entrerons pas dans le détail de ce que ça veut dire; le lecteur pourra se référer à [40] pour une preuve précise.

On a alors que

$$\|\Gamma_{\mathbf{x},L}R_{\omega,\mathbf{x},L}(E)\chi_{\mathbf{y},l/3}\| \leq Ce^{-m'\frac{L}{2}}\|\Gamma_{\mathbf{x},L}R_{\omega,\mathbf{x},L}(E)\Gamma_{\mathbf{y}_N,l/3}\| \quad (\text{II.2.9})$$

pour $m' < m$.

Il reste alors à majorer le dernier facteur : cela se fait grâce à (W) qui nous affirme qu'il est plus petit que L^s , pour un certain s tel que $bd < s < \alpha s < \theta$, avec probabilité importante.

Ce schéma semble convaincant mais il ne fonctionne en réalité pas. En effet, nous avons supposé que toutes les boîtes $\Lambda_l(\mathbf{y}_n)$ étaient (ω, m, E) -régulières et qu'en plus $\|R_{\omega,\mathbf{x},L}\|$ était petite. Cela ne se produit, selon les hypothèses, qu'avec une probabilité trop faible pour que la suite des probabilités ne tende pas vers 0 au fil des étapes.

La solution consiste à supposer qu'il existe au plus une boîte qui n'est pas régulière (au sens où on ne peut pas trouver 2 mauvaises boîtes disjointes). On peut montrer que dans ce cas la probabilité est assez élevée. Il faut en revanche prendre plus de précaution pour majorer les $\|\Gamma_{\mathbf{y}_k,l}R_{\omega,\mathbf{y},l}(E)\chi_{\mathbf{y}_k,l/3}\|$. Si la boîte $\Lambda_l(\mathbf{y}_k)$ est régulière, alors tout se passe comme précédemment. Dans le cas contraire, on majorera la quantité grâce à (W). La puissance N sera légèrement moins élevée mais toujours de l'ordre de $\frac{L}{l}$. Cela permettra donc de conclure.

Les résultats de l'analyse multi-échelles nous permettent ensuite d'obtenir la localisation.

Théorème II.26 (Localisation - [40], théorème 6.1 p.139). *Soit H_ω un opérateur ergodique standard au sens de Klein vérifiant (IAD) et les propriétés (SGEE) et (EDI) dans un intervalle ouvert I . Alors,*

$$\Sigma_{MSA} \cap I \subset \Sigma_{EL} \cap \Sigma_{SSEHSKD} \cap I.$$

Idée de la preuve. Pour montrer la localisation spectrale, on prend $E \in \Sigma_{MSA} \cap I$. On va alors montrer que toute fonction propre généralisée associée à une valeur propre généralisée dans un voisinage de E est exponentiellement décroissante. Comme l'opérateur possède la propriété (GEE), cela permet de dire que le spectre est purement ponctuel au voisinage de E .

Commençons par prendre $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{Z}^d$. On fixe $\beta > 1$; on peut alors diviser \mathbb{Z}^d en une famille d'anneaux (non disjoints) centrés sur \mathbf{x}_0 :

$$A_k(\mathbf{x}_0) = (\Lambda_{2\beta L_{k+1}}(\mathbf{x}_0) \setminus \Lambda_{2L_k}(\mathbf{x}_0)) \cap \mathbb{Z}^d.$$

On va considérer la famille d'événements

$$E_k(\mathbf{x}_0) = \{\omega; \Lambda_{L_k}(\mathbf{x}_0) \text{ et } \Lambda_{L_k}(\mathbf{x}) \text{ ne sont ni l'une, ni l'autre } (\omega, m, E') \text{ - régulières} \\ \text{pour certains } E' \in I \text{ et } \mathbf{x} \in A_{k+1}(\mathbf{x}_0)\}. \quad (\text{II.2.10})$$

Vu la définition de Σ_{MSA} , le lemme de Borel-Cantelli, nous permet d'affirmer que, avec probabilité 1, $E_k(\mathbf{x}_0)$ ne se produit qu'un nombre fini de fois. Il existe donc, pour presque tout ω , $k_1(\omega, \mathbf{x}_0)$ tel que, pour $k \geq k_1$, $\omega \notin E_k(\mathbf{x}_0)$.

Prenons alors une fonction propre généralisée ψ de H_ω et choisissons \mathbf{x}_0 tel que $\|\chi_{\mathbf{x}_0}\psi\| \neq 0$. Il est alors possible de trouver L' tel que $\Lambda_{L'}(\mathbf{x}_0)$ n'est pas (ω, m, E') -régulière pour $L > L'$. Pour k assez grand pour que $L_k \geq L'$, choisissons $\mathbf{x} \in A_{k+1}(\mathbf{x}_0)$ tel que

$$\text{dist}(\mathbf{x}, \mathbb{Z}^d \setminus A_{k+1}(\mathbf{x}_0)) \geq 2|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|. \quad (\text{II.2.11})$$

On applique alors la propriété (EDI) qui nous donne, vu que d'une part on est dans le complémentaire de $E_k(\mathbf{x}_0)$ et qu'ainsi $\Lambda_{L_k}(\mathbf{x})$ est (ω, m, E') -régulière et que d'autre part $\|\Gamma_{\mathbf{x}, L}\psi\| \leq dL_k^{d-1} \sup_{\mathbf{x}' \in \Upsilon_{L_k}(\mathbf{x})} \|\chi_{\mathbf{x}'}\psi\|$,

$$\|\chi_{\mathbf{x}}\psi\| \leq d\tilde{\gamma}_{\bar{L}}L_k^{d-1}e^{-mL_k/2}\|\chi_{\mathbf{x}_1}\psi\|$$

pour un certain $\mathbf{x}_1 \in \Upsilon_{L_k}(\mathbf{x}) \subset A_{k+1}(\mathbf{x}_0)$ en raison de (II.2.11).

On peut répéter en remplaçant \mathbf{x} par \mathbf{x}_1 et ainsi de suite pour trouver que

$$\|\chi_{\mathbf{x}}\psi\| \leq \left(d\tilde{\gamma}_{\bar{L}}L_k^{d-1}e^{-mL_k/2}\right)^n \|\chi_{\mathbf{x}_n}\psi\|$$

avec $|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}| \leq n\left(\frac{L_k}{2} - 1\right)$. On peut continuer à faire ça avec $\mathbf{x}_n \in A_{k+1}(\mathbf{x}_0)$ tant que $n\left(\frac{L_k}{2} - 1\right) < 2|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|$. De plus, ψ étant une fonction propre généralisée, elle est dans \mathcal{H}_- , on a donc que $\|\chi_{\mathbf{x}_n}\psi\| \leq \left(\frac{3}{2}\right)^\nu \|\mathbf{x}_n\|^\nu$.

On a donc finalement que

$$\|\chi_{\mathbf{x}}\psi\| \leq e^{-\alpha m|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|/2}$$

pour un certain $\alpha < 1$, la fonction propre généralisée est donc exponentiellement décroissante. \square

II.3 Résultats pour l'opérateur de Dirac

Nous présentons dans cette section des résultats de localisation pour des opérateurs de Dirac aléatoires, visant à modéliser des feuilles de graphène désordonné. En effet, le résultat de [6] suppose que la perforation du graphène est parfaitement périodique. Cette condition n'est évidemment pas remplie en réalité. Les physiciens se sont intéressés à cette question dans [65]. Ils montrent numériquement que la lacune reste ouverte en présence de désordre et qu'il existe des états localisés.

Ce travail a été réalisé en collaboration avec Jean-Marie Barbaroux et Horia D. Cornean et publié dans *Documenta Mathematica* : [7].

II.3.1 Modèle et énoncé des résultats

Si notre objectif est de montrer des résultats de localisation pour l'opérateur de Dirac en dimension 2, nous avons pu voir qu'il était possible d'obtenir les mêmes résultats pour une très large classe d'opérateurs en toutes dimensions. Nous devons pour cela donner quelques définitions.

Définition II.27. Soit $\{\sigma_i\}_{i=1}^d$ une famille de matrices hermitiennes $n \times n$ où $n, d \geq 1$. Considérons l'opérateur linéaire d'ordre 1 à coefficients constants :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla) := \sum_{j=1}^d \sigma_j \left(-i \frac{\partial}{\partial x_j}\right), \quad (\text{II.3.1})$$

densément défini sur $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$. Il est *elliptique* s'il existe $C > 0$ tel que pour tous $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$ et $\mathbf{q} \in \mathbb{C}^n$ on a

$$\|(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\mathbf{q}\|_{\mathbb{C}^n} \geq C \|\mathbf{p}\|_{\mathbb{R}^d} \|\mathbf{q}\|_{\mathbb{C}^n}. \quad (\text{II.3.2})$$

Si $E_0 \in \mathbb{R}$, les fonctions

$$\mathbb{R}^d \ni \mathbf{p} \mapsto g_{ij}(\mathbf{p}) := \left[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - E_0 - i)^{-1} \right]_{ij} \in \mathbb{C}, \quad 1 \leq i, j \leq n,$$

sont bien définies et, par (II.3.2), il existe une constante $C < \infty$ telle que

$$|g_{ij}(\mathbf{p})| \leq C \langle \mathbf{p} \rangle^{-1}, \quad 1 \leq i, j \leq n \quad (\text{II.3.3})$$

où $\langle \mathbf{p} \rangle := \sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}$ pour une certaine norme $|\cdot|$ sur \mathbb{R}^d .

Une conséquence directe est que $\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla)$ est auto-adjoint sur l'espace de Sobolev $H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$.

Définition II.28. On dit qu'un opérateur sur $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ est un *opérateur positif de coefficients* si c'est un opérateur inversible borné donné par la multiplication par une fonction mesurable $S(\mathbf{x})$ à valeurs dans l'espace des matrices hermitiennes $n \times n$ telle qu'il existe deux constantes positives S_{\pm} telles que :

$$0 < S_- I_n \leq S(\mathbf{x}) \leq S_+ I_n, \quad (\text{II.3.4})$$

où I_n est la matrice identité de taille n .

Nous allons considérer des opérateurs du type

$$H_0 = S D_0 S + V_0 \quad (\text{II.3.5})$$

où D_0 est un opérateur elliptique d'ordre 1 à coefficients constants comme dans (II.3.1), et S est un opérateur positif de coefficients comme dans (II.3.4). On suppose que la fonction $S \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d, \mathcal{H}_n(\mathbb{C}))$, où \mathcal{H}_n est l'espace des matrices hermitiennes $n \times n$, est \mathbb{Z}^d -périodique. On notera

$$D_S := S D_0 S.$$

Des opérateurs de ce genre apparaissent dans l'étude de la propagation des ondes et sont parfois appelés *opérateurs d'onde classiques* (cf. [42, 41]). Le potentiel V_0 est lui aussi \mathbb{Z}^d -périodique et appartient à $L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathcal{H}_n)$.

Sous ces hypothèses, l'opérateur H_0 est auto-adjoint sur $H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$.

Hypothèse II.29 (existence d'une lacune spectrale). *Le spectre de H_0 contient une lacune spectrale finie, que l'on notera $]B_-, B_+[$.*

Exemple II.30. Les exemples les plus simples sont donnés par les opérateurs de Dirac avec une masse $\mu > 0$ en dimension deux et trois, donnés respectivement par

$$H_0 = \sigma_1(-i\partial_{x_1}) + \sigma_2(-i\partial_{x_2}) + \mu\sigma_3 \text{ sur } L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^2),$$

où les σ_i sont les matrices de Pauli. et

$$H_0 = \boldsymbol{\alpha} \cdot (-i\nabla) + \mu\beta \text{ sur } L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4),$$

où $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, β désigne les matrices de Dirac

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}.$$

Ces deux opérateurs sont tels que $\rho(H_0) \cap \mathbb{R} =]-\mu, \mu[$ (cf. [62]).

Exemple II.31. Les opérateurs étudiés par Barbaroux, Cornean et Stockmeyer dans [6], que nous avons définis par l'équation (I.3.5) et étudiés dans la section I.3.2, vérifient aussi cette hypothèse d'après le théorème I.24.

Exemple II.32. Dans [22], il est prouvé que certains opérateurs de la forme D_S comme dans (II.3.5), représentant des opérateurs de Maxwell avec des constantes diélectriques périodiques, peuvent aussi avoir des lacunes spectrales.

Pour des opérateurs satisfaisant l'hypothèse II.29, on veut étudier l'effet de perturbations aléatoires sur la lacune spectrale $]B_-, B_+[$.

La perturbation aléatoire à valeurs matricielles V_ω , qui décrit des défauts locaux, est définie par

$$V_\omega = \sum_{\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d} \lambda_{\mathbf{i}}(\omega) u(\cdot - \boldsymbol{\xi}_{\mathbf{i}}(\omega) - \mathbf{i}),$$

pour u , $\lambda_{\mathbf{i}}$ et $\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{i}}$ vérifiant l'hypothèse II.33 ci-dessous. Le hamiltonien total est donc

$$H_\omega = H_0 + V_\omega. \quad (\text{II.3.6})$$

Hypothèse II.33. (i) Les variables aléatoires réelles $\{\lambda_{\mathbf{i}}(\omega), \mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d\}$ sont indépendantes et identiquement distribuées. Leur loi commune est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue, avec une densité h telle que $\|h\|_{L^\infty} < \infty$.

On suppose $\text{supp}(h) = [-m, M] \neq \{0\}$ pour certains m et M positifs.

(ii) Les variables $\{\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{i}}(\omega), \mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d\}$ sont indépendantes et identiquement distribuées et sont aussi indépendantes des λ_j . Elles ont leurs valeurs dans B_R avec $0 < R < \frac{1}{2}$, où B_R désigne la boule de \mathbb{R}^d de rayon R centrée à l'origine.

(iii) Le potentiel matriciel élémentaire u a un support compact $\text{supp}(u) \subset [-2, 2]^d$. De plus, u est continu presque partout, avec $u \in L^\infty(\mathbb{R}^d, \mathcal{H}_n^+)$, où \mathcal{H}_n^+ est l'espace des matrices hermitiennes positives $n \times n$.

(iv) La densité h décroît suffisamment vite près de $-m$ et M , c'est-à-dire que

$$0 < \mathbb{P}\{|\lambda + m| < \epsilon\} \leq \epsilon^{d/2+\beta},$$

$$0 < \mathbb{P}\{|\lambda - M| < \epsilon\} \leq \epsilon^{d/2+\beta}$$

pour un certain $\beta > 0$.

Remarque II.34. Cette hypothèse appelle quelques commentaires :

(i) Notre espace de probabilité $\Omega = (\text{supp}(h))^{\mathbb{Z}^d} \times (B_R)^{\mathbb{Z}^d}$ est muni de la mesure produit.

(ii) La périodicité de V_0 et S ainsi que les hypothèses (i) et (ii) impliquent que la famille $\{H_\omega, \omega \in \Omega\}$ est une famille ergodique et a donc un spectre déterministe conformément au théorème II.3. .

(iii) Un résultat standard sur les idéaux de trace, dû à Birman et Solomyak et présenté par exemple dans [58, Theorem 4.1], affirme que

$$f(x)g(-i\nabla) \in \mathcal{T}_q \quad \text{si} \quad f, g \in L^q(\mathbb{R}^d) \quad \text{pour} \quad 2 \leq q < \infty$$

avec

$$\|f(x)g(-i\nabla)\|_q \leq (2\pi)^{-d/q} \|f\|_{L^q} \|g\|_{L^q}$$

où \mathcal{T}_q désigne l'idéal de trace et $\|\cdot\|_q$ la norme associée.

Si $q > d$, chaque $g_{ij} \in L^q(\mathbb{R}^d)$. Ainsi, si $f \in L^q(\mathbb{R}^d, \mathcal{M}_n(\mathbb{C}))$ on obtient que $f(\cdot)(D_0 - E_0 - i)^{-1} \in \mathcal{T}_q$ et qu'il existe une constante $C < \infty$ telle que pour tous $E_0 \in \mathbb{R}$ et $f \in L^q(\mathbb{R}^d, \mathcal{M}_n(\mathbb{C}))$ on a

$$\|f(\cdot)(D_0 - E_0 - i)^{-1}\|_q \leq C \max_{1 \leq i, j \leq n} \|f_{ij}\|_{L^q(\mathbb{R}^d)}.$$

Afin de simplifier les notations, nous omettrons parfois la structure matricielle des divers objets et écrirons simplement, par exemple, $\|f\|_{L^q}$ au lieu de prendre le maximum sur chacune des n^2 composantes.

Notons pour simplifier $z = E_0 + i$. On a

$$(D_S - z)^{-1} = S^{-1}(D_0 - zS^{-2})^{-1}S^{-1}$$

et

$$(D_0 - zS^{-2})^{-1} = (D_0 - z)^{-1} - (D_0 - z)^{-1}z(I_n - S^{-2})(D_0 - zS^{-2})^{-1}.$$

Une conséquence de (II.3.4) est que les éléments de S et ceux de S^{-1} sont globalement bornées. De là, pour tout intervalle borné $I \subset \mathbb{R}$, il existe une constante finie C_I telle que pour tous $E_0 \in I$ et $f \in L^q$ on a :

$$\|f(\cdot)(D_S - E_0 - i)^{-1}\|_q \leq C_I \|f\|_{L^q}.$$

Si $E_0 \in]B_-, B_+[$, $(H_0 - E_0)^{-1}$ est un opérateur borné. De là, en appliquant successivement la première identité de la résolvante pour passer de E_0 à $E_0 + i$ et la deuxième identité de la résolvante pour obtenir $(D_S - E_0 - i)^{-1}$ à gauche, on trouve que $f(\cdot)(H_0 - E_0)^{-1} \in \mathcal{T}_q$ si $q > d$ et que, pour tout sous-intervalle compact J de $]B_-, B_+[$, il existe une constante finie C'_J telle que pour tous $E_0 \in J$ et $f \in L^q$ on a :

$$\|f(\cdot)(H_0 - E_0)^{-1}\|_q \leq C'_J \|f\|_{L^q}. \quad (\text{II.3.7})$$

(iv) Les hypothèses (i)-(iii) impliquent que $\forall \omega$, $\|V_\omega\|_\infty \leq C$ où C est une constante finie dépendant seulement de m , M , u et R .

(v) En conséquence, l'opérateur H_ω est auto-adjoint sur $H^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ pour tout ω .

(vi) Un autre résultat intéressant est le suivant. Étant donné une fonction de l'espace de Schwartz $\chi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$, comme $S \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d, \mathcal{M}_n(\mathbb{C}))$, le commutateur $[H_0, \chi]$ est borné. En effet, on a :

$$[H_0, \chi] = S(\sigma \cdot (-i\nabla\chi))S.$$

On notera :

$$M_\infty := \max\{m, M\} \sup_{(\mathbf{x}_i) \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^{\mathbb{Z}^d}} \left\| \sum_{\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d} u(\cdot - \mathbf{x}_i - \mathbf{i}) \right\|_\infty < \infty, \quad (\text{II.3.8})$$

où $\|\cdot\|_\infty$ est la borne supérieure sur \mathbb{R}^d de la norme d'opérateur associée à la norme euclidienne standard sur \mathbb{C}^n . On rappelle que u est à support compact ; la série ci-dessus ne comprend donc qu'un nombre fini de termes non nuls.

Il nous faut ensuite une hypothèse sur le spectre presque sûr. Dans la proposition II.36, nous donnerons une condition suffisante pour qu'elle soit vérifiée.

Hypothèse II.35. Soit Σ le spectre presque sûr de H_ω . Alors il existe deux constantes B'_\pm vérifiant $B_- \leq B'_- < B'_+ \leq B_+$ telles que

$$\Sigma \cap (]B_-, B'_-[\cup]B'_+, B_+[) \neq \emptyset \quad \text{et} \quad \Sigma \cap]B'_-, B'_+[= \emptyset,$$

c'est-à-dire que du spectre apparaît dans la lacune mais que celle-ci n'est pas complètement fermée.

Nous allons voir que cette hypothèse peut être vérifiée en général. Conformément au théorème II.8, nous avons des informations sur le spectre de H_ω pour tout ω .

Montrons que nous avons affaire à une famille ergodique standard au sens de Kirsch avec $\Omega_0 = \Omega$. D'une part, Ω est un espace polonais comme produit dénombrable d'espaces polonais lorsqu'il est muni de la distance classique sur un produit d'espaces métriques. D'autre part, il suffit de prouver que pour tout $\phi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ on a $H_{\omega_j}\phi \rightarrow H_\omega\phi$ quand $\omega_j \rightarrow \omega$ (cf. [57, théorème VIII.25]).

Si $\omega_j \rightarrow \omega \in \Omega$, alors pour tout $\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d$ $\lambda_i(\omega_j) \rightarrow \lambda_i(\omega)$ et $\xi_i(\omega_j) \rightarrow \xi_i(\omega)$. Alors (en supposant pour simplifier que $n = 1$) :

$$\begin{aligned} & \|H_{\omega_j}\phi - H_\omega\phi\|^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{\mathbf{i} \in \mathbb{Z}^d} |\lambda_i(\omega_j)u(\cdot - \xi_i(\omega_j) - \mathbf{i}) - \lambda_i(\omega)u(\cdot - \xi_i(\omega) - \mathbf{i})|^2 |\phi|^2. \end{aligned}$$

Comme u est continue presque partout, la différence dans l'intégrale est bornée presque partout et l'intégrande est borné par $4M_\infty^2|\phi|^2$ qui est intégrable. En utilisant le théorème de convergence dominée, on trouve le résultat souhaité.

Notons que si $\xi_i(\omega)$ prend seulement des valeurs discrètes (ce qui inclus le cas où elle est constante), nous n'avons pas besoin de la continuité de u .

Le théorème II.8 nous permet donc de conclure que

$$\forall \omega \in \Omega, \quad \sigma(H_\omega) \subset \Sigma. \tag{II.3.9}$$

Ainsi, Σ ne dépend que du support de la loi des λ_i . De plus, $\Sigma \cap [B_-, B_+]$ est caractérisé par les deux propositions suivantes qui affirment que, sous les hypothèses II.29 et II.33, on peut ajuster les paramètres de façon que l'hypothèse II.35 soit vérifiée et que du « nouveau » spectre presque sûr apparaisse dans la lacune de l'opérateur non perturbé, sans toutefois la fermer totalement. De plus, le spectre presque sûr a exactement une lacune dans une lacune de l'opérateur non perturbé. Les preuves seront données dans l'appendice C.

Proposition II.36. Il existe u , m , et M comme dans l'hypothèse II.33 tels que H_ω vérifie l'hypothèse II.35.

Proposition II.37 (Emplacement du spectre dans la lacune de H_0). Supposons qu'il existe B'_- et B'_+ comme dans l'hypothèse II.35. Notons

$$\tilde{B}_- = \sup\{E \in \Sigma \mid E \leq B'_-\} \quad \text{et} \quad \tilde{B}_+ = \inf\{E \in \Sigma \mid E \geq B'_+\}.$$

Alors $[B_-, \tilde{B}_-] \subset \Sigma$ et $[\tilde{B}_+, B_+] \subset \Sigma$.

Nos principaux résultats de localisation sont les suivants.

Théorème II.38 (Localisation spectrale). *Sous les hypothèses II.29, II.33 et II.35, il existe deux constantes E_{\pm} vérifiant $B_- \leq E_- \leq B'_-$ et $B'_+ \leq E_+ \leq B_+$ telles que $\Sigma \cap]E_-, E_+[$ n'est pas vide, purement ponctuel avec des valeurs propres denses dans les intervalles, avec des fonctions propres exponentiellement décroissantes.*

Théorème II.39 (Localisation dynamique). *Supposons que les hypothèses II.29, II.33 et II.35 sont vérifiées, et notons E_{\pm} les deux énergies introduites dans le théorème II.38. Si $r > 0$ et $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ à support compact, alors pour tout intervalle compact $J \subset (E_-, E_+)$,*

$$\mathbb{E} \left\{ \left\| |x|^r E_{\omega}(J) e^{-iH_{\omega}t} \psi \right\|^2 \right\} < \infty \quad (\text{II.3.10})$$

où $E_{\omega}(J)$ désigne le projecteur spectral sur l'intervalle J pour H_{ω} et \mathbb{E} est l'espérance associée à \mathbb{P} .

Remarque II.40. On notera que l'existence d'une lacune dans le spectre de l'opérateur non perturbé (hypothèse II.29) est capitale. En effet, reprenons le modèle en dimension 1 donné par l'équation (I.3.2) dans la section I.3.2. Si on ajoute un potentiel de masse périodique, le hamiltonien étant alors

$$-i\sigma_1 \frac{d}{dx} + V_{per}\sigma_3 + V_{\omega},$$

on peut montrer avec des arguments semblables à ceux de [6] que le spectre a une lacune autour de 0. Si V_{ω} vérifie l'hypothèse II.33, alors on observe la localisation au bord des bandes conformément aux théorèmes ci-dessus.

En revanche, s'il n'y a pas de potentiel de masse, alors on a le même hamiltonien que dans l'équation (I.3.2), la seule différence étant que le potentiel dépend de ω . L'analyse que nous avons menée montre que ce hamiltonien ne peut avoir de fonction propre dans L^2 . En effet, une telle fonction serait continue par un argument standard d'injection de Sobolev. Comme elle vérifie l'équation (I.3.3), elle est nécessairement de classe C^1 , or les solutions de cette équation ne sont pas de carré intégrable. Le spectre purement ponctuel de cet opérateur est donc vide.

II.3.2 Preuve de la localisation

Nous allons montrer ici que les conditions pour utiliser l'analyse multi-échelles sont réunies dans le cas du modèle présenté ci-dessus. En premier lieu, il est facile de voir que l'opérateur est standard au sens de Klein. Étant donné une boîte $\Lambda_L(\mathbf{x})$, on définit l'opérateur dit « en volume fini » (au sens où la partie aléatoire n'agit que sur un volume fini) par :

$$H_{\omega, \mathbf{x}, L} = H_0 + \sum_{i \in \Lambda_L(\mathbf{x}) \cap \mathbb{Z}^d} \lambda_i(\omega) u_i(\cdot - \boldsymbol{\xi}_i(\omega)) = H_0 + V_{\omega, \mathbf{x}, L}, \quad (\text{II.3.11})$$

où on a noté $u_i = u(\cdot - \mathbf{i})$. Cet opérateur est auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$.

On rappelle qu'on note $R_{\omega, \mathbf{x}, L}(z) = (H_{\omega, \mathbf{x}, L} - z)^{-1}$ la résolvante de $H_{\omega, \mathbf{x}, L}$ et $E_{\omega, \mathbf{x}, L}(\cdot)$ la famille de projecteurs spectraux associée.

Théorème II.41. *Soit H_{ω} l'opérateur défini par (II.3.6) vérifiant les hypothèses II.29, II.33 et II.35. Alors on a (IAD) et il existe deux constantes E_{\pm} vérifiant $B_- \leq E_- < \tilde{B}_-$ et $\tilde{B}_+ < E_+ \leq B_+$ telles que (SLI), (EDI), (NE), (W), (SGEE) et $(H1(\theta, \cdot, L_0))$ pour θ et L_0 assez grands sont vérifiées sur $\Sigma \cap]E_-, E_+[$. En conséquence, nous avons les propriétés de localisation (EL) et (SSEHSKD) sur les intervalles constituant $\Sigma \cap]E_-, E_+[$.*

Démonstration. (IAD) est une conséquence directe de l'indépendance des variables aléatoires exigée par les hypothèses II.33 (i) et (ii).

Pour montrer (SLI), soit $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{y}', L, l''$ et l' comme dans la propriété II.17. Considérons, pour $\mathbf{0} \in \mathbb{Z}^d$ et $\ell > 4$, une fonction $\tilde{\chi}_{\mathbf{0},\ell} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d, [0, 1])$ valant 1 sur $\Lambda_{\ell-3}(\mathbf{0})$ et 0 en dehors de $\Lambda_{\ell-5/2}(\mathbf{0})$ et dont le gradient a une norme inférieure à 1. Posons $E \in]B_-, B_+[$ tel que $E \notin \sigma(H_{\omega, \mathbf{x}, L}) \cup \sigma(H_{\omega, \mathbf{y}', l'})$.

L'hypothèse II.33(iii) sur le support de u nous permet d'écrire l'identité $H_\omega \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'} = H_{\omega, \mathbf{x}, L} \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'}$ et ainsi :

$$(H_\omega - E) \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'} R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) = \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'} + W_{\mathbf{y}', l'} R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) \quad (\text{II.3.12})$$

où

$$W_{\mathbf{y}', l'} = [H_\omega, \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'}] = [H_0, \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'}]$$

est borné au vu de la remarque II.34 (vi).

Avec des arguments de support semblables, on a $H_\omega \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'} = H_{\omega, \mathbf{y}', l'} \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'}$, ce qui, avec l'identité (II.3.12), donne l'équation de la résolvante géométrique :

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'} R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) = R_{\omega, \mathbf{y}', l'}(E) \tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'} + R_{\omega, \mathbf{y}', l'}(E) W_{\mathbf{y}', l'} R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E). \quad (\text{II.3.13})$$

Multiplier (II.3.13) à gauche par $\chi_{\mathbf{y}, l''}$ et à droite par $\Gamma_{\mathbf{x}, L}$, noter que $W_{\mathbf{y}', l'} = \Gamma_{\mathbf{y}', l'} W_{\mathbf{y}', l'} \Gamma_{\mathbf{y}', l'}$, $\tilde{\chi}_{\mathbf{y}', l'} \Gamma_{\mathbf{x}, L} = 0$, et prendre la norme des adjoints conduit alors à l'inégalité (II.2.1).

Pour (EDI), on a, pour ψ une fonction propre généralisée de H_ω à laquelle est associée la valeur propre généralisée E :

$$R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) W_{\mathbf{x}, L} \psi = R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) (H_\omega \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} - \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} H_\omega) \psi.$$

Or, en notant $V_{\omega, \mathbf{x}, L}^{ext} = V_\omega - V_{\omega, \mathbf{x}, L}$, on a,

$$H_\omega = H_{\omega, \mathbf{x}, L} + V_{\omega, \mathbf{x}, L}^{ext} = R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E)^{-1} + E + V_{\omega, \mathbf{x}, L}^{ext}.$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} & R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) W_{\mathbf{x}, L} \psi \\ &= \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} \psi + R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) E \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} \psi + R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) V_{\omega, \mathbf{x}, L}^{ext} \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} \psi - R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} H_\omega \psi. \end{aligned}$$

En remarquant que $V_{\omega, \mathbf{x}, L}^{ext} \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} = 0$ et $H_\omega \psi = E \psi$, on trouve

$$R_{\omega, \mathbf{x}, L}(E) W_{\mathbf{x}, L} \psi = \tilde{\chi}_{\mathbf{x}, L} \psi$$

ce qui, par des opérations semblables à celles utilisées dans la preuve de (SLI), donne le résultat désiré.

(NE) et (W) seront démontrées dans le paragraphe II.3.2. (H1(θ, E_0, L_0)), pour des valeurs bien choisies des paramètres, sera démontrée dans le paragraphe II.3.2.

Donnons à présent la preuve de (SGEE). Pour le premier point, il suffit de remarquer que $\mathcal{D}_+^\omega \supset C_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ qui est dense dans \mathcal{H}_+ et un cœur pour H_ω pour tout ω .

Pour la second point, prenons T comme dans la section II.2.1, défini par la multiplication par $\langle x \rangle^{2\nu}$ où $\nu > d/4$. Nous montrerons qu'il existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\text{tr} \left(T^{-1} (H_\omega - i\lambda)^{-d} (H_\omega + i\lambda)^{-d} T^{-1} \right) \leq C,$$

avec C presque sûrement indépendant de ω , ce qui impliquera (SGEE) pour tout intervalle $I \subset \mathbb{R}$, avec $f : x \mapsto |x - i\lambda|^{-2d}$.

À cet effet, il suffit de montrer que $T^{-1}(H_\omega - i\lambda)^{-d}$ est Hilbert-Schmidt avec une norme Hilbert-Schmidt presque sûrement indépendante de ω .

Pour un certain $\alpha > 0$, soit $h_\alpha = \langle \cdot \rangle^\alpha H_\omega \langle \cdot \rangle^{-\alpha}$ défini sur $\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$. Étant donné que la multiplication par $\langle \mathbf{x} \rangle^{\pm\alpha}$ commute avec les potentiels, on trouve que pour tout $\phi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$

$$h_\alpha \phi = H_\omega \phi + K \phi$$

où K est un opérateur borné indépendant de ω . On peut alors prolonger h_α à $\text{Dom}(H_\omega)$.

De là, pour $\lambda \in \mathbb{R}^*$,

$$h_\alpha - i\lambda = \left(1 + (W_\omega + K)(D_S - i\lambda)^{-1}\right) (D_S - i\lambda)$$

où $W_\omega = V_0 + V_\omega$. Comme $(W_\omega + K)$ est borné indépendamment de ω et λ , on voit que pour λ assez grand $\|(D_S - i\lambda)^{-1}(W_\omega + K)\| < 1$ donc $h_\alpha - i\lambda$ est inversible. En outre,

$$(h_\alpha - i\lambda)^{-1} = (D_S - i\lambda)^{-1} \left(1 + (W_\omega + K)(D_S - i\lambda)^{-1}\right)^{-1}. \quad (\text{II.3.14})$$

Par un argument standard, on peut montrer l'identité suivante

$$\langle \cdot \rangle^{-\alpha} (h_\alpha - i\lambda)^{-1} = (H_\omega - i\lambda)^{-1} \langle \cdot \rangle^{-\alpha},$$

qui, jointe à (II.3.14), implique que :

$$\langle \cdot \rangle^\alpha (H_\omega - i\lambda)^{-1} \langle \cdot \rangle^{-\alpha} = (D_S - i\lambda)^{-1} \left(1 + (W_\omega + K)(D_S - i\lambda)^{-1}\right)^{-1}. \quad (\text{II.3.15})$$

L'idée est d'écrire l'opérateur $(H_\omega - i\lambda)^{-d} T^{-1}$ comme produit de d facteurs, chacun d'entre eux appartenant à \mathcal{T}_{2d} . Afin de simplifier les notations, nous désignerons $(H_\omega - i\lambda)^{-1}$ par r et $T^{-1/d}$ par t^{-1} . Nous obtenons alors par récurrence :

$$\begin{aligned} (H_\omega - i\lambda)^{-d} T^{-1} &= r^d t^{-d} = r^{d-1} t^{-(d-1)} \{t^{-1} t^d r t^{-d}\} \\ &= \prod_{j=1}^d t^{-1} t^j r t^{-j}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.16})$$

Pour chaque j , on peut poser $\alpha = 2\nu j/d$ et, grâce à (II.3.15), on obtient :

$$t^{-1} t^j r t^{-j} = \langle \cdot \rangle^{-2\nu/d} (D_S - i\lambda)^{-1} \times U_j,$$

où U_j est un opérateur borné dont la norme est indépendante de ω . La fonction $\mathbf{x} \mapsto \langle \mathbf{x} \rangle^{-2\nu/d}$ appartient à $L^{2d}(\mathbb{R}^d)$ lorsque $\nu > d/4$. Ainsi, en reprenant le raisonnement de la remarque II.34(iii), on trouve que $(H_\omega - i\lambda)^{-d} T^{-1}$ est Hilbert-Schmidt avec une norme indépendante de ω . Cela prouve (SGEE) et permet donc de conclure la preuve du théorème II.41. □

Preuve de (W) et (NE) Soit $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d, L \in 2\mathbb{N}, \Lambda = \Lambda_L(\mathbf{x})$. On notera $\tilde{\Lambda} = \Lambda \cap \mathbb{Z}^d$. Afin d'alléger les notations, on notera $H_{\omega, \Lambda} = H_{\omega, \mathbf{x}, L}, V_{\omega, \Lambda} = V_{\omega, \mathbf{x}, L}$ et $E_{\omega, \Lambda} = E_{\omega, \mathbf{x}, L}$ le projecteur spectral. Nous démontrons dans ce paragraphe que l'opérateur $H_{\omega, \mathbf{x}, L}$ vérifie les propriétés (W) et (NE). Plus précisément, nous prouvons le théorème suivant.

Théorème II.42 (Inégalité de Wegner). *Supposons que les hypothèses II.29 et II.33(i)-(iii) soient vérifiées et , pour $E_0 \in]B_-, B_+[$ et $\eta < \frac{1}{2}\text{dist}(E_0, \sigma(H_0))$, notons $I_\eta(E_0) = [E_0 - \eta, E_0 + \eta]$. Pour tout sous-intervalle compact J de $]B_-, B_+[$, il existe une constante C_J telle que pour tout $E_0 \in J$*

$$\mathbb{E}(\text{tr}(E_{\omega, \Lambda}(I_\eta(E_0)))) \leq C_J \eta |\Lambda|.$$

Remarque II.43. Cette inégalité implique trivialement (NE). Par l'inégalité de Tchebychev, elle implique (W) avec $b = 1$.

La résolvante de H_0 au point $z \in \rho(H_0)$ sera notée $R_0(z)$. Fixons $E_0 \in]B_-, B_+[$ et notons $R_0 := R_0(E_0)$. Nous avons alors le résultat suivant :

Proposition II.44. *Supposons que E_0 appartient à un compact I dans la lacune. Notons*

$$K_{\{i\}} = u_{i_1} R_0 u_{i_2} R_0 \cdots u_{i_{q-1}} R_0^2 u_{i_q},$$

étant donné un q -uplet $\{i\}$ pour q un entier pair strictement plus grand que $2d$. Sous les hypothèses II.29 et II.33 (iii) sur $V_{\omega, x, L}$, il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout $E_0 \in I$ on a

$$\sum_{i_1, \dots, i_q \in \tilde{\Lambda}} \|K_{\{i\}}\|_1 \leq C |\Lambda|. \quad (\text{II.3.17})$$

La preuve de cette proposition utilise les deux lemmes suivants de type « Combes-Thomas ». Leur preuve figure dans l'appendice D.

Lemme II.45. *Fixons un intervalle compact $I \subset]B_-, B_+[$. Il existe deux constantes $\alpha > 0$ et $C < \infty$ telles que, pour tout $E \in I$ et toute paire de fonctions bornées χ_1 et χ_2 avec $\|\chi_i\|_\infty \leq 1$ pour $i = 1, 2$ et χ_1 à support compact, telles que la distance entre leurs supports est $a \geq 0$, on a :*

$$\|\chi_1(H_0 - E)^{-1} \chi_2\| \leq C |\text{supp}(\chi_1)| e^{-\alpha a}. \quad (\text{II.3.18})$$

Le deuxième lemme est une majoration semblable pour la norme trace :

Lemme II.46. *Soit $a_0 > 0$. Avec les mêmes notations que dans le lemme II.45, supposons que $a \geq a_0$. Alors l'opérateur $\chi_1(H_0 - E)^{-1} \chi_2$ est à trace. De plus, il existe deux constantes $D > 0$ et $\alpha > 0$ telles que pour tout $E \in I$ et toutes χ_1, χ_2 vérifiant les hypothèses du lemme II.45 on a*

$$\|\chi_1(H_0 - E)^{-1} \chi_2\|_1 \leq D |\text{supp}(\chi_1)| e^{-\alpha a}. \quad (\text{II.3.19})$$

Preuve de la proposition II.44. L'inégalité (II.3.17) est également prouvée dans [4, Proposition 7.2] pour des opérateurs de Schrödinger sous l'hypothèse que (II.3.18) et (II.3.19) soient vérifiées, bien que les auteurs ne considèrent pas les centres mobiles $\xi_i(\omega)$.

Nous omettrons ici les détails de la preuve étant donné qu'il s'agit d'une adaptation directe de celle de [4, Proposition 7.2] une fois que les lemmes II.45 et II.46 sont donnés.

L'élément-clé de cette preuve est que u a un support compact. Ainsi, si l'on fixe un des indices, disons i_1 , l'opérateur $K_{\{i\}}$ est à trace et $\sum_{i_2, \dots, i_q \in \tilde{\Lambda}} \|K_{\{i\}}\|_1$ est borné par une constante réelle, uniformément sur tout compact dans la lacune. Notons que si deux potentiels élémentaires consécutifs u_{i_j} et $u_{i_{j+1}}$ ont des supports qui se chevauchent, on utilise le fait que $u_{i_j} R_0 \in \mathcal{T}_{2d}$, sinon on applique (II.3.19) et on montre que la série converge grâce à la décroissance exponentielle. Enfin, on utilise le fait que le nombre de termes u_{i_1} est proportionnel à la mesure de Lebesgue de Λ . \square

Dans la démonstration du théorème II.42, on utilisera le résultat de moyennisation spectrale suivant montré dans [14, corollaire 4.2].

Proposition II.47. *Soit $H(\lambda) = H_0 + \lambda V$ une famille d'opérateurs auto-adjoints sur un espace de Hilbert \mathcal{H} où V est borné et vérifie*

$$0 \leq c_0 B^2 \leq V$$

pour un certain $c_0 > 0$ et un certain opérateur auto-adjoint borné B . Soit E_λ la famille spectrale associée à $H(\lambda)$. Alors, pour tout borélien $J \subset \mathbb{R}$ et toute fonctions $h \in L^\infty$ à support compact, $h \geq 0$,

$$\left\| \int_{\mathbb{R}} h(\lambda) B E_\lambda(J) B d\lambda \right\| \leq c_0^{-1} \|h\|_\infty |J|.$$

Preuve du théorème II.42. La preuve est très proche de celle de [4] mais elle nécessite quelques changements techniques. Nous la donnerons donc ici intégralement.

Soit J un sous-intervalle compact de $]B_-, B_+]$. On rappelle que si $H_{\omega,\Lambda} \psi_E = E \psi_E$, $E \in I_\eta(E_0)$, on a

$$K_0(E_0) \psi_E = -\psi_E + R_0(E_0) (H_{\omega,\Lambda} - E_0) \psi_E,$$

où $K_0(E_0) := R_0(E_0) V_{\omega,\Lambda}$. Lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté, on omettra d'indiquer la dépendance en E_0 . De là,

$$E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) = -K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) + R_0(H_{\omega,\Lambda} - E_0) E_{\omega,\Lambda}(I_\eta). \quad (\text{II.3.20})$$

Ainsi, comme $E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)$ est un opérateur à trace positif,

$$\begin{aligned} \text{tr}(E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)) &= \|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_1 \\ &\leq |\text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta))| + \eta \|R_0\| \|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_1, \end{aligned}$$

et, puisque $\eta \leq \frac{1}{2} \text{dist}(E_0, \sigma(H_0))$, on a

$$\text{tr}(E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)) \leq 2 |\text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta))|. \quad (\text{II.3.21})$$

Une première conséquence de l'inégalité (II.3.21) est que, par l'inégalité de Hölder avec q comme dans la proposition II.44 et $1/p + 1/q = 1$,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_1) &\leq 2 \mathbb{E}(\|K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_1) \leq 2 \mathbb{E}(\|K_0\|_q \|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_p) \\ &\leq 2 \left\{ \mathbb{E}(\|K_0\|_q^q) \right\}^{1/q} \left\{ \mathbb{E}(\|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_p^p) \right\}^{1/p}, \end{aligned} \quad (\text{II.3.22})$$

où $\|\cdot\|_q$ désigne la norme dans la classe de Schatten \mathcal{T}_q .

Comme $q \geq 2d$, conformément à (II.3.7) nous trouvons qu'il existe une constante C telle que pour tout $E_0 \in J$ on a

$$\|K_0(E_0)\|_q \leq C \|V_{\omega,\Lambda}\|_{L^q} \leq C M_\infty |\Lambda|^{1/q} \quad (\text{II.3.23})$$

où M_∞ est défini par (II.3.8).

À partir de cette inégalité, du fait que $\mathbb{E}(\|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_p^p) = \mathbb{E}(\|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_1)$ (conséquence du fait que les valeurs propres non nulles du projecteur spectral sont toutes égales à un) et de (II.3.22), on obtient :

$$\mathbb{E}(\|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta(E_0))\|_1) \leq C |\Lambda|, \quad (\text{II.3.24})$$

pour tout $E_0 \in J$, ce qui en particulier conclut la preuve de (NE).

Maintenant, on utilise l'adjoint de la formule (II.3.20) pour obtenir

$$K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) = -K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) K_0^* + K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) (H_{\omega,\Lambda} - E_0) R_0,$$

ce qui implique

$$\begin{aligned} |\text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta))| &\leq \|K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_1 \\ &\leq \text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) K_0^*) + \eta \|R_0\| \|K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_1. \end{aligned} \quad (\text{II.3.25})$$

De là, grâce à (II.3.21) et au fait que $\eta \leq \frac{1}{2} \text{dist}(E_0, \sigma(H_0))$, on trouve que

$$\mathbb{E}(\text{tr}(E_{\omega,\Lambda}(I_\eta))) \leq 4 \mathbb{E}(\text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) K_0^*)).$$

Si $q > 2$, on continue cette procédure en écrivant :

$$K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) K_0^* = -K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) (K_0^*)^2 + K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) (H_{\omega,\Lambda} - E_0) R_0 K_0^*. \quad (\text{II.3.26})$$

On a, par l'inégalité de Hölder,

$$\begin{aligned} |\text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) (H_{\omega,\Lambda} - E_0) R_0 K_0^*)| &\leq \|K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) (H_{\omega,\Lambda} - E_0) R_0 K_0^*\|_1 \\ &\leq \eta \|R_0\| \|K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_{q/(q-1)} \|K_0^*\|_q \\ &\leq \eta \|R_0\| \|K_0\|_q^2 \|E_{\omega,\Lambda}(I_\eta)\|_{q/(q-2)}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.27})$$

En prenant l'espérance puis en appliquant encore l'inégalité de Hölder, les inégalités (II.3.23) et (II.3.24), on peut majorer l'espérance du premier membre de (II.3.27) par $C\eta|\Lambda|$, où C est une constante indépendante de η , $|\Lambda|$ et $E_0 \in J$. Par conséquent, les équations (II.3.25)-(II.3.27) impliquent

$$\mathbb{E}(\text{tr}(E_{\omega,\Lambda}(I_\eta))) \leq 4 \mathbb{E}(|\text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) (K_0^*)^2)|) + C\eta|\Lambda|.$$

Si $q > 3$, on recommence une fois de plus. Au bout du compte, on obtient

$$\mathbb{E}(\text{tr}(E_{\omega,\Lambda}(I_\eta))) \leq 4 \mathbb{E}(|\text{tr}(K_0 E_{\omega,\Lambda}(I_\eta) (K_0^*)^{q-1})|) + C\eta|\Lambda|, \quad (\text{II.3.28})$$

où C est indépendant de η , $|\Lambda|$ et $E_0 \in J$.

Pour majorer le premier terme du second membre de (II.3.28), on développe le potentiel $V_\Lambda = \sum_{i \in \tilde{\Lambda}} \lambda_i u_i(\cdot - \xi_i)$. Dans le reste de la preuve, par abus de notation, on désignera $u_i(\cdot - \xi_i)$ par u_i . En outre, on fixera les valeurs de tous les ξ_i et on prendra l'espérance uniquement par rapport aux variables λ_i . Pour chaque q -uplet d'indices $\{\mathbf{i}\} := (i_1, \dots, i_q) \in \tilde{\Lambda}^q$, on définit :

$$K_{\{\mathbf{i}\}} := K_{i_1 \dots i_q} := u_{i_2}^{\frac{1}{2}} R_0 u_{i_3} R_0 u_{i_4} \cdots u_{i_q} R_0^2 u_{i_1}^{\frac{1}{2}}.$$

Par l'inégalité de Hölder dans les idéaux de trace [58, théorème 2.8], $K_{i_1 \dots i_q} \in \mathcal{T}_1$. Pour faire apparaître cet opérateur dans le premier terme du second membre de (II.3.28), on utilise la cyclicité de la trace et on obtient

$$\begin{aligned} & \mathbb{E} \left(\left| \text{tr}(K_0 E_{\omega, \Lambda}(I_\eta)(K_0^*)^{q-1}) \right| \right) \\ &= \mathbb{E} \left\{ \sum_{i_1, \dots, i_q \in \tilde{\Lambda}} \lambda_{i_1}(\omega) \cdots \lambda_{i_q}(\omega) \text{tr} \left\{ K_{\{i\}}(u_{i_1}^{\frac{1}{2}} E_{\omega, \Lambda}(I_\eta) u_{i_2}^{\frac{1}{2}}) \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.29})$$

Comme $K_{\{i\}}$ est compact, on peut écrire sa décomposition en valeurs singulières. Pour chaque multi-indice $\{i\}$, il existe une paire de bases orthonormées, $\{\phi_k^{\{i\}}\}$ et $\{\psi_k^{\{i\}}\}$, et des nombres positifs $\{\mu_k^{\{i\}}\}$, tous indépendants de ω , tels que

$$K_{\{i\}} = \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k^{\{i\}} |\phi_k^{\{i\}}\rangle \langle \psi_k^{\{i\}}|. \quad (\text{II.3.30})$$

En insérant la décomposition (II.3.30) dans (II.3.29) et en développant la trace dans $\{\phi_k^{\{i\}}\}$, on obtient

$$\mathbb{E} \left\{ \sum_{\{i\} \in \tilde{\Lambda}^q} \sum_{k \geq 1} \lambda_{\{i\}}(\omega) \mu_k^{\{i\}} \langle \psi_k^{\{i\}}, (u_{i_1}^{\frac{1}{2}} E_{\omega, \Lambda}(I_\eta) u_{i_2}^{\frac{1}{2}}) \phi_k^{\{i\}} \rangle \right\}, \quad (\text{II.3.31})$$

où $\lambda_{\{i\}}(\omega) := \lambda_{i_1}(\omega) \cdots \lambda_{i_q}(\omega)$. Puisque $E_{\omega, \Lambda}(I_\eta) \geq 0$, on peut majorer la somme par rapport à k dans (II.3.31) par

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{k \geq 1} \mu_k^{\{i\}} \mathbb{E} \left\{ |\lambda_{\{i\}}(\omega)| \langle \psi_k^{\{i\}}, (u_{i_1}^{\frac{1}{2}} E_{\omega, \Lambda}(I_\eta) u_{i_1}^{\frac{1}{2}}) \psi_k^{\{i\}} \rangle \right. \\ & \quad \left. + |\lambda_{\{i\}}(\omega)| \langle \phi_k^{\{i\}}, (u_{i_2}^{\frac{1}{2}} E_{\omega, \Lambda}(I_\eta) u_{i_2}^{\frac{1}{2}}) \phi_k^{\{i\}} \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.32})$$

Les λ_i étant indépendantes, le lemme de moyennisation spectrale (proposition II.47) appliqué à chacun des termes de (II.3.32) donne pour le premier terme :

$$\mathbb{E} \left\{ |\lambda_{\{i\}}(\omega)| \langle \psi_k^{\{i\}}, (u_{i_1}^{\frac{1}{2}} E_{\omega, \Lambda}(I_\eta) u_{i_1}^{\frac{1}{2}}) \psi_k^{\{i\}} \rangle \right\} \leq C_1 \eta. \quad (\text{II.3.33})$$

où C_1 est fini, indépendant de k et indépendant de E_0 au vu de l'hypothèse 2(i). À partir des inégalités (II.3.29), (II.3.32) et (II.3.33), on obtient une majoration pour le premier terme du membre de droite de (II.3.28) :

$$\mathbb{E}(\text{tr}(E_{\omega, \Lambda}(I_\eta))) \leq C_1 \eta \sum_{i_1, \dots, i_q \in \tilde{\Lambda}} (\|K_{\{i\}}\|_1). \quad (\text{II.3.34})$$

L'application de la proposition II.44 nous permet de majorer cette série par une constante multipliée par la mesure de Lebesgue de Λ , ce qui permet de conclure la preuve de l'inégalité de Wegner et du théorème. \square

Remarque II.48. Pour utiliser le théorème II.25 ([40, théorème 5.4, p. 136]) dans la preuve des théorèmes II.38, II.39 et II.41, il aurait suffi d'avoir une inégalité de Wegner

avec $|\Lambda|$ élevé à une puissance supérieure. On aurait pu montrer directement, à partir de (II.3.7) et de l'inégalité de Hölder pour les idéaux de trace, que

$$\sum_{i_1, \dots, i_q \in \tilde{\Lambda}} \|K_{\{i\}}\|_1 \leq C|\Lambda|^q.$$

De cette façon, nous n'aurions pas eu à utiliser la proposition II.44.

Nous tenions cependant à obtenir l'inégalité avec une puissance 1 car elle nous permettra d'obtenir des informations sur la densité d'états que l'on présentera dans la section II.3.3.

Preuve de la décroissance initiale (H1(θ, E_0, L_0)) Dans ce paragraphe, il s'agit de démontrer que

$$\mathbb{P} \left\{ \|\Gamma_{\mathbf{0}, L_0} R_{\omega, \mathbf{0}, L_0}(E_0) \chi_{\mathbf{0}, L_0/3}\| \leq \frac{1}{L_0^\theta} \right\} > 1 - \frac{1}{841^d}$$

pour E_0 suffisamment proche du bord des bandes \tilde{B}_\pm , un certain $\theta > d$ et L_0 assez grand. Comme dans [4], nous commencerons par prouver que, pour $\delta > 0$ assez petit, $\text{dist}(\sigma(H_{\omega, x, L}), \tilde{B}_\pm) > \delta$ avec une bonne probabilité. On pourra alors appliquer le lemme D.1 pour obtenir la décroissance exponentielle de la résolvante aux énergies $E \in]\tilde{B}_- - \delta/2, \tilde{B}_-] \cup [\tilde{B}_+, \tilde{B}_+ + \delta/2[$. On pourra alors montrer H1(θ, E_0, L_0) pour tout $\theta > 0$, $E_0 \in]\tilde{B}_- - \delta/2, \tilde{B}_-] \cup [\tilde{B}_+, \tilde{B}_+ + \delta/2[$ et $L_0 > L_0^*$ pour un certain L_0^* dépendant seulement de $\theta, d, B_\pm, \tilde{B}_\pm, \delta, M, m$ et M_∞ .

Comme dans la section précédente, on pose $\Lambda = \Lambda_L(\mathbf{0})$ pour un certain $L \in 2\mathbb{N}$. On notera $\tilde{\Lambda} = \Lambda \cap \mathbb{Z}^d$, $H_{\omega, \Lambda} = H_{\omega, \mathbf{0}, L}$, $V_{\omega, \Lambda} = V_{\omega, \mathbf{0}, L}$.

Lemme II.49. Soit $\mu = \mu_{\omega_0, \Lambda} \in \sigma(H_{\omega_0, \Lambda}) \cap]B_-, B_+[$ pour un certain $\omega_0 \in \Omega$. Alors $\mu \in \Sigma$.

Démonstration. C'est tout simplement (II.3.9). On pourra trouver une autre preuve dans [4, lemme 5.1] qui s'adapte facilement aux opérateurs d'ordre 1. \square

Proposition II.50. Soit $\delta_\pm = \frac{1}{2}|\tilde{B}_\pm - B_\pm|$ et $0 < \delta < \frac{1}{2}M_\infty^{-1} \min(\delta_+, \delta_-)^2$. Supposons que

$$\forall i \in \tilde{\Lambda}, \quad -(1 - \delta M_\infty \min(\delta_+, \delta_-)^{-2})m < \lambda_i(\omega) < (1 - \delta M_\infty \min(\delta_+, \delta_-)^{-2})M.$$

Alors on a

$$\sup \left\{ \sigma(H_{\omega, \Lambda}) \cap]-\infty, \tilde{B}_-[\right\} < \tilde{B}_- - \delta$$

et

$$\inf \left\{ \sigma(H_{\omega, \Lambda}) \cap]\tilde{B}_+, +\infty[\right\} > \tilde{B}_+ + \delta.$$

Démonstration. Nous montrerons seulement la première inégalité ; la preuve de la seconde est semblable.

Supposons que cet énoncé soit faux, c'est-à-dire qu'il existe Λ et des valeurs des paramètres $\lambda_i(\omega)$ et $\xi_i(\omega)$ telles que $H_{\omega, \Lambda}$ possède du spectre dans $[\tilde{B}_- - \delta, \tilde{B}_-]$. Cet opérateur étant une perturbation relativement compacte de H_0 , cela revient à dire qu'il a une valeur propre dans cet intervalle que l'on notera μ . Si l'une des constantes de couplage λ_i est strictement négative, disons $\lambda_{\mathbf{0}} < 0$, alors on peut considérer la famille

$$H(\lambda) := D_S + \lambda u(\cdot - \xi_{\mathbf{0}}(\omega)) + \sum_{i \neq \mathbf{0}, i \in \tilde{\Lambda}} \lambda_i(\omega) u(\cdot - \xi_i(\omega) - \mathbf{i}), \quad \lambda \in [\lambda_{\mathbf{0}}(\omega), 0].$$

On a que $H(\lambda)$ est une famille auto-adjointe analytique de type (A) (cf. [34, VII,§2]) ; ainsi toutes ses valeurs propres discrètes $E_n(\lambda)$ dans l'intervalle $[\tilde{B}_- - \delta, \tilde{B}_-]$ sont des fonctions analytiques réelles de λ . De plus, on peut construire des familles analytiques réelles de vecteurs propres $\psi_n(\lambda)$ associés à chacune d'elles. La formule de Feynman-Hellmann et l'hypothèse II.33(iii) donnent :

$$E'_n(\lambda) = \langle \psi_n(\lambda), u(\cdot - \boldsymbol{\xi}_0(\omega))\psi_n(\lambda) \rangle \geq 0,$$

ce qui montre que $H(\lambda)$ continuera à avoir des valeurs propres dans $[\tilde{B}_- - \delta, \tilde{B}_-]$ jusqu'à ce que $\lambda = 0$. Par récurrence, on peut remplacer tous les λ_i négatifs par zéro en conservant le fait que l'opérateur H_ω , cette fois avec $V_{\omega,\Lambda} \geq 0$, a au moins une valeur propre $\mu \in [\tilde{B}_- - \delta, \tilde{B}_-]$.

Supposons donc maintenant que $V_{\omega,\Lambda} \geq 0$ et considérons la famille analytique de type (A) $T(\vartheta) := H_0 + \vartheta V_{\omega,\Lambda}$, pour ϑ dans un voisinage réel de $\vartheta_0 = 1$. Comme μ a une multiplicité finie, disons n , il y a au plus n fonctions $\mu^{(k)}(\vartheta)$ analytiques en ϑ près de $\vartheta_0 = 1$ telles que $\mu^{(k)}(1) = \mu$. Soit $\phi^{(k)}(\vartheta)$ une famille analytique réelle de fonctions propres associées à $\mu^{(k)}(\vartheta)$, avec $\|\phi^{(k)}(\vartheta)\| = 1$ pour ϑ réel et $|\vartheta - 1|$ petit. En appliquant la formule de Feynman-Hellmann, on trouve que pour ϑ tel que $\vartheta V_{\omega,\Lambda} \leq M_\infty$

$$\begin{aligned} \frac{d\mu^{(k)}(\vartheta)}{d\vartheta} &= \langle \phi^{(k)}(\vartheta), V_{\omega,\Lambda} \phi^{(k)}(\vartheta) \rangle \geq \vartheta^{-1} M_\infty^{-1} \|\vartheta V_{\omega,\Lambda} \phi^{(k)}(\vartheta)\|^2 \\ &= \vartheta^{-1} M_\infty^{-1} \left\| (H_0 - \mu_\vartheta^{(k)}) \phi^{(k)}(\vartheta) \right\|^2 \geq \vartheta^{-1} M_\infty^{-1} \left(\text{dist}(\sigma(H_0), \mu_\vartheta^{(k)}) \right)^2. \end{aligned} \quad (\text{II.3.35})$$

Supposons maintenant que $\lambda_i(\omega) < (1 - \delta M_\infty [\min(\delta_+, \delta_-)]^{-2})M, \forall i \in \tilde{\Lambda}$, et posons

$$\vartheta_1 = \min_{i \in \tilde{\Lambda}} \left(\frac{M}{\lambda_i(\omega)} \right) \geq \left(1 - \delta M_\infty [\min(\delta_+, \delta_-)]^{-2} \right)^{-1} > 1. \quad (\text{II.3.36})$$

On voit que, d'après la définition de ϑ_1 , la condition $\vartheta V_{\omega,\Lambda} \leq M_\infty$ est vérifiée dans l'intervalle $[1, \vartheta_1]$.

En intégrant (II.3.35) sur $[1, \vartheta_1]$ et en constatant que $\mu \leq \mu^{(k)}(\vartheta) \leq \mu^{(k)}(\vartheta_1)$, on trouve :

$$\mu^{(k)}(\vartheta_1) \geq \mu + (\log \vartheta_1) M_\infty^{-1} \min \left\{ \left[\text{dist}(\mu^{(k)}(\vartheta_1), \sigma(H_0)) \right]^2, \left[\text{dist}(\mu, \sigma(H_0)) \right]^2 \right\}.$$

Il faut maintenant majorer le minimum des distances. Comme les différentes grandeurs sont toujours dans l'ordre suivant

$$B_- < \mu \leq \mu^{(k)}(\vartheta_1) \leq \tilde{B}_- < \tilde{B}_+ < B_+,$$

il y a seulement deux possibilités :

- soit le minimum est $\text{dist}(\mu^{(k)}(\vartheta_1), \sigma(H_0))$ et alors il vaut $B_- - \mu^{(k)}(\vartheta_1) > 2\delta_+$.
- soit le minimum est $\text{dist}(\mu, \sigma(H_0))$ et alors il vaut $\mu - B_-$. Comme $\mu > \tilde{B}_- - \delta$, cette distance est plus grande que $\tilde{B}_- - \delta - B_- = 2\delta_- - \delta$. Comme $\delta < \frac{1}{2} M_\infty^{-1} \delta_-^2$, la distance est plus grande que $\delta_- (2 - \frac{1}{2} M_\infty^{-1} \delta_-)$. D'après le lemme C.2 avec $A - B = V_\omega$ et $\|V_\omega\| \leq M_\infty$, on doit avoir $2\delta_- \leq M_\infty$ donc la distance est plus grande que $\frac{3}{2} \delta_-$.

Ainsi, le minimum est plus grand que $\frac{3}{2} \min(\delta_+, \delta_-)$. En appliquant l'inégalité $-\log(1-x) \geq x$ avec $x = 1 - \vartheta_1^{-1}$, on obtient à partir de (II.3.36) :

$$\log(\vartheta_1) \geq 1 - \vartheta_1^{-1} = \delta M_\infty [\min(\delta_+, \delta_-)]^{-2}$$

ce qui donne que $\mu^{(k)}(\vartheta_1) > \tilde{B}_-$, ce qui contredit la définition de \tilde{B}_- . \square

Corollaire II.51. Pour $0 < \delta < \frac{1}{2}M_\infty^{-1} \min(\delta_+, \delta_-)$, on a

$$\sup \left(\sigma(H_{\omega, \Lambda}) \cap] - \infty, \tilde{B}_- [\right) < \tilde{B}_- - \delta$$

et

$$\inf \left(\sigma(H_{\omega, \Lambda}) \cap] \tilde{B}_+, +\infty [\right) > \tilde{B}_+ + \delta,$$

avec une probabilité supérieure à

$$1 - 2|\Lambda| \max_{X \in \{-m, M\}} \left| \int_{(1-\delta M_\infty \min(\delta_+, \delta_-)^{-2})X}^X h(s) ds \right|.$$

Démonstration. La probabilité que

$$\forall i \in \tilde{\Lambda}, \quad -(1 - \delta M_\infty \min(\delta_+, \delta_-)^{-2})m < \lambda_i(\omega) < (1 - \delta M_\infty \min(\delta_+, \delta_-)^{-2})M$$

est donnée par

$$\left[1 - \int_{(1-\delta M_\infty [\min(\delta_+, \delta_-)]^{-2})M}^M h(s) ds - \int_{-m}^{-(1-\delta M_\infty [\min(\delta_+, \delta_-)]^{-2})m} h(s) ds \right]^{|\Lambda|}.$$

La conclusion vient directement en remarquant que $(1-x)^\alpha \geq 1 - \alpha x$ pour $\alpha > 1$ et $x \in [0, 1]$. \square

On peut maintenant montrer que notre opérateur vérifie l'hypothèse $(H1(\theta, E_0, L_0))$.

Proposition II.52. Soit $\chi_i, i = 1, 2$, deux fonctions avec $\|\chi_i\|_\infty \leq 1$, $\text{supp}(\chi_1) \subset \Lambda_{L_0/3}$ et $\text{supp}(\chi_2) \subset \Lambda_{L_0}$ tels que $\sup_{x \in \text{supp}(\chi_2)} \text{dist}(x, \partial\Lambda_{L_0}) < L_0/8$. Posons $\delta_\pm := \frac{1}{2}|\tilde{B}_\pm - B_\pm|$. Pour $\beta > 0$ comme dans l'hypothèse II.33 (iv), prenons $\nu > 0$ tel que $0 < \nu < 4\beta(2\beta + d)^{-1} < 2$. Alors il existe L_0^* tel que pour tous $L_0 > L_0^*$ et $E_0 \in]\tilde{B}_- - L_0^{\nu-2}, \tilde{B}_- [\cup]\tilde{B}_+, \tilde{B}_+ + L_0^{\nu-2}[$,

$$\sup_{\epsilon > 0} \|\chi_2 R_{\Lambda_{L_0}}(E_0 + i\epsilon)\chi_1\| \leq e^{-L_0^{\nu/3}},$$

avec une probabilité supérieure à $1 - \frac{1}{841^d}$.

Démonstration. Posons $\delta = 2L_0^{\nu-2}$. Pour L_0 assez grand, on a $\delta < \frac{1}{2}M_\infty^{-1} \min(\delta_+, \delta_-)^2$, ainsi, l'hypothèse II.33(iv), le corollaire II.51 et le fait que $0 < \nu < 4\beta(2\beta + d)^{-1}$ donnent que

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left\{ \text{dist}(\sigma(H_{\omega, \mathbf{0}, L_0}), \tilde{B}_\pm) > \delta \right\} &\geq 1 - 2L_0^d \left(\max(m, M) \delta M_\infty \min(\delta_+, \delta_-)^{-2} \right)^{\frac{d}{2} + \beta} \\ &\geq 1 - \frac{1}{841^d}, \end{aligned}$$

pour L_0 assez grand.

Considérons une réalisation de $H_{\omega, \mathbf{0}, L_0}$ telle que $\text{dist}(\sigma(H_{\omega, \mathbf{0}, L_0}), \tilde{B}_\pm) > \delta = 2L_0^{\nu-2}$ et prenons $E_0 \in]\tilde{B}_- - L_0^{\nu-2}, \tilde{B}_- [\cup]\tilde{B}_+, \tilde{B}_+ + L_0^{\nu-2}[$. On peut appliquer le lemme D.1 avec $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$, sachant que, pour a_1 et a_2 définis dans le lemme D.1, on a $a_2 - a_1 \geq L_0/8$. On trouve

$$\|\chi_2 R_{\Lambda_{L_0}}(E + i\epsilon)\chi_1\| \leq \frac{2}{L_0^{\nu-2}} \exp \left(-c \frac{L_0^{\nu/2-1}}{2} |\tilde{B}_+ - \tilde{B}_-|^{1/2} \frac{L_0}{8} \right).$$

Le résultat s'ensuit en prenant L_0 assez grand. \square

La propriété $(H1(\theta, E_0, L_0))$ découle directement de la proposition précédente car $\chi_{\mathbf{0}, L_0/3}$ et $\Gamma_{\mathbf{0}, L_0}$ vérifient ses hypothèses et $e^{-L_0^{\nu/3}} \leq \frac{1}{L_0^\theta}$ quand $L_0 > \mathcal{L}_\theta$ pour un certain \mathcal{L}_θ .

II.3.3 Résultat sur la densité d'états

Dans cette section, nous montrons la régularité lipschitzienne de la densité d'états pour le hamiltonien étudié ci-dessus. Nous utilisons l'inégalité de Wegner donnée par le théorème II.42 pour obtenir la régularité. Nous mettons en œuvre une nouvelle méthode utilisant la formule de Helffer-Sjöstrand pour prouver le résultat. Ce genre de résultat est habituellement présenté sous le nom de « régularité lipschitzienne de la densité d'états intégrée ». Néanmoins, comme notre opérateur n'est pas borné inférieurement, nous ne pouvons pas réellement définir la densité d'états intégrée. On pourra trouver une synthèse sur la densité d'états pour les opérateurs aléatoires dans [38].

Dans toute la suite, H_ω sera l'opérateur de type Dirac avec potentiel aléatoire donné par l'équation (II.3.6). On suppose que les hypothèses II.29 et II.33 (i)-(iii) sont vérifiées. Les propriétés essentielles pour cette preuve seront d'une part l'inégalité de Wegner (théorème II.42) et d'autre part l'inégalité de Combes-Thomas en norme trace suivante qui est très proche du lemme II.46 et dont la preuve sera donnée en annexe.

Lemme II.53 (Inégalité de Combes-Thomas). *Fixons E_m et $Y > 0$. Pour tous E, y tels que $|E| \leq E_m$, $0 < |y| \leq Y$ et toute paire de fonctions bornées χ_1 et χ_2 avec $\|\chi_i\|_\infty \leq 1$ pour $i = 1, 2$ et χ_1 à support compact, telles que la distance entre leurs supports est $a \geq 10$, l'opérateur $\chi_1(H_\omega - E - iy)^{-1}\chi_2$ est à trace.*

De plus, il existe deux constantes $D > 0$ et $\alpha > 0$ telles que pour tous E, y, χ_1, χ_2 vérifiant ces hypothèses et tout $\omega \in \Omega$, on a

$$\|\chi_1(H_\omega - E - iy)^{-1}\chi_2\|_1 \leq \frac{D}{|y|^{2d+1}} |\text{supp}(\chi_1)| e^{-\alpha|y|^a}. \quad (\text{II.3.37})$$

Notre définition de la densité d'états est légèrement différente de celle de la section I.1.3. Nous n'aurons besoin dans la définition que de boîtes centrées à l'origine du repère, aussi nous noterons Λ_L pour $\Lambda_L(\mathbf{0})$, χ_L pour $\chi_{\mathbf{0},L}$, $H_{\omega,L}$ pour $H_{\omega,\mathbf{0},L}$.

Pour toute fonction positive d'une variable réelle mesurable bornée à support compact ϕ , tous $\omega \in \Omega$ et $L \in \mathbb{N}$, on définit

$$\nu_{\omega,L}(\phi) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L).$$

Lemme II.54. *$\lim_{L \rightarrow \infty} \nu_{\omega,L}(\phi)$ existe et est presque sûrement indépendante de ω . De plus, la convergence est aussi dans $L^1(\Omega)$.*

Démonstration. On peut écrire χ_L comme $\sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^d \cap \Lambda_L} \chi_\gamma$ où on rappelle que χ_γ est la fonction indicatrice de $\Lambda_1(\gamma)$. De même, $\chi_{\mathbf{0}}$ désignera la fonction indicatrice de $\Lambda_1(\mathbf{0})$.

On a alors

$$\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L = \sum_{\gamma, \gamma' \in \mathbb{Z}^d \cap \Lambda_L} \chi_\gamma \phi(H_\omega) \chi_{\gamma'}.$$

Montrons que pour tout γ $\chi_\gamma \phi(H_\omega) \in \mathcal{T}_1$.

Manifestement, on a que pour $\lambda > 0$

$$\chi_\gamma \phi(H_\omega) = \chi_\gamma (H_\omega + i\lambda)^{-2d} (H_\omega + i\lambda)^{2d} \phi(H_\omega).$$

Comme ϕ est à support compact, il est facile de voir que pour $\lambda > 0$ l'opérateur $(H_\omega + i\lambda)^{2d} \phi(H_\omega)$ est borné. Soit T^{-1} l'opérateur de multiplication par $\langle \mathbf{x} \rangle^{-2d}$. Comme dans la preuve de (SGEE) dans la section précédente, on montre que pour λ assez grand

$T^{-1}(H_\omega + i\lambda)^{-2d} \in \mathcal{T}_1$ avec une norme trace presque sûrement indépendante de ω . Ainsi, $\chi_\gamma \phi(H_\omega) \in \mathcal{T}_1$ et sa norme trace est presque sûrement indépendante de ω .

On peut alors utiliser la cyclicité de la trace et écrire

$$\nu_{\omega,L}(\phi) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{\gamma \in \mathbb{Z}^d \cap \Lambda_L} \text{tr}(\chi_\gamma \phi(H_\omega) \chi_\gamma).$$

L'ergodicité nous permet d'écrire $\chi_\gamma \phi(H_\omega) \chi_\gamma = \chi_0 U_\gamma^* \phi(H_\omega) U_\gamma \chi_0 = \chi_0 \phi(H_{\tau_\gamma(\omega)}) \chi_0$ où U_γ est l'opérateur de translation associé à γ sur $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ et τ_γ est l'opérateur correspondant sur Ω .

Comme la famille $(\text{tr}(\chi_0 \phi(H_{\tau_\gamma(\omega)}) \chi_0))_{\gamma \in \mathbb{Z}^d}$ est ergodique relativement aux translations et $\mathbb{E}(|\text{tr}(\chi_0 \phi(H_{\tau_\gamma(\omega)}) \chi_0)|) < \infty$, d'après le théorème ergodique de Birkhoff (cf. par exemple [64], théorème 1.14 et corollaire 1.14.1), on trouve le résultat annoncé. \square

On notera $\nu(\phi)$ la limite. Il est facile de voir que ν peut être définie pour des fonctions non nécessairement positives et que c'est une forme linéaire positive sur $\mathcal{C}_c(\mathbb{R})$. Ainsi, grâce au théorème de Riesz-Markov, qu'elle correspond à une mesure borélienne. C'est cette mesure que l'on appellera *densité d'états*; on la notera aussi ν .

Notre résultat est le suivant :

Théorème II.55. *Pour tout sous-intervalle compact $J \subset]B_-, B_+[$, il existe une constante $C_J > 0$ telle que pour tous $a, b \in J$, $a < b$, $\nu([a, b]) \leq C_J(b - a)$.*

Preuve du théorème Comme notre inégalité de Wegner porte sur $H_{\omega,L}$, nous allons commencer par montrer qu'on peut utiliser cet opérateur au lieu de H_ω dans la densité d'états.

Lemme II.56. *Soit $\phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ à support dans $]B_-, B_+[$. Alors, uniformément en ω ,*

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_L|} (\text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L) - \text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L+15}) \chi_L)) = 0.$$

Démonstration. D'après la formule de Helffer-Sjöstrand (voir par exemple [21], proposition 4.8), il existe $\tilde{\phi} \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{C})$ dont la trace sur \mathbb{R} est ϕ telle que $\exists C > 0, \forall z \in \mathbb{C}, \left| \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{\phi}(z) \right| \leq C |\text{Im}(z)|^{2d+2}$. De plus, on a pour tout opérateur auto-adjoint A

$$\phi(A) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \bar{\partial} \tilde{\phi}(x + iy) (A - x - iy)^{-1} dx dy \quad (\text{II.3.38})$$

Soit $L > 0$. D'après cette formule et l'identité de la résolvante, on a pour tout $\omega \in \Omega$

$$\left| \frac{1}{|\Lambda_L|} (\text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L) - \text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L+15}) \chi_L)) \right| \quad (\text{II.3.39})$$

$$\leq \frac{1}{\pi |\Lambda_L|} \int_{\mathbb{R}^2} |\bar{\partial} \tilde{\phi}(x + iy)| \|\chi_L (H_\omega - x - iy)^{-1} V_{\omega, L+15}^{ext} (H_{\omega, L+15} - x - iy)^{-1} \chi_L\|_1 dx dy \quad (\text{II.3.40})$$

$$\leq \frac{1}{\pi |\Lambda_L|} \int_{\mathbb{R}^2} |\bar{\partial} \tilde{\phi}(x + iy)| \|\chi_L (H_\omega - x - iy)^{-1} V_{\omega, L+15}^{ext}\|_1 \|(H_{\omega, L+15} - x - iy)^{-1} \chi_L\| dx dy \quad (\text{II.3.41})$$

où on a noté $V_{\omega, L+15}^{ext} = V_\omega - V_{\omega, L} = V_{\omega, L+15}^{ext} (1 - \chi_{L+12})$.

La norme d'opérateur dans l'intégrale est majorée par $|y|^{-1}$. Le premier facteur est majoré par $C|y|^{2d+2}$. Le produit est donc borné par une constante indépendante de x et de y multipliée par $|y|^{2d+1}$.

Considérons maintenant le facteur avec une norme trace. On a

$$\|\chi_L(H_\omega - x - iy)^{-1}V_{\omega, L+15}^{ext}\|_1 \leq M_\infty (\|\chi_L(H_\omega - x - iy)^{-1}(\chi_{L+\sqrt{L}} - \chi_{L+12})\|_1) \quad (\text{II.3.42})$$

$$+ \|\chi_L(H_\omega - x - iy)^{-1}(1 - \chi_{L+\sqrt{L}})\|_1) \quad (\text{II.3.43})$$

où on rappelle que M_∞ est la borne supérieure de $|V_\omega|$.

L'équation (II.3.37) permet de majorer le premier terme par

$$\frac{C}{|y|^{2d+1}} |\text{supp}(\chi_{L+\sqrt{L}} - \chi_{L+12})| \leq \frac{C'}{|y|^{2d+1}} L^{d-1/2}$$

et le deuxième par

$$\frac{C}{|y|^{2d+1}} |\text{supp}(\chi_L)| e^{-\alpha|y|\sqrt{L}} = \frac{C}{|y|^{2d+1}} L^d e^{-\alpha|y|\sqrt{L}}.$$

Puisqu'il existe un ensemble compact K et $M > 0$ indépendants de L tels que $\text{supp}(\tilde{\phi}) \subset K \times [-M, M]$, on peut majorer le second membre de (II.3.41) par

$$\frac{1}{L^d} \int_K \int_{-M}^M C(L^{d-\frac{1}{2}} + L^d e^{-|y|\sqrt{L}}) dy dx$$

qui est borné par $C' \frac{1}{\sqrt{L}} (1 - e^{-M\sqrt{L}})$ pour une constante C' . On a alors qu'il existe C tel que pour tout $L > 0$

$$\left| \frac{1}{|\Lambda_L|} (\text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L) - \text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L}) \chi_L)) \right| \leq \frac{C}{\sqrt{L}}$$

ce qui tend vers 0 quand L tend vers l'infini. \square

Preuve du théorème. Soit J un sous-intervalle compact de $]B_-, B_+[$. On veut montrer qu'il existe une constante $C_J > 0$ telle que pour tous $a, b \in J$, $a < b$,

$$\nu(1_{[a, b]}) \leq C_J(b - a).$$

Soit ϕ comme dans le lemme II.56 avec $0 \leq \phi \leq 1_{[a, b]}$. Alors, pour $L \in \mathbb{N}$,

$$\text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L+15}) \chi_L) \leq \text{tr}(\chi_L E_{\omega, L+15}([a, b]) \chi_L) \quad (\text{II.3.44})$$

$$\leq \text{tr}(E_{\omega, L+15}([a, b])) \quad (\text{II.3.45})$$

Or le théorème II.42 nous dit qu'il existe C_J tel que pour tous ϕ , $a, b \in J$, L assez grand on a

$$\mathbb{E}(\text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L+15}) \chi_L)) \leq \mathbb{E}(\text{tr}(E_{\omega, L+15}([a, b]))) \leq C_J(b - a)(L + 15)^d \leq C'_J(b - a)L^d$$

On a

$$\begin{aligned} \nu(\phi) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \mathbb{E} \left(\frac{1}{|\Lambda_L|} \text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L) \right) \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_L|} \mathbb{E}(\text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L+15}) \chi_L)). \end{aligned}$$

Or on sait que pour tout L

$$\frac{1}{|\Lambda_L|} \mathbb{E} (\text{tr} (\chi_L \phi(H_{\omega, L+15}) \chi_L)) \leq C'_J(b-a)$$

donc $\nu(\phi) \leq C'_J(b-a)$.

En prenant la borne supérieure pour $0 \leq \phi \leq 1_{[a,b]}$ grâce au théorème de convergence monotone, on trouve le résultat sur la densité d'états. \square

Définition alternative Dans le premier chapitre, nous avons vu qu'il était possible de définir la densité d'états à partir de l'opérateur restreint à une boîte. Nous considérons dans ce cas

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_L|} \text{tr}(\phi(H_L))$$

où H_L est l'opérateur H restreint à Λ_L avec des bonnes conditions au bord.

Dans notre cas, $H_{\omega, L}^{per}$ sera l'opérateur H_ω restreint à la boîte Λ_L avec des conditions au bord périodiques.

Nous commençons par démontrer un lemme technique semblable à celui de Birman et Solomyak donné dans [58, théorème 4.1].

Lemme II.57. *Soit $L > 0$ et ∇ le gradient avec conditions au bord périodiques. Soit $H = f(\mathbf{x})g(-i\nabla)$ sur $L^2(\Lambda_L)$ avec $f \in L^p(\Lambda_L)$ et $\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d} |g(\frac{2\pi\mathbf{n}}{L})|^p < \infty$ pour un certain $2 \leq p < \infty$. Alors H est dans \mathcal{T}_p et*

$$\|H\|_p \leq \frac{1}{L^{d/p}} \|f\|_p \left(\sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d} |g(\frac{2\pi\mathbf{n}}{L})|^p \right)^{1/p}. \quad (\text{II.3.46})$$

Démonstration. Commençons par le cas $p = 2$. Pour $\psi \in L^2(\Lambda_L)$, on rappelle que son coefficient de Fourier d'indice \mathbf{n} est

$$c_{\mathbf{n}}(\psi) = \frac{1}{L^d} \int_{\Lambda_L} \psi(\mathbf{x}) e^{-\frac{2i\pi\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}} d\mathbf{x}.$$

Des manipulations standards sur les séries de Fourier permettent de montrer que H est un opérateur intégral dont le noyau est $\frac{1}{L^d} f(\mathbf{x})\check{g}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ où \check{g} est la fonction sur Λ_L dont les coefficients de Fourier valent $(g(\frac{2\pi\mathbf{n}}{L}))_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d}$. Ainsi, d'après le théorème 2.11 de [58], l'opérateur est Hilbert-Schmidt avec une norme égale à la norme L^2 de son noyau.

L'identité de Parseval donne la valeur de cette norme.

Le cas général se montre par interpolation, comme pour le théorème 4.1 de [58]. \square

Lemme II.58. *Soit ϕ une fonction mesurable bornée à support compact.*

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^d} \text{tr}(\phi(H_{\omega, L}^{per}) - \chi_{L-10} \phi(H_{\omega, L}^{per}) \chi_{L-10}) = 0$$

Démonstration. On peut voir facilement que

$$\phi(H_{\omega, L}^{per}) - \chi_{L-10} \phi(H_{\omega, L}^{per}) \chi_{L-10} = \phi(H_{\omega, L}^{per})(\chi_L - \chi_{L-10}) + (\chi_L - \chi_{L-10})\phi(H_{\omega, L}^{per})\chi_{L-10}.$$

De plus,

$$\phi(H_{\omega, L}^{per})(\chi_L - \chi_{L-10}) = \phi(H_{\omega, L}^{per})(H_{\omega, L}^{per} - i)^{2d}(H_{\omega, L}^{per} - i)^{-2d}(\chi_L - \chi_{L-10}).$$

Le facteur $\phi(H_{\omega,L}^{per})(H_{\omega,L}^{per}-i)^{2d}$ est borné par une quantité dépendant seulement de $\text{supp}(\phi)$ et $\|\phi\|_\infty$.

D'après le lemme II.57, $(\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla) - i)^{-1} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla) - i)^{-1}\chi_L$ est dans \mathcal{T}_{2d} et sa norme \mathcal{T}_{2d} est inférieure à $\|\chi_L\|_{2d} \left(\frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d} |g(\frac{2\pi\mathbf{n}}{L})|^{2d} \right)^{1/2d}$ où $g(\mathbf{p}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - i)^{-1}$. On voit facilement que $\|\chi_L\|_{2d} = \sqrt{L}$ et le second facteur tend vers $\|g\|_{2d}$ qui est indépendant de L . Il existe donc une constante C telle que le produit est inférieur à $C\sqrt{L}$. En écrivant l'identité de la résolvante comme dans la remarque II.34, on trouve le même résultat pour $(H_{\omega,L}^{per} - i)^{-1}$. De là, par l'inégalité de Hölder, $(H_{\omega,L}^{per} - i)^{-2d+1}$ est dans $\mathcal{T}_{2d/(2d-1)}$ avec une norme inférieure à $CL^{(2d-1)/2}$.

De la même façon, on montre que $(\chi_L - \chi_{L-10})(H_{\omega,L}^{per} - i)^{-1} \in \mathcal{T}_{2d}$ avec une norme \mathcal{T}_{2d} inférieure à $C\|\chi_L - \chi_{L-10}\|_{2d} = CL^{(d-1)/2d}$. Par l'inégalité de Hölder, l'opérateur $(H_{\omega,L}^{per} - i)^{-2d}(\chi_L - \chi_{L-10})$ est à trace et

$$\|(H_{\omega,L}^{per} - i)^{-2d}(\chi_L - \chi_{L-10})\|_1 \leq CL^{d-\frac{1}{2d}}.$$

À plus forte raison, l'opérateur $(\chi_L - \chi_{L-10})\phi(H_{\omega,L}^{per})\chi_{L-10}$ est aussi à trace et sa norme trace est également majorée par $CL^{d-\frac{1}{2d}}$. Cela permet de conclure. \square

On notera désormais $R_{\omega,L}^{per}(E) = (H_{\omega,L}^{per} - E)^{-1}$.

Lemme II.59 (Équation de la résolvante géométrique). *Soit $L < L' \leq \infty$ et $\tilde{\chi}_L$ une fonction lisse à support dans Λ_L . Alors*

$$\tilde{\chi}_L R_{\omega,L'}^{per}(E) = R_{\omega,L'}^{per}(E)\tilde{\chi}_L + R_{\omega,L'}^{per}(E)[H_{\omega,L'}^{per}; \tilde{\chi}_L]R_{\omega,L'}^{per}(E). \quad (\text{II.3.47})$$

Démonstration. Soit $\psi \in L^2(\Lambda_{L'})$. Alors $R_{\omega,L'}^{per}(E)\psi \in \text{Dom}(H_{\omega,L}^{per})$. De plus, $\tilde{\chi}_L R_{\omega,L'}^{per}(E)\psi \in \text{Dom}(H_{\omega,L'}^{per})$ donc

$$(H_{\omega,L'}^{per} - E)\tilde{\chi}_L H_{\omega,L'}^{per}(E)\psi = \tilde{\chi}_L \psi + [H_{\omega,L'}^{per}; \tilde{\chi}_L]R_{\omega,L'}^{per}(E)\psi. \quad (\text{II.3.48})$$

On peut voir que $\tilde{\chi}_L R_{\omega,L'}^{per}(E)\psi$ est à support dans Λ_L et que, en tant que fonction de $L^2(\Lambda_L)$, elle est dans $\text{Dom}(H_{\omega,L}^{per})$. Comme $[H_{\omega,L'}^{per}; \tilde{\chi}_L]$ a son support dans Λ_L , on peut projeter (II.3.48) sur $L^2(\Lambda_L)$ et obtenir

$$(H_{\omega,L}^{per} - E)\tilde{\chi}_L R_{\omega,L'}^{per}(E)\psi = \tilde{\chi}_L \psi + [H_{\omega,L'}^{per}; \tilde{\chi}_L]R_{\omega,L'}^{per}(E)\psi. \quad (\text{II.3.49})$$

On trouve le résultat souhaité en multipliant par $R_{\omega,L}^{per}(E)$. \square

Lemme II.60. *Soit $\phi \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ à support dans $]B_-, B_+[$. Alors, uniformément en ω ,*

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_L|} \left(\text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L) - \text{tr}(\phi(H_{\omega,L+10}^{per})) \right) = 0. \quad (\text{II.3.50})$$

Démonstration. Le lemme II.58 nous permet de remplacer $\phi(H_{\omega,L})$ par $\chi_L \phi(H_{\omega,L+10}^{per}) \chi_L$. D'après la formule de Helffer-Sjöstrand, il existe $\tilde{\phi} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{C})$ dont la trace sur \mathbb{R} est ϕ telle que $\exists C > 0, \forall z \in \mathbb{C}, \left| \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \tilde{\phi}(z) \right| \leq C |\text{Im}(z)|^{2d+2}$. De plus, on a pour tout opérateur auto-adjoint A

$$\phi(A) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \bar{\partial} \tilde{\phi}(x + iy) (A - x - iy)^{-1} dx dy \quad (\text{II.3.51})$$

Soit $L > 0$. On introduit une fonction $\tilde{\chi}_{L+10}$ qui est lisse et à support dans Λ_{L+10} et qui vérifie $\tilde{\chi}_{L+10}\chi_L = \chi_L$ et $\|\nabla\tilde{\chi}_{L+10}\|_\infty \leq 1$. D'après la formule de Helffer-Sjöstrand et nos deux derniers lemmes, on a que pour tout $\omega \in \Omega$

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{|\Lambda_L|} \left(\text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L) - \text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L+10}^{per}) \chi_L) \right) \right| \\ & \leq \frac{1}{\pi |\Lambda_L|} \int_{\mathbb{R}^2} |\bar{\partial} \tilde{\phi}(x + iy)| \|\chi_L (H_\omega - x - iy)^{-1} \chi_L - \chi_L (H_{\omega, L+10}^{per} - x - iy)^{-1} \chi_L\|_1 dx dy \\ & \leq \frac{1}{\pi |\Lambda_L|} \int_{\mathbb{R}^2} |\bar{\partial} \tilde{\phi}(x + iy)| \|\chi_L \tilde{\chi}_{L+10} (H_\omega - x - iy)^{-1} \chi_L - \chi_L (H_{\omega, L+10}^{per} - x - iy)^{-1} \chi_L\|_1 dx dy \\ & \leq \frac{1}{\pi |\Lambda_L|} \int_{\mathbb{R}^2} |\bar{\partial} \tilde{\phi}(x + iy)| \|\chi_L (H_{\omega, L+10}^{per} - x - iy)^{-1} [H_\omega, \tilde{\chi}_{L+10}] (H_\omega - x - iy)^{-1} \chi_L\|_1 dx dy \end{aligned}$$

On passe de l'avant-dernière à la dernière ligne en remarquant que $\tilde{\chi}_{L+10}\chi_L = \chi_L$ ce qui, en faisant apparaître le commutateur, permet de simplifier. Le premier facteur est majoré par $C|y|^{2d+2}$.

Considérons le facteur avec la norme trace. Comme $[H_\omega, \chi_{L+10}] = \sigma \cdot (-i\nabla\tilde{\chi}_{L+10})$ est une fonction majorée par 1 et à support dans la couronne $\Lambda_{L+10} \setminus \Lambda_{L+5}$, l'équation (II.3.37) permet de majorer la norme trace de $[H_\omega, \tilde{\chi}_{L+10}](H_\omega - x - iy)^{-1} \chi_L$ par $\frac{C}{|y|^{2d+1}} L^{d-1}$ avec C indépendant de L et (x, y) . On a alors qu'il existe C tel que pour tout $L > 0$

$$\frac{1}{|\Lambda_L|} \left(\text{tr}(\chi_L \phi(H_\omega) \chi_L) - \text{tr}(\chi_L \phi(H_{\omega, L+10}^{per}) \chi_L) \right) \leq \frac{C}{L}$$

ce qui tend vers 0 quand L tend vers l'infini. □

Perspectives de recherche future

Les résultats présentés ici laissent place à un certain nombre de questions pouvant faire l'objet de recherches futures. Voici une liste (bien entendu non exhaustive) de problèmes à ma connaissance ouverts.

- Dans le cas périodique, un problème intéressant serait de démontrer l'ouverture d'une lacune spectrale non pas pour un modèle avec un potentiel de masse périodique mais en définissant l'opérateur de Dirac sur un domaine comportant des trous. Notons qu'il ne suffit de combiner les résultats [6] et [5] car ils correspondent à des asymptotiques différentes.
- Une analyse semblable pourrait être menée avec un modèle discret sur un réseau auquel on aurait enlevé certains sites. La théorie spectrale des graphes infinis présentée dans [30, 48] semble une piste à explorer.
- Inversement, on pourrait également étudier l'opérateur de Dirac sur un ruban (avec des conditions au bord de masse infinie) ou sur un tube (avec des conditions au bord périodiques) et voir dans quelle mesure on retrouve les résultats obtenus avec le modèle discret.
- Il serait également intéressant de chercher à généraliser notre résultat élémentaire sur le paradoxe de Klein en dimension 1 (absence d'ouverture d'une lacune spectrale) aux dimensions supérieures.
- On peut aussi voir si on obtient un résultat de convergence semblable à celui de [5] avec le hamiltonien généralisé étudié dans la section I.3.3.
- Dans le cas aléatoire, une question naturelle est de déterminer si on peut obtenir le résultat de localisation avec le hamiltonien étudié dans la section I.3.3.
- Un certain nombre de propriétés sont connues au sujet des opérateurs de Schrödinger aléatoires, il serait intéressant de déterminer si elles restent vraies avec l'opérateur de Dirac : transition métal-isolant [28], statistique des valeurs propres [33], etc.
- On peut aussi chercher à montrer la localisation pour l'opérateur de Dirac sous d'autres hypothèses, notamment en prenant des variables aléatoires de Bernoulli à la place des variables aléatoires absolument continues, comme dans [10, 29] qui traitent de l'opérateur de Schrödinger.
- Il serait intéressant d'étudier un modèle semblable à celui de la section II.3 avec un potentiel non plus positif mais porté par la matrice σ_3 . En effet, nous avons vu que ces matrices sont une barrière de potentiel pour des particules décrites par l'opérateur de Dirac. Éventuellement, on pourrait également partir d'un opérateur sans potentiel périodique donc sans lacune spectrale.

Annexe A

Transformation de Bloch-Floquet pour les opérateurs pseudo-différentiels

Dans cet appendice, nous étudions la transformation de Bloch-Floquet appliquée à l'opérateur $H(\alpha, \beta)$ utilisé dans la section I.3.3. Comme le potentiel est borné et \mathbb{Z}^2 -périodique, il suffit d'étudier l'effet de cette transformation sur H_0 . Comme H_0 n'est pas borné, nous travaillerons avec sa résolvante et commençons par la proposition suivante. Rappelons que nous avons noté $(H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ le noyau intégral de $(H_0 - i)^{-1}$.

Proposition A.1. *Soit \mathcal{U} la transformation de Bloch-Floquet définie par (I.1.6).*

$$\mathcal{U}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-i\nabla) - i)^{-1}\mathcal{U}^* = \int_{\Omega}^{\oplus} g_{\mathbf{k}} d\mathbf{k},$$

où, pour $\mathbf{k} \in \Omega$, l'opérateur $g_{\mathbf{k}} : L^2(\Omega, \mathbb{C}^2) \rightarrow L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ a un noyau intégral donné par

$$g_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{k}} e^{2i\pi\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} (H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}') e^{-2i\pi\mathbf{x}' \cdot \mathbf{k}}.$$

Démonstration. Soit $\mathbf{f} \in \mathcal{C}^\infty(\Omega \times \mathbb{R}^2)^2$ telle que \mathbf{f} est \mathbb{Z}^2 -périodique par rapport à la seconde variable et $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$. Pour éviter des notations trop lourdes, on notera $K_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (H_0 - i)^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. On peut alors écrire

$$\begin{aligned} ((\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-i\nabla) - i)^{-1}\mathcal{U}^*\mathbf{f})(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^2} K_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') (\mathcal{U}^*\mathbf{f})(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\ &= \sum_{\boldsymbol{\gamma}' \in \mathbb{Z}^2} \int_{\Omega} K_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}') \int_{\Omega} e^{-2i\pi(\mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}') \cdot \mathbf{k}'} \mathbf{f}(\mathbf{x}', \mathbf{k}') d\mathbf{k}' d\mathbf{x}'. \end{aligned}$$

Les coefficients de Fourier $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}', \boldsymbol{\gamma}') = \int_{\Omega} e^{-2i\pi(\mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}') \cdot \mathbf{k}'} \mathbf{f}(\mathbf{x}', \mathbf{k}') d\mathbf{k}'$ décroissent plus vite que n'importe quel inverse de polynôme en $\boldsymbol{\gamma}'$ uniformément en \mathbf{x}' . Le noyau intégral $K_0(\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}')$ décroît comme $|\boldsymbol{\gamma} - \boldsymbol{\gamma}'|^{-3}$ quand $|\boldsymbol{\gamma} - \boldsymbol{\gamma}'|$ est plus grand que 3 uniformément en \mathbf{x} et \mathbf{x}' . De plus, $K_0(\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}')$ est absolument intégrable par rapport à \mathbf{x}' et

$$\int_{\Omega} |K_0(\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}')| d\mathbf{x}' \leq C$$

uniformément en $\mathbf{x} \in \Omega$ et $|\boldsymbol{\gamma} - \boldsymbol{\gamma}'| \leq 3$. Ceci justifie les interversions de séries ci-dessous.

$$\begin{aligned}
& (\mathcal{U}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-i\nabla) - i)^{-1} \mathcal{U}^* \mathbf{f})(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \\
&= \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma})} \sum_{\boldsymbol{\gamma}' \in \mathbb{Z}^2} \int_{\Omega} K_0(\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}') \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}', \boldsymbol{\gamma}') d\mathbf{x}' \\
&= \sum_{\boldsymbol{\gamma}' \in \mathbb{Z}^2} \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\gamma} - \boldsymbol{\gamma}')} \int_{\Omega} K_0(\mathbf{x} + (\boldsymbol{\gamma} - \boldsymbol{\gamma}'), \mathbf{x}') e^{2i\pi \boldsymbol{\gamma}' \cdot \mathbf{k}} \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}', \boldsymbol{\gamma}') d\mathbf{x}' \\
&= \sum_{\boldsymbol{\gamma}' \in \mathbb{Z}^2} \sum_{\tilde{\boldsymbol{\gamma}} \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot \tilde{\boldsymbol{\gamma}}} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \int_{\Omega} K_0(\mathbf{x} + \tilde{\boldsymbol{\gamma}}, \mathbf{x}') e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}'} \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}', \boldsymbol{\gamma}') d\mathbf{x}' \\
&= \int_{\Omega} \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}} K_0(\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}') \sum_{\boldsymbol{\gamma}' \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\gamma}' + \mathbf{x}')} \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}', \boldsymbol{\gamma}') d\mathbf{x}'.
\end{aligned}$$

Dans la dernière ligne, on reconnaît la représentation en série de Fourier de $\mathbf{f}(\mathbf{x}', \cdot)$ au point \mathbf{k} . On obtient alors

$$\int_{\Omega} \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma} - \mathbf{x}')} K_0(\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma}, \mathbf{x}') \mathbf{f}(\mathbf{x}', \mathbf{k}) d\mathbf{x}' = \int_{\Omega} g_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathbf{f}(\mathbf{x}', \mathbf{k}) d\mathbf{x}',$$

ce qui permet de conclure la preuve de la proposition A.1. \square

Proposition A.2. *On a*

$$\mathcal{U} H_0 \mathcal{U}^* = \int_{\Omega}^{\oplus} h_{\mathbf{k}}^{(0)} d\mathbf{k},$$

avec

$$h_{\mathbf{k}}^{(0)} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(-i\nabla_{\text{per}} - 2\pi \mathbf{k}).$$

Démonstration. D'après le théorème I.6, pour montrer (I.3.28), il suffit de montrer que, pour $\mathbf{k} \in \Omega$, $g_{\mathbf{k}} : L^2(\Omega, \mathbb{C}^2) \rightarrow L^2(\Omega, \mathbb{C}^2)$ vérifie

$$g_{\mathbf{k}} = (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1}.$$

À cet effet, on notera $(e_j)_{j=1,2}$ les vecteurs de la base canonique de \mathbb{C}^2 et $\Psi_{\mathbf{m}} = e^{2i\pi \mathbf{m} \cdot \mathbf{x}}$. Nous prouverons que pour tous $\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^2$ et $j \in \{1, 2\}$ on a

$$g_{\mathbf{k}}(\Psi_{\mathbf{m}} \otimes e_j) = (h_{\mathbf{k}}^{(0)} - i)^{-1}(\Psi_{\mathbf{m}} \otimes e_j) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(2\pi(\mathbf{m} - \mathbf{k})) - i)^{-1}(\Psi_{\mathbf{m}} \otimes e_j).$$

Rappelons qu'on a noté $G(\mathbf{p}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{p}) - i)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathbb{C}^2)$. On a :

$$\begin{aligned}
& \{g_{\mathbf{k}}(\Psi_{\mathbf{m}} \otimes e_j)\}(\mathbf{x}) \\
&= \int_{\Omega} g_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') (\Psi_{\mathbf{m}} \otimes e_j)(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\
&= \Psi_{\mathbf{m}}(\mathbf{x}) \int_{\Omega} d\mathbf{x}' \sum_{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{Z}^2} e^{2i\pi \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma} - \mathbf{x}')} e^{2i\pi \mathbf{m} \cdot (-\mathbf{x} + \mathbf{x}')} \frac{1}{2\pi} \mathcal{F}^{-1}(G)(\mathbf{x} - \mathbf{x}' + \boldsymbol{\gamma}) e_j.
\end{aligned} \tag{A.0.1}$$

Comme \mathbf{m} et $\boldsymbol{\gamma}$ sont tous deux dans \mathbb{Z}^2 , on a $e^{2\pi i \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\gamma}} = 1$, de là dans (A.0.1) on peut remplacer $e^{2i\pi \mathbf{m} \cdot (-\mathbf{x} + \mathbf{x}')}$ par $e^{-2i\pi \mathbf{m} \cdot (\mathbf{x} + \boldsymbol{\gamma} - \mathbf{x}')}$. Ainsi, on trouve après changement de variable

$$\begin{aligned}
\{g_{\mathbf{k}}(\Psi_{\mathbf{m}} \otimes e_j)\}(\mathbf{x}) &= \Psi_{\mathbf{m}}(\mathbf{x}) \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-2i\pi(\mathbf{m} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{y}} \mathcal{F}^{-1}(G)(\mathbf{y}) d\mathbf{y} e_j \\
&= G(2\pi(\mathbf{m} - \mathbf{k})) (\Psi_{\mathbf{m}} \otimes e_j)(\mathbf{x}).
\end{aligned}$$

Cela permet de conclure la preuve de la proposition. \square

Annexe B

Analyse multi-échelles

La preuve détaillée du théorème II.25 est extrêmement technique et bien trop longue pour qu'on envisage de la donner ici. Il ne s'agit pas en réalité d'une simple analyse multi-échelles mais de 4 analyses successives, chacune partant du résultat de la précédente. Afin de montrer comment cela fonctionne, nous allons, sans preuve, donner les différentes étapes du raisonnement tel qu'il est présenté dans la partie 5 de [40]. Les preuves peuvent être trouvées dans [27].

Dans toute cette partie, H_ω sera un opérateur aléatoire ergodique standard vérifiant les propriétés (IAD), (W) et (SLI) sur un intervalle ouvert I . On considèrera un sous-intervalle compact I_0 de I et $E_0 \in I_0$. La première étape permet d'obtenir, à partir d'une borne polynomiale à une échelle fixée avec une probabilité indépendante de l'échelle, une suite d'échelles pour laquelle on a une décroissance polynomiale avec une probabilité d'échec polynomialement décroissante.

Théorème B.1 ([40], théorème 5.6). *Soit $\theta > bd$. Étant donné un entier impair $Y \geq 11$, pour tout p tel que $0 < p < \theta - bd$, on peut trouver Z tel que si pour un certain $L_0 > Z$, $L_0 \in 6\mathbb{N}$, on a*

$$\mathbb{P}\{\|\Gamma_{\mathbf{0},L_0}R_{\omega,\mathbf{0},L_0}(E_0)\chi_{\mathbf{0},L_0/3}\| \leq \frac{1}{L_0^\theta}\} > 1 - (3Y - 4)^{-2d}$$

alors, en posant $L_{k+1} = YL_k$ pour $k \in \mathbb{N}$, on a

$$\mathbb{P}\{\|\Gamma_{\mathbf{0},L_k}R_{\omega,\mathbf{0},L_k}(E_0)\chi_{\mathbf{0},L_k/3}\| \leq \frac{1}{L_k^\theta}\} > 1 - \frac{1}{L_k^p}$$

pour k assez grand.

On reconnaît dans le membre de droite de la condition de départ le $\frac{1}{841^d}$ du théorème II.25.

La deuxième étape permet, à partir de la décroissance polynomiale obtenue précédemment, d'obtenir une décroissance exponentielle avec une probabilité d'échec polynomialement décroissante. De plus, cette décroissance n'est pas seulement à l'énergie E_0 mais sur un voisinage de celle-ci.

Théorème B.2 ([40], théorème 5.7). *Soit $\theta > bd$ et $0 < p < \theta - bd$. Étant donné $p' > p$ et $1 < \alpha < \min\left\{\frac{2p+2d}{p+2d}, \frac{\theta}{p+2d}\right\}$, il existe B tel que, si pour un certain $L_0 \geq B$ on a*

$$\mathbb{P}\{\|\Gamma_{\mathbf{0},L_0}R_{\omega,\mathbf{0},L_0}(E_0)\chi_{\mathbf{0},L_0/3}\| \leq L_0^{-\theta}\} > 1 - \frac{1}{L_0^{p'}}$$

alors il existe $\delta_1 > 0$ tel que, si on note $I(\delta_1) = [R_0 - \delta_1, E_0 + \delta_1] \cap I_0$, $m_0 = 2\theta \frac{\log L_0}{L_0}$ et $L_{k+1} = [L_k^\alpha]$ pour $k \in \mathbb{N}$, on a

$$\mathbb{P}\{\|\Gamma_{\mathbf{0}, L_k} R_{\omega, \mathbf{0}, L_k}(E) \chi_{\mathbf{0}, L_k/3}\| \leq e^{-m_0 \frac{L_k}{4}}\} > 1 - \frac{1}{L_k^p}$$

pour tous $E \in I(\delta_1)$ et $k \in \mathbb{N}$.

La troisième étape va permettre de convertir la décroissance sous-exponentielle avec probabilité d'échec polynomialement décroissante en une même décroissance avec une probabilité d'échec sous-exponentiellement décroissante. Notons que, comme d'après le théorème précédent l'hypothèse est vérifiée sur un intervalle, le résultat sera lui aussi vérifié sur cet intervalle.

Théorème B.3 ([40] théorème 5.8). *Soit $\zeta_0 \in]0, 1[$. Étant donné un entier impair $Y \geq 11^{1/(1-\zeta_0)}$, pour tout ζ_1 tel que $0 < \zeta_1 < \zeta_0$, on peut trouver Z tel que si pour un certain $L_0 > Z$, $L_0 \in 6\mathbb{N}$, on a*

$$\mathbb{P}\{\|\Gamma_{\mathbf{0}, L_0} R_{\omega, \mathbf{0}, L_0}(E_0) \chi_{\mathbf{0}, L_0/3}\| \leq e^{-L_0^{\zeta_0}}\} > 1 - (3Y - 4)^{-2d}$$

alors, en posant $L_{k+1} = Y L_k$ pour $k \in \mathbb{N}$, on a

$$\mathbb{P}\{\|\Gamma_{\mathbf{0}, L_k} R_{\omega, \mathbf{0}, L_k}(E_0) \chi_{\mathbf{0}, L_k/3}\| \leq e^{-L_k^{\zeta_0}}\} > 1 - e^{-L_k^{\zeta_1}}$$

pour k assez grand.

La quatrième étape va permettre d'obtenir une décroissance exponentielle, une propriété uniforme sur un intervalle et d'obtenir la version « à deux boîtes » du résultat.

Théorème B.4 ([40], théorème 5.9). *Supposons que H_ω vérifie en plus (NE) sur l'intervalle I . On suppose aussi qu'il existe des constantes $0 < \zeta_2 < \zeta_1 < \zeta_0 < 1$. Alors, étant donné $1 < \alpha < \zeta_0/\zeta_1$, il existe C tel que, si pour une certaine échelle $L_0 \geq C$, $L_0 \in 6\mathbb{N}$, on a*

$$\mathbb{P}\{\|\Gamma_{\mathbf{0}, L_0} R_{\omega, \mathbf{0}, L_0}(E_0) \chi_{\mathbf{0}, L_0/3}\| \leq e^{-L_0^{\zeta_0}}\} > 1 - e^{-L_0^{\zeta_1}}$$

alors il existe $\delta_2 > 0$ tel que, en posant $I(\delta_2) = [E_0 - \delta_2, E_0 + \delta_0] \cap I_0$, $m_0 = 2L_0^{\zeta_0-1}$ et $L_{k+1} = [L_k^\alpha]_{6\mathbb{N}}$ pour $k \in \mathbb{N}$, on a

$$\mathbb{P}\{R(\frac{m_0}{2}, L_k, I(\delta_2), \mathbf{x}, \mathbf{y})\} > 1 - e^{-L_k^{\zeta_2}}$$

pour tout $k \in \mathbb{N}$ et $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d$ tels que $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| > L_k$, où on rappelle que l'événement R est défini par l'équation (II.2.5).

On conclut en remarquant que l'intervalle I peut être recouvert par un nombre fini d'intervalles de tailles $2\delta_2$.

Annexe C

Emplacement du spectre de l'opérateur de Dirac aléatoire

Preuve de la proposition II.36

Lemme C.1. Soit $\tilde{u} : \mathbb{R}^d \mapsto \mathcal{H}_n(\mathbb{C})$ un potentiel multiplicatif à valeurs matricielles positives, borné, à support compact et non identiquement nul. Soit H_0 l'opérateur défini par (II.3.5) et posons

$$H_\tau := H_0 + \tau\tilde{u}(x), \quad \tau \in \mathbb{R}.$$

Alors il existe $\tau \in \mathbb{R}$ avec $|\tau| > 0$ tel que H_τ a au moins une valeur propre discrète dans $]B_-, B_+[$.

Démonstration. La perturbation induite par \tilde{u} est compacte relativement à H_0 , ainsi par le principe de Birman-Schwinger on a que $\mu \in]B_-, B_+[$ est une valeur propre discrète de H_τ si -1 est une valeur propre de $\tau\tilde{u}^{1/2}(H_0 - \mu)^{-1}\tilde{u}^{1/2}$. La famille d'opérateurs auto-adjoints $T(\mu) := \tilde{u}^{1/2}(H_0 - \mu)^{-1}\tilde{u}^{1/2}$ ne peut pas être identiquement nulle pour $\mu \in]B_-, B_+[$ car cela conduirait à

$$T'(\mu) = \tilde{u}^{1/2}(H_0 - \mu)^{-2}\tilde{u}^{1/2} \equiv 0,$$

d'où $|H_0 - \mu|^{-1}\tilde{u}^{1/2} = 0$ et $\tilde{u}^{1/2} = 0$, ce qui est contradictoire. Soit maintenant $\mu_0 \in]B_-, B_+[$ tel que $T(\mu_0)$ a une valeur propre réelle non nulle E_0 . Alors, en choisissant $\tau_0 = -1/E_0$, on obtient que H_{τ_0} a une valeur propre discrète égale à μ_0 . \square

Une version un peu plus générale du lemme suivant peut être trouvée dans [34, V, théorème 4.10]

La distance de Hausdorff entre deux sous-ensembles des réels $\Omega_{1,2} \subset \mathbb{R}$ est définie par

$$d_H(\Omega_1, \Omega_2) := \max\left\{\sup_{x \in \Omega_1} \text{dist}(x, \Omega_2), \sup_{y \in \Omega_2} \text{dist}(y, \Omega_1)\right\}. \quad (\text{C.0.1})$$

Lemme C.2. Soit A et B deux opérateurs auto-adjoints agissant sur le même espace de Hilbert et ayant le même domaine, tels que $A - B$ est borné. Alors

$$d_H(\sigma(A), \sigma(B)) \leq \|A - B\|. \quad (\text{C.0.2})$$

Démonstration. Soit $\lambda \notin \sigma(A)$ tel que $d(\lambda, \sigma(A)) > \|A - B\|$. Alors l'opérateur $(B - A)(A - \lambda)^{-1}$ a une norme inférieure à 1 et $\text{Id} + (B - A)(A - \lambda)^{-1}$ est inversible avec un inverse borné. De là,

$$B - \lambda = \left(\text{Id} + (B - A)(A - \lambda)^{-1}\right)(A - \lambda)$$

est également inversible avec un inverse borné, ce qui montre que $\lambda \notin \sigma(B)$. En d'autres termes, aucun élément de $\sigma(B)$ ne peut être à une distance plus grande que $\|A - B\|$ de $\sigma(A)$, ce qui implique que

$$\sup_{E \in \sigma(B)} d(E, \sigma(A)) \leq \|A - B\|.$$

En échangeant A et B , le résultat est démontré. \square

Lemme C.3. *En reprenant la notation et le résultat du lemme C.1, posons $u := \tau_0 \tilde{u}$ et considérons l'opérateur H_ω comme dans (II.3.6). Avec la notation introduite dans l'hypothèse II.33(i), soit $m, M \in (1, 2)$. Alors il existe $\lambda_0 \in (0, 1)$ assez petit tel que l'hypothèse II.35 est vérifiée si m et M sont remplacés respectivement par $\lambda_0 m$ et $\lambda_0 M$.*

Démonstration. Pour des raisons de simplicité, on supposera que $m = M$. D'après le lemme C.1, on sait qu'il existe $\mu_0 \in]B_-, B_+[$ qui appartient au spectre de $H_{\tau_0} = H_0 + u(x)$. En appliquant (II.3.9), on peut montrer que μ_0 appartient aussi au spectre de H_ω pour ω appartenant à un ensemble de mesure 1, ainsi μ_0 est dans le spectre presque sûr Σ .

Considérons maintenant la famille $H_{\lambda, \omega} := H_0 + \lambda V_\omega$ avec $\lambda \in (0, 1)$. En multipliant le potentiel par λ , on peut réduire le support de h à $[-M\lambda, M\lambda]$. Comme V_ω est borné uniformément en ω , on sait par le lemme C.2 que le spectre $\sigma(H_{\lambda, \omega})$ varie comme une fonction lipschitzienne de λ , uniformément en ω .

On veut maintenant prouver que le spectre presque sûr Σ_λ est continu par rapport λ avec la distance de Hausdorff. Soit $E \in \Sigma_\lambda$ et $\epsilon > 0$. Il existe ω_E tel que $E \in \sigma(H_{\lambda \omega_E})$. Par le critère de Weyl, il existe ψ_E de norme 1 tel que

$$\|(H_{\lambda \omega_E} - E)\psi_E\| \leq \epsilon/10.$$

Il existe donc $\Lambda := \Lambda_{E, \epsilon, \lambda} \subset \mathbb{R}^d$ assez grand tel que $H_{\Lambda, \lambda \omega_E} := H_0 + V_{\Lambda, \lambda \omega_E}$ vérifie

$$\|(H_{\Lambda, \lambda \omega_E} - E)\psi_E\| \leq \epsilon/5.$$

Cette inégalité implique par le même critère de Weyl que l'opérateur $H_{\Lambda, \lambda \omega_E}$ a au moins un point E' de son spectre tel que $E' \in (E - \epsilon/5, E + \epsilon/5)$. D'après le lemme C.2, on peut trouver $\delta > 0$ tel que pour tout λ' vérifiant $|\lambda' - \lambda| < \delta$, la distance de Hausdorff entre le spectre de $H_{\Lambda, \lambda \omega_E}$ et celui de $H_{\Lambda, \lambda' \omega_E}$ est inférieure à $\epsilon/5$. Ainsi, il existe E'' dans $\sigma(H_{\Lambda, \lambda' \omega_E})$ tel que $|E'' - E| < \epsilon$. Enfin, par l'argument de Kirsch donné dans (II.3.9), on peut prouver que E'' appartient au spectre presque sûr de $H_{\lambda' \omega}$; autrement dit,

$$\sup_{E \in \Sigma_\lambda} d(E, \Sigma_{\lambda'}) < \epsilon, \quad \forall |\lambda' - \lambda| < \delta.$$

Cela implique en particulier que le spectre presque sûr de $H_{\lambda, \omega}$ converge (en tant qu'ensemble) vers le spectre de H_0 quand λ tend vers zéro. Ainsi, si λ est assez petit, il y a au moins une lacune qui se forme dans le spectre presque sûr de $H_{\lambda, \omega}$. Pour les mêmes raisons de continuité, ce spectre doit avoir une composante non vide dans $]B_-, B_+[$. \square

Preuve de la proposition II.37 Sous les conditions du lemme C.3, on sait qu'il existe une lacune $[B'_-, B'_+] \subset]B_-, B_+[$ dans le spectre presque sûr Σ de H_ω et, dans le même temps, soit $\Sigma \cap]B_-, B'_- [$ soit $\Sigma \cap]B'_-, B_+ [$ est non vide.

Supposons que $\Sigma \cap]B_-, B'_- [$ n'est pas vide. Soit $\tilde{B}_- \in]B_-, B'_- [$ la borne supérieure de cet ensemble (notons que $\tilde{B}_- < B'_-$ car Σ est fermé et on a toujours $\tilde{B}_- \in \Sigma$). Si $\lambda \in [0, 1]$,

on considère la famille $H_{\lambda\omega}$ et on note Σ_λ son spectre presque sûr. En tant qu'ensemble, Σ_λ varie continument en λ dans le distance de Hausdorff, comme nous l'avons vu dans le lemme C.3. Notons E_λ la borne supérieure de $\Sigma_\lambda \cap [B_-, B'_-]$. Comme $E_1 = \tilde{B}_-$, $E_0 = B_-$ et E_λ varie continument en λ , on peut conclure que E_λ remplit l'intervalle $[B_-, \tilde{B}_-]$. Enfin, comme $E_\lambda \in \Sigma_\lambda \subset \Sigma$, on en déduit que $[B_-, \tilde{B}_-] \subset \Sigma$, ainsi, aucune autre lacune ne peut apparaître dans l'intervalle.

Annexe D

Inégalités de Combes-Thomas

Cette section contient la preuve des lemmes II.45, II.46 et II.53. La démonstration du lemme II.45 suit de près la stratégie de [11, proposition 5.2].

Lemme D.1. *Soit W un potentiel à valeurs matricielles symétrique et borné et soit $H = D_S + W$ où $D_S = S\sigma \cdot (-i\nabla)S$ est comme dans (II.3.5) et S est un opérateur de coefficient borné comme défini par (II.3.4). Supposons que H a une lacune $]E_-, E_+[$ dans son spectre qui contient 0. Considérons χ_1 et χ_2 deux fonctions à support compact telles que $\|\chi_i\|_\infty \leq 1$. Pour $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^d$, on pose*

$$a_1 = \sup_{\mathbf{x} \in \text{supp}(\chi_1)} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0| \quad \text{et} \quad a_2 = \text{dist}(\mathbf{x}_0, \text{supp}(\chi_2)).$$

Pour $E \in]E_-, E_+[$, soit

$$v_\pm = \text{dist}(E, E_\pm) \quad \text{et} \quad v = \min(v_+, v_-).$$

Alors il existe une constante $c > 0$ telle que pour tout $E \in]E_-, E_+[$ on a :

$$\|\chi_1(H - E)^{-1}\chi_2\| \leq \frac{2}{v} e^{-c\sqrt{v_+v_-}}(a_2 - a_1). \quad (\text{D.0.1})$$

Démonstration. Soit $\epsilon > 0$ et $\langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_\epsilon := \sqrt{\epsilon + |\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^2}$. Pour $t > 0$, on définit sur $\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ l'opérateur (non auto-adjoint)

$$H_{t,\epsilon} := e^{-t\langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_\epsilon} H e^{t\langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_\epsilon} = H - tS\sigma \cdot (i\nabla \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_\epsilon)S.$$

L'opérateur $H_{t,\epsilon}$ est fermé sur le domaine de H . Soit $\psi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}^n)$ de norme 1. On notera $\psi^- = P_{]-\infty, E_-]} \psi$ et $\psi^+ = P_{[E_+, +\infty[} \psi$, où les P sont les projecteurs spectraux de H , on rappelle que $v_\pm = \text{dist}(E, E_\pm)$.

On a

$$\begin{aligned} \|(H_{t,\epsilon} - E)\psi\| &\geq \text{Re}(\langle \psi^+ - \psi^-, (H_{t,\epsilon} - E)(\psi^+ + \psi^-) \rangle) \\ &\geq v_+ \|\psi^+\|^2 + v_- \|\psi^-\|^2 - 2\|tS\sigma \cdot (i\nabla \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_\epsilon)S\| \|\psi^+\| \|\psi^-\|. \end{aligned}$$

On sait que la norme de $\nabla \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_\epsilon$ est bornée par un nombre indépendant de ϵ . Soit $t := c\sqrt{v_+v_-}$ où $c > 0$ est indépendant à la fois de E et ϵ et assez petit pour que :

$$\|tS\sigma \cdot (i\nabla \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \rangle_\epsilon)S\| < \sqrt{v_+v_-}/2.$$

On a alors

$$\|(H_{t,\epsilon} - E)\psi\| \geq 1/2 \min(v_+, v_-).$$

Ainsi, $H_{t,\epsilon} - E$ est inversible pour $E \in]E_-, E_+[$ et

$$\|(H_{t,\epsilon} - E)^{-1}\| \leq \frac{2}{v},$$

uniformément en ϵ . De là,

$$\begin{aligned} \|\chi_1(H - E)^{-1}\chi_2\| &= \|\chi_1 e^{t\langle \cdot, -\mathbf{x}_0 \rangle \epsilon} (H_{t,\epsilon} - E)^{-1} e^{-t\langle \cdot, -\mathbf{x}_0 \rangle \epsilon} \chi_2\| \\ &\leq \|\chi_1 e^{t\langle \cdot, -\mathbf{x}_0 \rangle \epsilon}\| \|(H_{t,\epsilon} - E)^{-1}\| \|e^{-t\langle \cdot, -\mathbf{x}_0 \rangle \epsilon} \chi_2\|. \end{aligned}$$

Le facteur central est majoré par $2/v$. En prenant la limite quand ϵ tend vers zéro, le facteur de gauche est majoré par e^{ta_1} et celui de droite par e^{-ta_2} . On a ainsi montré le lemme. \square

Preuve du lemme II.45. Sans perte de généralité, on peut supposer que la distance entre les supports vérifie $a \geq 10$. Soit $K = [-1/2, 1/2]^d$ le cube unité de \mathbb{R}^d . Soit g_γ la fonction indicatrice du cube $K_\gamma := \gamma + K$, $\gamma \in \mathbb{Z}^d$. On a

$$\chi_1(H_0 - E)^{-1}\chi_2 = \sum_{\gamma, \gamma'} g_\gamma \chi_1(H_0 - E)^{-1} \chi_2 g_{\gamma'}. \quad (\text{D.0.2})$$

La somme sur γ ne contient qu'un nombre fini de termes car χ_1 est à support compact. Pour toute paire $g_\gamma \chi_1$ et $g_{\gamma'} \chi_2$, on a D.1 dans lequel on choisit $\mathbf{x}_0 = \gamma$. On voit que dans ce cas $a_1 \leq 1$ et comme $a \geq 10$ on a également $a_2 \geq a/3 + |\gamma - \gamma'|/3$. Ainsi, (D.0.1) donne que

$$\|g_\gamma \chi_1(H_0 - E)^{-1} \chi_2 g_{\gamma'}\| \leq c_1 e^{-c_2 a} e^{-c_2 |\gamma - \gamma'|}$$

où c_1 et c_2 sont des constantes dépendant de l'intervalle I . On peut alors prendre la somme sur γ' pour tout γ et la preuve est finie. \square

Nous sommes maintenant prêts à montrer le lemme II.46.

Preuve du lemme II.46. Avec les mêmes notations que dans la preuve du lemme II.45, la stratégie est de montrer l'existence de deux constantes c_1 et c_2 telles que dans la norme trace on ait :

$$\|g_\gamma \chi_1(H_0 - E)^{-1} \chi_2 g_{\gamma'}\|_1 \leq c_1 e^{-c_2 a} e^{-c_2 |\gamma - \gamma'|}. \quad (\text{D.0.3})$$

Sans perte de généralité, on peut supposer que $a_0 = 10$ et $a \geq 10$. Dans ce cas, les paires γ et γ' donnant une contribution non nulle doivent vérifier $|\gamma - \gamma'| \geq 8$.

On considère alors $2d$ fonctions lisses à support compact $0 \leq f_j \leq 1$ qui satisfont à la condition suivante : $g_\gamma f_1 = g_\gamma$, $f_j f_{j+1} = f_j$ si $1 \leq j \leq 2d$ et le support de la fonction la plus « large » f_{2d} est contenu dans un hypercube de centre γ et de côté 2. En particulier, le support de f_j et celui des dérivées de f_{j+1} sont disjoints et $f_{2d} g_{\gamma'} = 0$.

Notons $R_0 := (H_0 - E)^{-1}$. On a $[f_j, R_0] = R_0 S(-i\sigma \cdot \nabla f_j) S R_0$ et

$$g_\gamma R_0 g_{\gamma'} = g_\gamma f_{2d} R_0 g_{\gamma'} = g_\gamma R_0 S(-i\sigma \cdot \nabla f_{2d}) S R_0 g_{\gamma'}$$

et, en répétant pour tout j , on trouve :

$$g_\gamma R_0 g_{\gamma'} = g_\gamma \prod_{j=1}^{2d} (R_0 S(-i\sigma \cdot \nabla f_j) S) \chi_{\text{supp}(f_{2d})} R_0 g_{\gamma'}.$$

Chaque facteur $R_0 S(-i\sigma \cdot \nabla f_j) S$ appartient à \mathcal{T}_{2d} avec une norme indépendante de γ et γ' . Le produit est donc à trace. De plus, en appliquant le lemme D.1 à la paire $\chi_{\text{supp}(f_{2d})}$ et $g_{\gamma'}$ avec $\mathbf{x}_0 = \gamma$, on obtient $a_2 - a_1 \geq |\gamma - \gamma'|/10 + a/10$ et

$$\|\chi_{\text{supp}(f_{2d})} R_0 g_{\gamma'}\| \leq C e^{-\alpha a} e^{-\alpha |\gamma - \gamma'|}.$$

Cela démontre (D.0.3). Comme il n'y a qu'un nombre fini de g_γ qui donnent une contribution non nulle dans (D.0.2) et que ce nombre est proportionnel à la mesure de Lebesgue du support de χ_1 , la preuve est terminée. \square

Preuve du lemme II.53. La preuve est exactement la même que celle du lemme II.46.

La première étape est de majorer la norme \mathcal{T}_{2d} du produit de la résolvante par une fonction suffisamment décroissante. D'après l'inégalité (II.3.2), on a que pour E et y dans les intervalles spécifiés, $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$ et $\mathbf{q} \in \mathbb{C}^n$,

$$\|(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - E - iy)\mathbf{q}\|^2 \geq \|(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - E)\mathbf{q}\|^2 + |y|^2 \|\mathbf{q}\|^2 \geq (|y|^2 + \max(C\|\mathbf{p}\| - |E|, 0)^2) \|\mathbf{q}\|^2. \quad (\text{D.0.4})$$

Ainsi,

$$\left\| \int_{\mathbb{R}^d} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} - E - iy)^{-2d} d\mathbf{p} \right\| \leq \int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{\sqrt{|y|^2 + \max(C\|\mathbf{p}\| - |E|, 0)^2}^{2d}} d\mathbf{p} \quad (\text{D.0.5})$$

$$\leq \int_{\|\mathbf{p}\| \leq 2E_m/C} \frac{1}{|y|^{2d}} d\mathbf{p} + \int_{\|\mathbf{p}\| \geq 2E_m/C} \frac{2^{2d}}{C\|\mathbf{p}\|^{2d}} d\mathbf{p} \leq C' + \frac{C''}{|y|^{2d}} \quad (\text{D.0.6})$$

En utilisant le résultat de Birman et Solomyak ([58, théorème 4.1]) et les identités de la résolvante comme dans la remarque II.34 (iii), on peut montrer que, pour χ une fonction à support compact sur \mathbb{R}^d , on a pour tous ω , E , y :

$$\|R_\omega(E + iy)\chi\|_{2d} \leq \frac{C}{|y|} \|\chi\|_{L^{2d}} \quad (\text{D.0.7})$$

avec une constante C dépendant seulement de E_m , Y , C et d .

Nous allons maintenant montrer l'inégalité en norme d'opérateur. Nous allons reprendre la preuve du lemme D.1 mais en prenant la partie imaginaire à la place de la partie réelle. On a donc que pour tous $t, \epsilon > 0$, ψ de norme 1, E et $y \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} \|(H_{t,\epsilon} - E - iy)\psi\| &\geq |\text{Im}(\langle \psi, (H_{t,\epsilon} - E - iy)\psi \rangle)| \\ &= |\langle \psi, tS\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \langle x - x_0 \rangle_\epsilon) S + y \rangle \psi| \\ &\geq |y| - |\langle \psi, tS\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \langle x - x_0 \rangle_\epsilon) S \rangle \psi| \end{aligned}$$

En prenant t assez petit pour que $\|tS\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \langle x - x_0 \rangle_\epsilon) S\| < \frac{|y|}{2}$, on trouve que la norme est plus grande que $\frac{|y|}{2}$. En continuant comme dans la preuve du lemme D.1, on trouve que

$$\|\chi_1(H_\omega - E - iy)^{-1}\chi_2\| \leq \frac{2}{|y|} e^{-c|y|(a_2 - a_1)}. \quad (\text{D.0.8})$$

Il suffit ensuite de suivre la preuve du lemme II.46 pour obtenir que

$$\|\chi_1(H_\omega - E - iy)^{-1}\chi_2\|_1 \leq \frac{D}{|y|^{2d+1}} |\text{supp}(\chi_1)| e^{-\alpha|y|^a}. \quad (\text{D.0.9})$$

\square

Bibliographie

- [1] M. AIZENMAN ET S. MOLCHANOV, *Localization at large disorder and at extreme energies : an elementary derivation*, Comm. Math. Phys., 157 (1993), p 245.
- [2] M. AIZENMAN ET S. WARZEL, *Random Operators : Disorder Effects on Quantum Spectra and Dynamics*, vol. 168 de Graduate Studies in Mathematics, Amer. Math. Soc., 2015.
- [3] P. ANDERSON, *Absence of diffusion in certain random lattices*, Phys. Rev., 109 (1958), p 1492.
- [4] J.-M. BARBAROUX, J.-M. COMBES ET P. HISLOP, *Localization near band edges for random Schrödinger operators*, Helv. Phys. Acta, 70 (1997), p. 16–43.
- [5] J.-M. BARBAROUX, H. CORNEAN, L. LE TREUST ET E. STOCKMEYER, *Resolvent convergence to Dirac operators on planar domains*, Ann. Henri Poincaré, 20 (2019), p. 1877–1891.
- [6] J.-M. BARBAROUX, H. CORNEAN ET E. STOCKMEYER, *Spectral gaps in graphene antidot lattices*, Integral Equations Operator Theory, 89 (2017), p. 631–646.
- [7] J.-M. BARBAROUX, H. CORNEAN ET S. ZALCZER, *Localization for gapped Dirac Hamiltonians with random perturbations : Application to graphene antidot lattices*, Doc. Math., 24 (2019), p. 65–93.
- [8] ———, *Gap opening in the spectrum of some Dirac-like pseudo-differential operators*. arXiv :2002.00422 [math-ph], 2020.
- [9] R. BENGURIA, S. FOURNAIS, E. STOCKMEYER ET H. VAN DEN BOSCH, *Spectral gaps of Dirac operators describing graphene quantum dots*, Mathematical Physics, Analysis and Geometry, 20 (2017).
- [10] J. BOURGAIN ET C. E. KENIG, *On localization in the continuous Anderson-Bernoulli model in higher dimension*, Invent. Math., 161 (2005), p. 389–426.
- [11] P. BRIET ET H. CORNEAN, *Locating the spectrum for magnetic Schrödinger and Dirac operators*, Comm. Partial Differential Equations, 27 (2002), p. 1079–1101.
- [12] S. BRUN, M. THOMSEN ET T. PEDERSEN, *Electronic and optical properties of graphene antidot lattices : comparison of Dirac and tight-binding models*, J. Phys. Condens. Matter, 26 (2014), p 265301.
- [13] A. CASTRO NETO, F. GUINEA, N. PERES, K. NOVOSELOV ET A. GEIM, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys., 81 (2009), p. 109–162.
- [14] J.-M. COMBES ET P. HISLOP, *Localization for some continuous, random Hamiltonians in d -dimensions*, J. Funct. Anal., 124 (1994), p. 149–180.
- [15] R. DEL RIO, S. JITOMIRSKAYA, Y. LAST ET B. SIMON, *What is localization ?*, Phys. Rev. Lett., 75 (1995), p. 117–119.

- [16] M. DVORAK, W. OSWALD ET Z. WU, *Bandgap opening by patterning graphene*, Sci. Rep., 3 (2013), p 2289.
- [17] M. EZAWA, *Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons*, Phys. Rev. B, 73 (2006), p 045432.
- [18] C. FEFFERMAN ET M. WEINSTEIN, *Honeycomb lattice potentials and Dirac points*, J. Amer. Math. Soc., 25 (2012), p. 1169–1220.
- [19] —, *Wave packets in honeycomb structures and two-dimensional Dirac equations*, Comm. Math. Phys., 326 (2014), p. 251–286.
- [20] C. L. FEFFERMAN, J. P. LEE-THORP ET M. I. WEINSTEIN, *Honeycomb Schrödinger operators in the strong binding regime*, Comm. Pure Appl. Math., 71 (2018), p. 1178–1270.
- [21] C. FERMANIAN KAMMERER, *Chaos en mécanique quantique*, Les Éditions de l'École polytechnique, 2014, chap. Opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques.
- [22] A. FIGOTIN ET P. KUCHMENT, *Band-gap structure of spectra of periodic dielectric and acoustic media. II. Two-dimensional photonic crystals*, SIAM J. Appl. Math., 56 (1996), p. 1561–1620.
- [23] J. FRÖHLICH ET T. SPENCER, *Absence of diffusion in the Anderson tight binding model for large disorder or low energy*, Comm. Math. Phys., 88 (1983), p. 151–184.
- [24] J. FRÖHLICH, F. MARTINELLI, E. SCOPPOLA ET T. SPENCER, *Constructive proof of localization in the Anderson tight binding model*, Comm. Math. Phys., 101 (1985), p. 21–46.
- [25] A. GEIM ET K. NOVOSELOV, *The rise of graphene*, Nature Mater, 6 (2007), p. 183–191.
- [26] F. GERMINET ET S. DE BIÈVRE, *Dynamical localization for discrete and continuous random Schrödinger operators*, Comm. Math. Phys, 194 (1997), p. 323–341.
- [27] F. GERMINET ET A. KLEIN, *Bootstrap multiscale analysis and localization in random media*, Comm. Math. Phys., 222 (2001), p. 415–448.
- [28] F. GERMINET ET A. KLEIN, *A characterization of the Anderson metal-insulator transport transition*, Duke Math. J., 124 (2004), p. 309–350.
- [29] F. GERMINET ET A. KLEIN, *A comprehensive proof of localization for continuous Anderson models with singular random potentials*, J. Eur. Math. Soc., 15 (2013), p. 55–143.
- [30] C. D. GODSIL ET B. MOHAR, *Walk generating functions and spectral measures on infinite graphs*, Linear Algebra Appl., 107 (1998), p. 191–206.
- [31] I. GOLDSHEID, S. MOLCHANOV ET L. PASTUR, *Pure point spectrum of stochastic one dimensional Schrödinger operators*, Funct. Anal. App., 11 (1977), p. 1–8.
- [32] S. J. GUSTAFSON ET I. SIGAL, *Mathematical concepts of quantum mechanics*, Universitext, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [33] P. HISLOP ET M. KRISHNA, *Eigenvalue statistics for random Schrödinger operators with non rank one perturbations*, Comm. Math. Phys., 340 (2015), p. 125–143.
- [34] T. KATO, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Classics in Mathematics, Springer Berlin Heidelberg, 2012.

- [35] W. KIRSCH, *Random Schrödinger operators. A course*, in Schrödinger operators (Sønderborg, 1988), vol. 345 de Lecture Notes in Phys., Springer, Berlin, 1989, p. 264–370.
- [36] —, *An invitation to random Schrödinger operators*, in Random Schrödinger Operators, vol. 25 de Panoramas et Synthèses, Société Mathématique de France, 2008.
- [37] W. KIRSCH ET F. MARTINELLI, *On the ergodic properties of the spectrum of general random operators*, J. Reine Angew. Math., 315 (1982), p. 141–156.
- [38] W. KIRSCH ET B. METZGER, *The integrated density of states for random Schrödinger operators*, in : F. Gesztesy, P. Deift, C. Galvez, P. Perry, W. Schlag (Editors) : Spectral Theory and Mathematical Physics : A Festschrift in Honor of Barry Simon’s 60th Birthday., (2007), p. 649–696.
- [39] C. KITTEL, *Physique de l’état solide*, Dunod, 8^e éd., 2007.
- [40] A. KLEIN, *Multiscale analysis and localization of random operators*, in Random Schrödinger Operators, vol. 25 de Panoramas et Synthèses, Société Mathématique de France, 2008.
- [41] A. KLEIN ET A. KOINES, *A general framework for localization of classical waves. II. Random media*, Math. Phys. Anal. Geom., 7 (2004), p. 151–185.
- [42] A. KLEIN, A. KOINES ET M. SEIFERT, *Generalized eigenfunctions for waves in inhomogeneous media*, J. Funct. Anal., 190 (2002), p. 255 – 291.
- [43] H. KUNZ ET B. SOUILLARD, *Sur le spectre des opérateurs aux différences finies aléatoires.*, Comm. Math. Phys., 78 (1980), p. 201–246.
- [44] E. A. LAIRD, F. KUEMMETH, G. A. STEELE, K. GROVE-RASMUSSEN, J. NYGÅRD, K. FLENSBERG ET L. KOUWENHOVEN, *Quantum transport in carbon nanotubes*, Rev. Mod. Phys., 87 (2015), p. 703–764.
- [45] L. LE TREUST ET T. OURMIÈRES-BONAFOS, *Self-adjointness of Dirac operators with infinite mass boundary conditions in sectors*, Ann. Henri Poincaré, 19 (2018), p. 1465–1487.
- [46] E. LIEB ET M. LOSS, *Analysis*, CRM Proceedings & Lecture Notes, American Mathematical Society, 2001.
- [47] E. MCCANN ET M. KOSHINO, *The electronic properties of bilayer graphene*, Rep. Prog. Phys., 76 (2013), p 056503.
- [48] B. MOHAR ET W. WOESS, *A survey on spectra of infinite graphs*, Bull. London Math. Soc., 21 (1989), p. 209–234.
- [49] T. MUTHUKUMAR, *Bloch-floquet transform*, in ATM Workshop on PDE and Fourier Analysis, Uttarpradesh, 2014.
- [50] G. NENCIU, *Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields : rigorous justification of the effective Hamiltonians*, Rev. Mod. Phys., 63 (1991), p. 91–127.
- [51] K. S. NOVOSELOV, V. I. FAL’KO, L. COLOMBO, P. R. GELLERT, M. G. SCHWAB ET K. KIM, *A roadmap for graphene*, Nature, 490 (2012), p. 192–200.
- [52] L. PASTUR, *Spectra of random self-adjoint operators*, Russian Math. Surv., 28 (1973), p 1.
- [53] —, *Spectral properties of disordered systems in the one-body approximation*, Comm. Math. Phys., 75 (1980), p. 179–196.

- [54] J. PEDERSEN, T. GUNST, T. MARKUSSEN ET T. PEDERSEN, *Graphene antidot lattice waveguides*, Phys. Rev. B, 86 (2012), p 245410.
- [55] J. PEDERSEN ET T. PEDERSEN, *Band gaps in graphene via periodic electrostatic gating*, Phys. Rev. B, 85 (2012), p 235432.
- [56] M. REED ET B. SIMON, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. IV : Analysis of operators, Academic Press, New York, 1978.
- [57] ———, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. I : Functional Analysis, Elsevier Science, 1981.
- [58] B. SIMON, *Trace Ideals and Their Applications*, Mathematical Surveys and Monographs, American Mathematical Society, 2010.
- [59] Y.-W. SON, M. COHEN ET S. LOUIE, *Energy gaps in graphene nanoribbons*, Phys. Rev. Lett., 97 (2006), p 216803.
- [60] E. STOCKMEYER ET S. VUGALTER, *Infinite mass boundary conditions for Dirac operators*, J. Spec. Theory, 9 (2019), p. 569–600.
- [61] G. TESCHL, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators*, vol. 157 de Graduate Studies in Mathematics, Amer. Math. Soc., Providence, 2014.
- [62] B. THALLER, *The Dirac Equation*, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [63] P. R. WALLACE, *The band theory of graphite*, Phys. Rev., 71 (1947), p. 622–634.
- [64] P. WALTERS, *An introduction to ergodic theory*, vol. 79 de Graduate texts in Mathematics, Springer Science & Business Media, 2000.
- [65] S. YUAN, R. ROLDÁN, A.-P. JAUHO ET M. KATSNELSON, *Electronic properties of disordered graphene antidot lattices.*, Phys. Rev. B, 87 (2013), p 085430.

Sylvain ZALCZER

Centre de physique théorique, université de Toulon

Propriétés spectrales de modèles de graphène périodique et désordonné

Résumé en français

Cette thèse traite de différents aspects de la théorie spectrale d'opérateurs utilisés pour modéliser le graphène. Elle est constituée de deux parties.

La première traite du cas périodique. Je commence par présenter la théorie générale des systèmes périodiques. J'introduis ensuite les différents modèles de graphène en les comparant. Enfin, je m'intéresse à différentes façons de rendre le graphène semi-conducteur. Je fais en particulier une étude de nanorubans de divers types et présente un résultat d'ouverture d'une lacune spectrale pour un opérateur pseudo-différentiel.

La deuxième partie traite du cas désordonné. Je commence par présenter la théorie générale des opérateurs aléatoires. J'explique ensuite succinctement l'analyse multi-échelles qui est la méthode permettant de montrer le résultat essentiel de cette théorie, appelé localisation d'Anderson. Enfin, je donne la preuve de cette localisation pour un modèle de graphène ainsi qu'un résultat sur la densité d'états intégrée.

Mot clés : opérateur de Dirac, localisation d'Anderson, opérateurs aléatoires.

Spectral properties of models of periodic and disordered graphene

Résumé en anglais

This thesis deals with various aspects of spectral theory of operators used to model graphene. It is made of two parts.

The first part deals with the periodic case. I begin by presenting a general theory of periodic systems. I introduce then different models of graphene and compare them. Finally, I look at various ways to make graphene a semiconductor. In particular, I study different types of nanoribbons and I give a result of gap opening for a pseudodifferential operator.

The second part deals with the disordered case. I begin by presenting a general theory of random operators. Then, I briefly explain multiscale analysis, which is the method used to prove the main result of this theory, which is called Anderson localization. Finally, I give a proof of this localization for a model of graphene and a result on the integrated density of states.

Keywords : Dirac operator, Anderson localization, random operators.