

Etude spectrale d'opérateur de Schrödinger à potentiels périodiques :

Lucie Levadoux

30 Août 2024

Cadre du stage



Research Groups of the School of Mathematics

- Applied and Computational Mathematics
- Geometry, Algebra, Mathematical Physics, and Topology
- Mathematical Analysis
- Mathematics Education
- Statistics

Cadre du stage



M. Marco Marletta
Head of Mathematical
Analysis Research Group

My interests are in operator-theoretic problems for ordinary and partial differential operators, including forward and inverse problems for Maxwell and Schrödinger equations.

My most recent work has concerned:

- Essential numerical ranges for unbounded operators, with applications to numerics;
- Spectral problems for non-Hermitian Maxwell and Drude-Lorentz systems.

Cadre du stage

Abacws



- School of Mathematics
- School of Computer Science and Informatics

Sommaire

1 Introduction

2 Outils

- Transformée de Floquet-Bloch
- Changement d'opérateurs
- Matrices de différentiation spectrale

3 Premiers pas en 1D

4 Premiers pas en 2D

5 Pistes explorées

- Trouver de bonne valeurs de k
- Identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

6 Conclusion

Introduction

Opérateur de Schrödinger:

$$-\Delta\psi + V\psi = \lambda\psi$$

Dans notre cas :

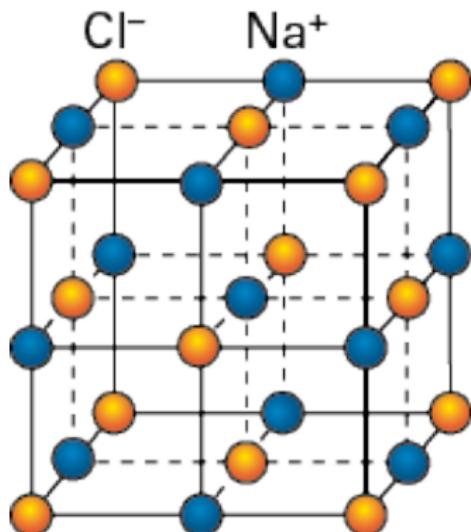
- V périodique
- V borné

→ opérateur de Hill:

$$H = -\Delta + V_{\text{per}}$$

Domaine :

- $H^2(\mathbb{R})$ en 1D
- $H^2(\mathbb{R})$ en 2D



Introduction

Résultats connus pour V_{per} réel :

$\sigma(H)$ est un spectre de bandes. 2 cas radicalement différents :

- dimension 1 : Les bandes ne peuvent pas se recouper. Elles sont de plus en plus rapprochées et de plus en plus longues. Un nombre infini de trous si V n'est pas constant.
- dimension $n > 1$: Les bandes peuvent se recouper. Toujours un nombre fini de trous. (Conjecture de Bethe-Sommerfeld)

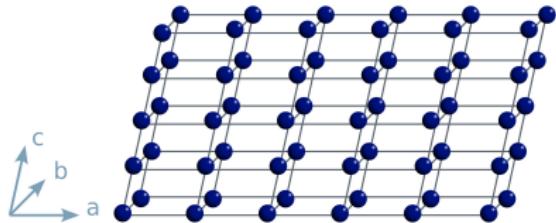
Que se passe-t-il pour V_{per} complexe ?

- en 1D
- en 2D

Outil 1 : Transformée de Floquet-Bloch

On se ramène à un problème sur une maille élémentaire \mathcal{M} .

$$\mathcal{M} = [0, a]\mathbf{e}_1 + [0, b]\mathbf{e}_2 + [0, c]\mathbf{e}_3$$



Soit $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$, on considère $H_{\mathbf{k}} = -\Delta + V_{|\mathcal{M}}$ de domaine $\text{Dom}_{\mathbf{k}}$:

$$\psi \in H^2(\mathcal{M}), \begin{cases} \psi(a, \cdot, \cdot) = e^{ik_1 a} \psi(0, \cdot, \cdot) & \partial_{x_1} \psi(a, \cdot, \cdot) = e^{ik_1 a} \psi(0, \cdot, \cdot) \\ \psi(\cdot, b, \cdot) = e^{ik_2 b} \psi(\cdot, 0, \cdot) & \partial_{x_2} \psi(\cdot, b, \cdot) = e^{ik_2 b} \psi(\cdot, 0, \cdot) \\ \psi(\cdot, \cdot, c) = e^{ik_3 c} \psi(\cdot, \cdot, 0) & \partial_{x_3} \psi(\cdot, \cdot, c) = e^{ik_3 c} \psi(\cdot, \cdot, 0) \end{cases}$$

Théorème : $\sigma(H) = \bigcup_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \sigma(H_{\mathbf{k}})$

avec $\mathcal{B} = \left[0, \frac{2\pi}{a}\right] \times \left[0, \frac{2\pi}{b}\right] \times \left[0, \frac{2\pi}{c}\right]$ la zone de Brillouin

Outil 2 : Changer H_k pour simplifier Dom_k

On pose $\psi(x_1, x_2, x_3) = e^{ik_1x_1 + ik_2x_2 + ik_3x_3} \phi(x_1, x_2, x_3)$.

Calculs pour $k_2 = k_3 = 0$.

- $H_{k_1}\psi = (-\Delta + V)\psi = e^{ik_1x_1} \left[\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - 2ik_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + k_1^2 \right) + V \right] \phi$
- $\psi(a) = e^{ik_1 a} \psi(0) \iff \phi(a) = \phi(0)$

Soit l'opérateur $H_{(\mathbf{k})} = \left(-\partial_{x_n}^2 - 2ik_n \partial_{x_n} + k_n^2 \right)_{n=1,2,3} + V$ de domaine $\text{Dom}_{\text{per}} :=$

$$\phi \in H^2(\mathcal{M}), \begin{cases} \phi(a, \cdot, \cdot) = \phi(0, \cdot, \cdot) & \partial_{x_1} \phi(a, \cdot, \cdot) = \partial_{x_1} \phi(0, \cdot, \cdot) \\ \phi(\cdot, b, \cdot) = \phi(\cdot, 0, \cdot) & \partial_{x_2} \phi(\cdot, b, \cdot) = \partial_{x_2} \phi(\cdot, 0, \cdot) \\ \phi(\cdot, \cdot, c) = \phi(\cdot, \cdot, 0) & \partial_{x_3} \phi(\cdot, \cdot, c) = \partial_{x_3} \phi(\cdot, \cdot, 0) \end{cases}$$

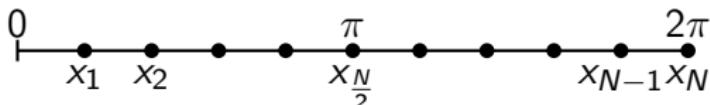
On a : $\sigma(H_k) = \sigma(H_{(\mathbf{k})})$

Outil 3: Matrices de différentiation spectrale

En dimension 1,

- $\text{Dom}_{\text{per}} = \{v \in H^2([0, a]), v(a) = v(0) \quad v'(a) = v(0)\}$
- $k \in \mathcal{B} = [0, \frac{2\pi}{a}]$
- $H_{(k)} = \left(-\frac{d^2}{dx^2} - 2ik \frac{d}{dx} + k^2\right) + V$

On va approximer $v \in \text{Dom}_{\text{per}}$ par un vecteur $v \in \mathbb{R}^N$. $v_j := v(x_j)$
On prend la période a égale à 2π donc k varie entre 0 et 1.



Comment approximer $H_{(k)}v$? i.e. $\frac{d}{dx}v$ et $\frac{d^2}{dx^2}v$?

Outil 3: Matrices de différentiation spectrale

On prend un interpolant trigonométrique \tilde{p} de v .

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} v(x_j) \approx \tilde{p}'(x_j) \\ \frac{d^2}{dx^2} v(x_j) \approx \tilde{p}^{(2)}(x_j) \end{cases}$$

Choix de l'interpolant \tilde{p} .

$$\tilde{p}(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} e^{ikx} \hat{v}_k \quad \text{avec} \quad \hat{v}_k = h \sum_{j=1}^N e^{-ikx_j} v_j$$

Proposition: $\tilde{p}(x) = \sum_{j=1}^N v_j S_N(x - x_j)$

avec la fonction sinc périodique $S_N(x) = \frac{\sin(\frac{N}{2}x)}{N \tan(\frac{x}{2})}$

Outil 3: Matrices de différentiation spectrale

$$\tilde{p}^{(k)}(x_i) = \sum_{j=1}^N v_j S_N^{(n)}(x_i - x_j) \implies \frac{d^k}{dx^k} v = \tilde{D}^{(n)} v \quad \text{avec} \quad \tilde{D}_{ij}^{(n)} = S_N^{(n)}(x_i - x_j)$$

Dérivée à l'ordre 1:

$$\tilde{D} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \cot(\frac{1h}{2}) & -\frac{1}{2} \cot(\frac{2h}{2}) & \cdots & \cdots & \frac{1}{2} \cot(\frac{(N-1)h}{2}) \\ -\frac{1}{2} \cot(\frac{1h}{2}) & 0 & \frac{1}{2} \cot(\frac{1h}{2}) & & & \vdots \\ \frac{1}{2} \cot(\frac{2h}{2}) & -\frac{1}{2} \cot(\frac{1h}{2}) & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \frac{1}{2} \cot(\frac{1h}{2}) & \frac{1}{2} \cot(\frac{2h}{2}) \\ \vdots & & & & -\frac{1}{2} \cot(\frac{1h}{2}) & 0 \\ -\frac{1}{2} \cot(\frac{(N-1)h}{2}) & \cdots & \cdots & \frac{1}{2} \cot(\frac{2h}{2}) & -\frac{1}{2} \cot(\frac{1h}{2}) & 0 \end{pmatrix}$$

Remarque : Pourquoi un interpolant trigonométrique ?

Interpolant trigonométrique:

- De degré $\frac{N}{2}$: une combinaison linéaire de $1, \cos(x), \sin(x), \cos(2x), \sin(2x), \dots, \cos(\frac{N}{2}x)$
- Matrices $\tilde{D}^{(k)}$ denses
- Petites valeurs de N

Interpolant polynomial:

- De degré $n << N$ (en pratique $n = 4$ suffit)
- Matrices creuses (($n + 1$)-diagonales)
- Grandes valeurs de N

Premiers pas en 1D

$$\sigma(H) = \bigcup_{k \in \mathcal{B}_{1D}} \sigma(H_k) = \bigcup_{k \in [0, \frac{2\pi}{a}]} \sigma(H_k)$$

$k \in [0, 1] \rightarrow \text{linspace}(0, 1, n)$

$$H_{(k)} \rightarrow \tilde{H}_{(k)} := (-\tilde{D}^{(2)} - 2ik\tilde{D} + k^2I) + V \in M_N(\mathbb{C})$$

Calcul des valeurs propres de $\tilde{H}_{(k)}$:

- `eigs(A, Neig, "smallestreal")`
- `eigs(A, Neig, "smallestabs")`

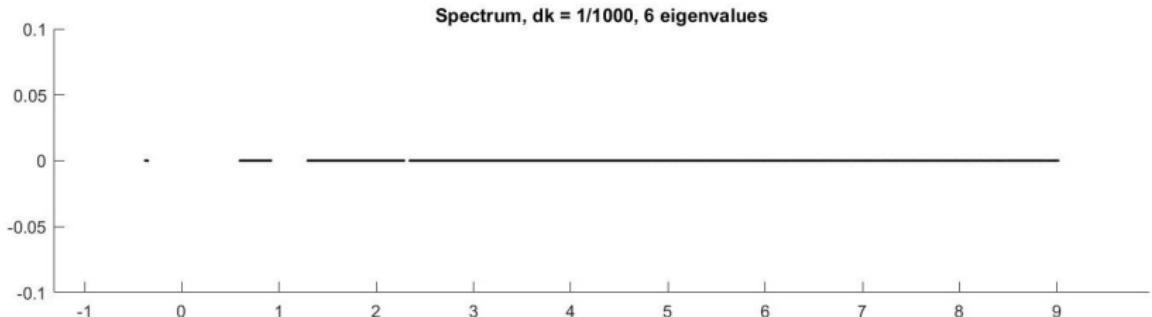
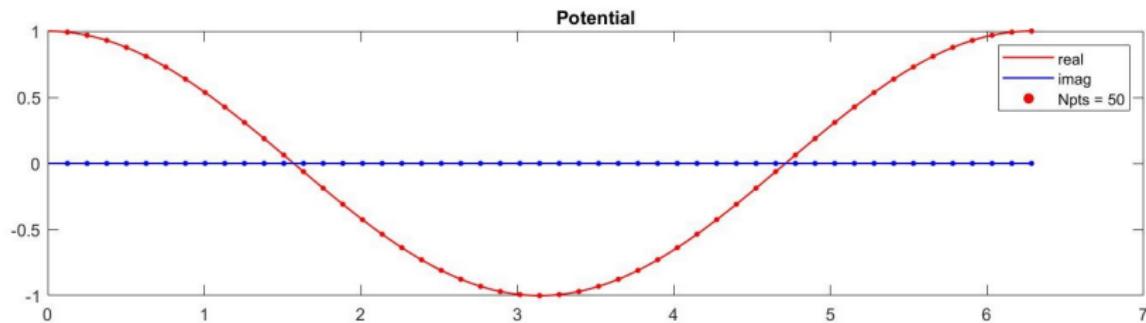
Examinons les résultats pour $n = 1000$ valeurs de k et $N = 50$.

V réel : Bandes spectrales sur l'axe réel

$$\sigma(H) = \bigcup_{n \in \mathbb{N}^*} [a_n, b_n] \quad a_n, b_n \in \mathbb{R}$$

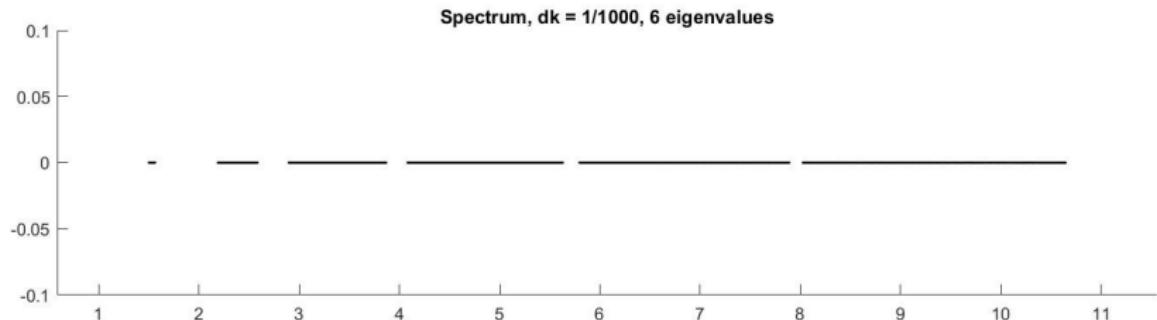
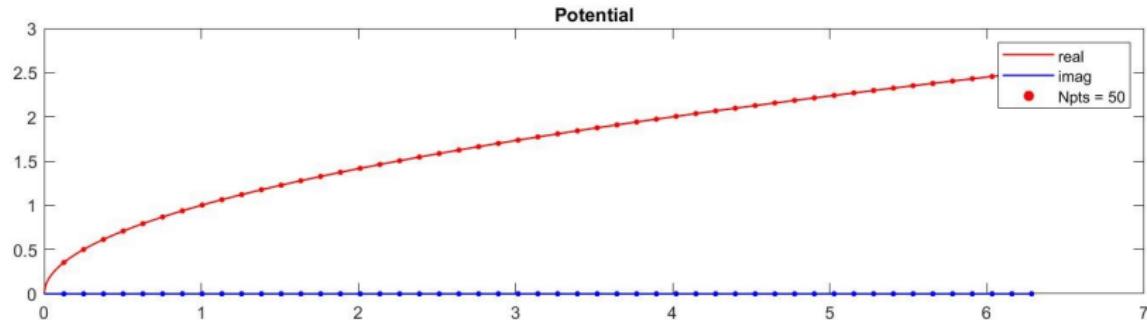
- Chaque bande correspond à l'ensemble des valeurs couvertes par $\lambda_n(k)$ lorsque k varie dans la zone de Brillouin entière $\mathcal{B}_{1D} = [0, 1]$.
- Les bandes ne se recoupent pas : $\forall n \in \mathbb{N}^*, b_n \leq a_{n+1}$.

V réel : Exemples de potentiels



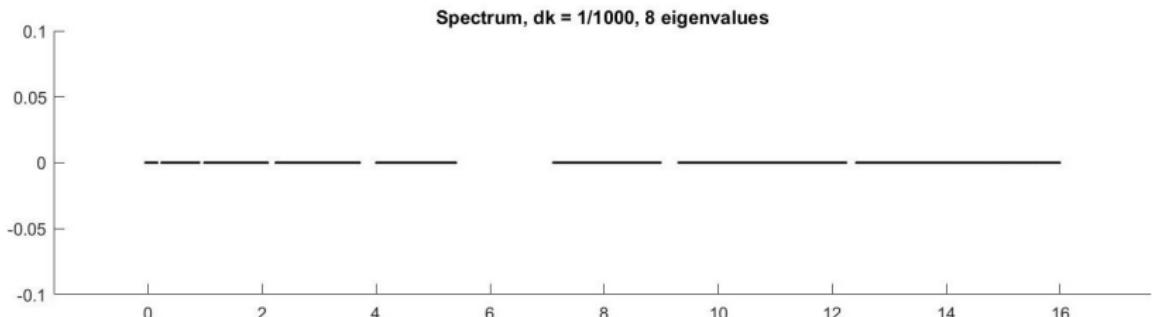
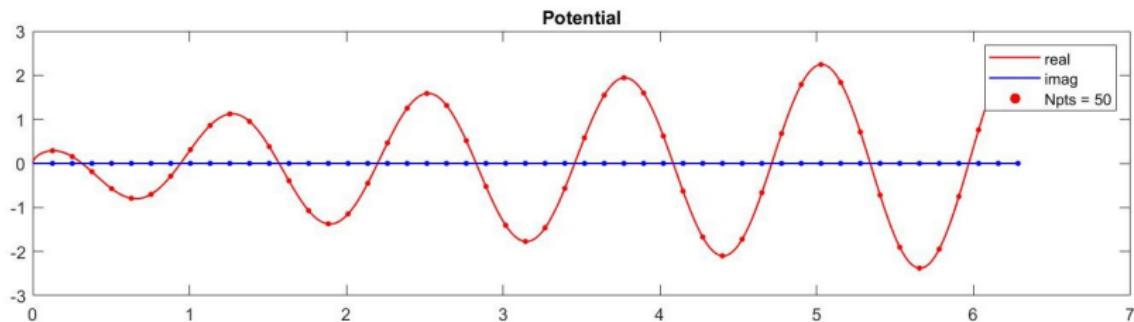
$$V(x) = \cos(x)$$

V réel : Exemples de potentiels



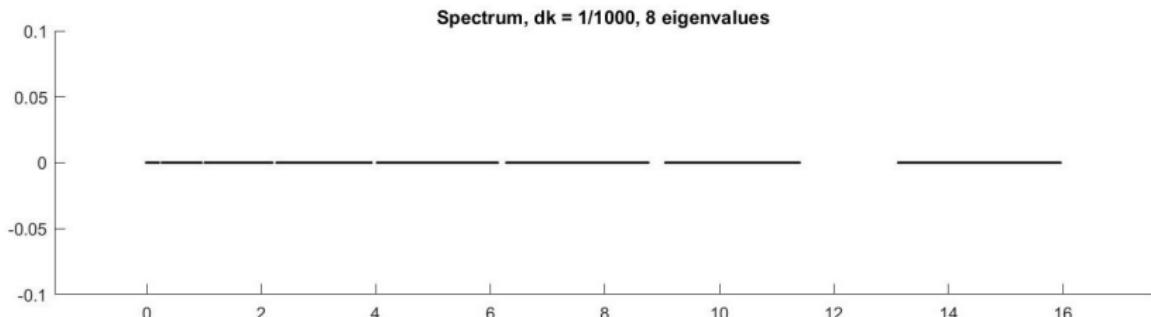
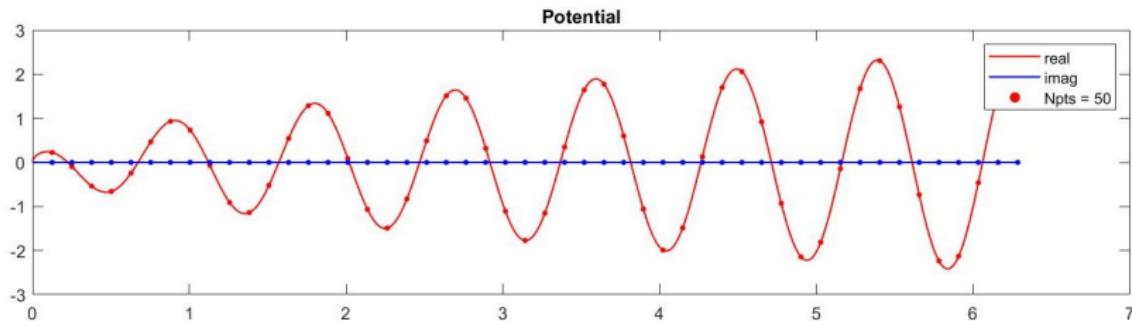
$$V(x) = \sqrt{x}$$

V réel : Exemples supplémentaires



$$V(x) = \sqrt{x} \cos(5x)$$

V réel : Exemples supplémentaires



$$V(x) = \sqrt{x} \cos(7x)$$

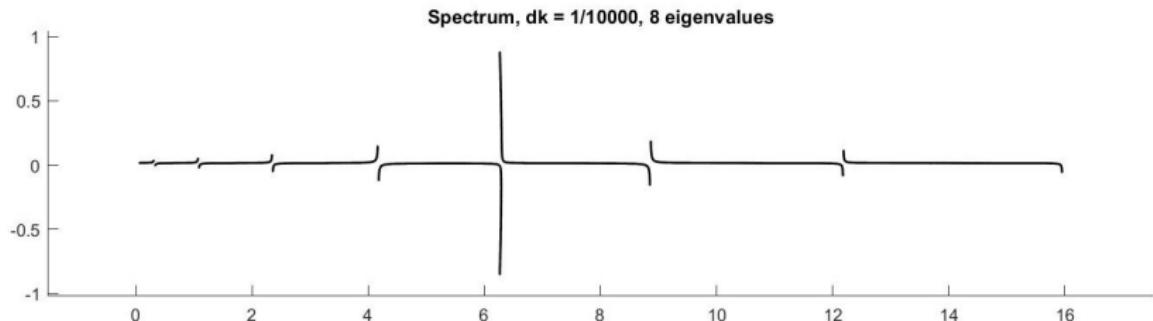
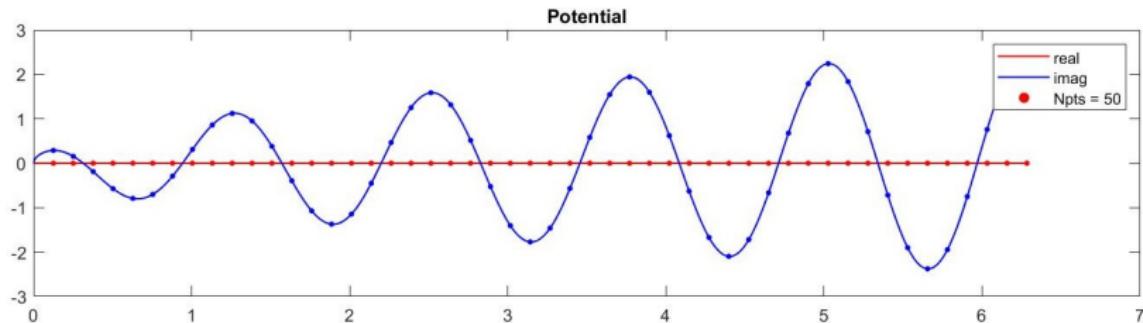
V complexe : Bandes de spectres décolées

Si le potentiel est complexe, le spectre n'est plus confiné à l'axe réel. Cependant, il prend toujours la forme de bandes.

$$\sigma(H) = \bigcup_{n \in \mathbb{N}^*} a_n \sim b_n \quad a_n, b_n \in \mathbb{C}$$

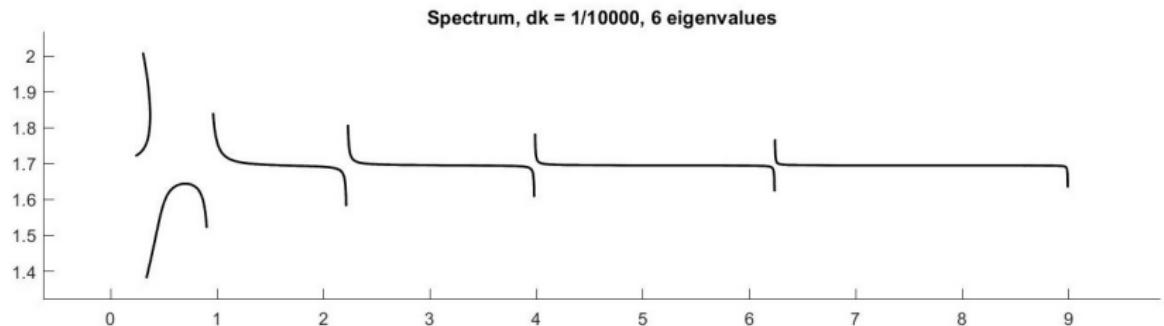
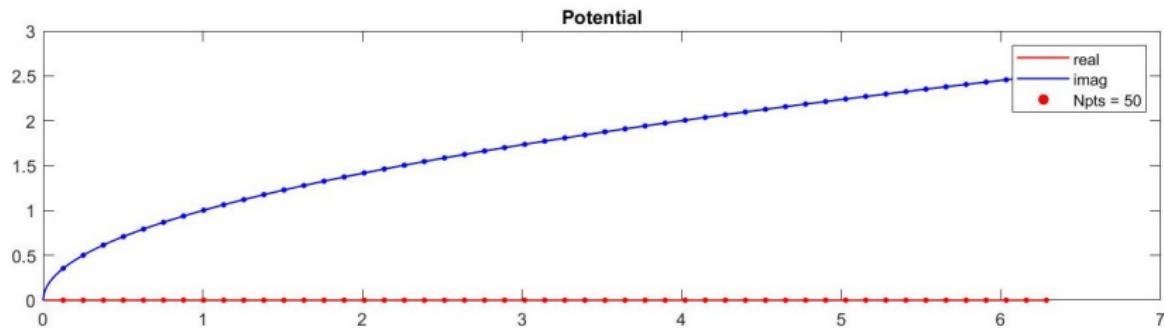
- Chaque bande correspond à l'ensemble des valeurs couvertes par $\lambda_n(k)$ lorsque k varie dans la zone de Brillouin entière $\mathcal{B}_{1D} = [0, 1]$.
- Les bandes ne se coupent pas.

V complexe : Exemples de potentiels



$$V(x) = i\sqrt{x} \cos(5x)$$

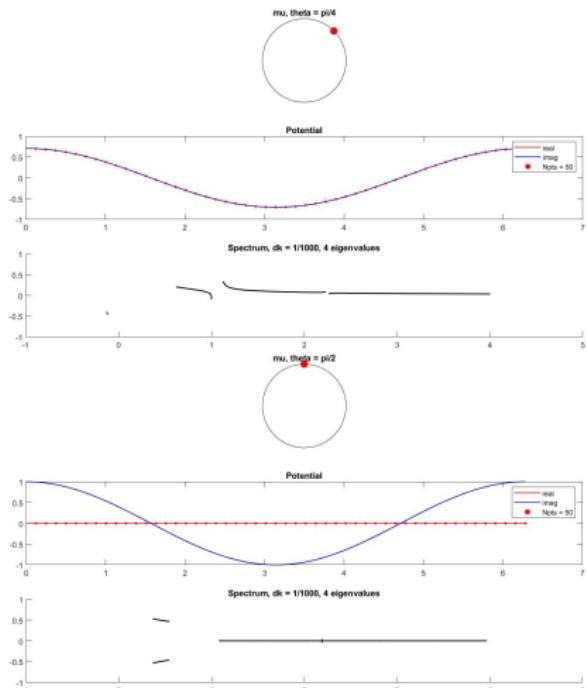
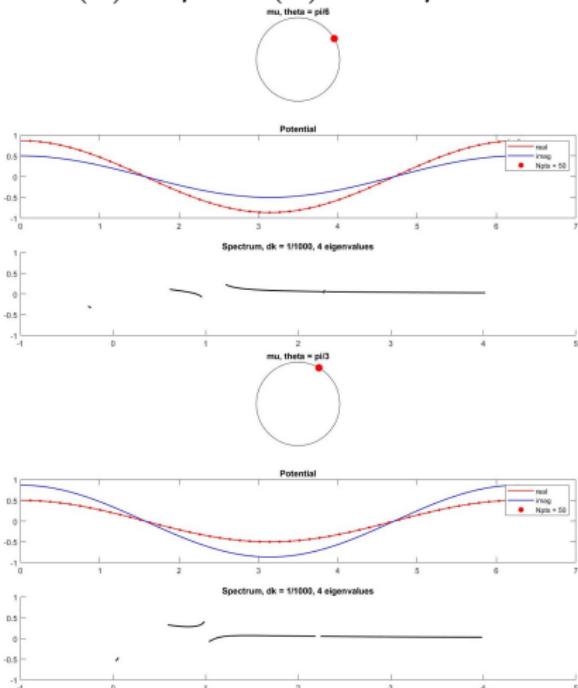
V complexe : Exemples de potentiels



$$V(x) = i\sqrt{x}$$

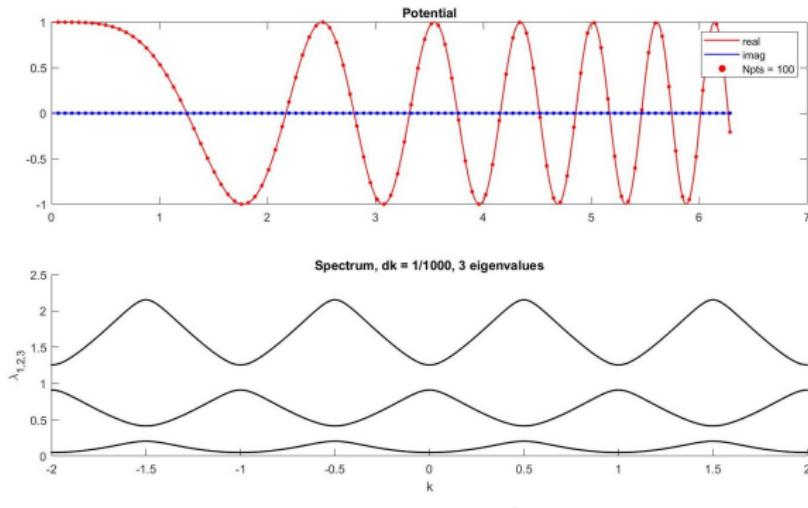
V complexe : Comportement des bandes

Une expérience effectuée : observer l'évolution du spectre pour
 $V(x) = \mu \cos(x)$ avec $\mu = e^{i\theta}$, θ parcourant le cercle unité.



Entre $\theta = \pi/4$ et $\theta = \pi/3$, les bandes 2 et 3 changent de convexité sans se croiser.

$\lambda_n(\cdot)$ en fonction de k : propriétés



Observations:

- Les fonctions $\lambda_n(k)$ sont 1-périodiques. $\sigma(H_k) = \sigma(H_k + \frac{2\pi}{a})$
- Les fonctions λ_n sont paires. $\sigma(H_k) = \sigma(H_{-k})$?
Oui, preuve utilisant le discriminant de Hill!

$\lambda_n(\cdot)$ en fonction de k : réduction de \mathcal{B}

Théorème de Floquet-Bloch:

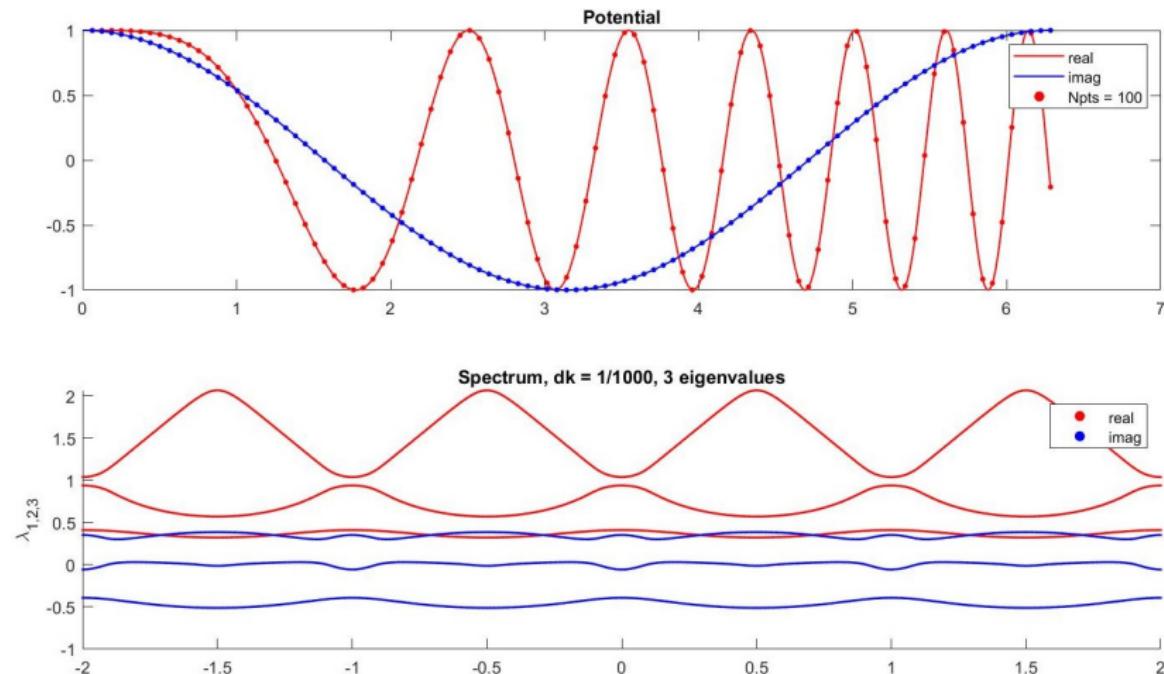
$$\sigma(H) = \bigcup_{k \in [0, \frac{2\pi}{a}]} \sigma(H_k)$$

$$\begin{aligned}\sigma(H) &= \bigcup_{k \in [0, \frac{\pi}{a}]} \sigma(H_k) + \bigcup_{k \in [\frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}]} \sigma(H_k) \\ &= \bigcup_{k \in [0, \frac{\pi}{a}]} \sigma(H_k) + \bigcup_{k \in [-\frac{\pi}{a}, 0]} \sigma(H_k) \\ &= \bigcup_{k \in [0, \frac{\pi}{a}]} \sigma(H_k) \cup \sigma(H_{-k}) \\ &= \bigcup_{k \in [0, \frac{\pi}{a}]} \sigma(H_k)\end{aligned}$$

Conséquence : $k \in [0, 0.5] \rightarrow \text{linspace}(0, 0.5, n)$

$\lambda_n(k)$ en fonction de k : réduction de \mathcal{B}

Remarque: Pour un potentiel complexe $V(x)$, les mêmes propriétés sont observées pour $\Re(\lambda_n(k))$ et $\Im(\lambda_n(k))$.



$$V(x) = \cos(x^2) + i \cos(x)$$

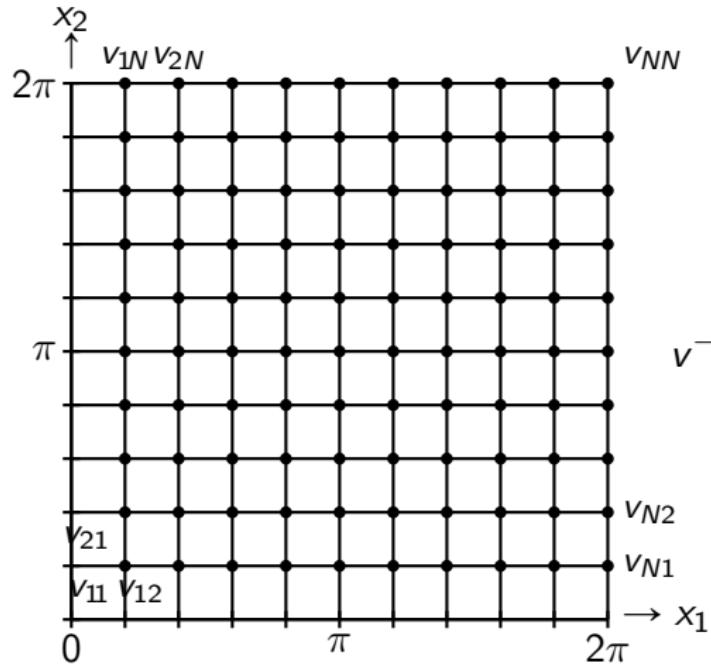
Premier pas en 2D : Comment obtenir $\sigma(H_{k_1, k_2})$?

$$H_{(k_1, k_2)} = (-\partial_{x_1}^2 - 2ik_1\partial_{x_1} + k_1^2) + (-\partial_{x_2}^2 - 2ik_2\partial_{x_2} + k_2^2) + V$$

Quelle matrice pour représenter $H_{(k_1, k_2)}$?

Discrétisation en 2D

On approime $v \in H^2([0, a] \times [0, b])$ par ses valeurs sur une grille de $N_1 \times N_2$ points. Prenons $a = b = 2\pi$ et $N_1 = N_2$.



$$v^{\rightarrow} = \begin{pmatrix} w_1^{\rightarrow} \\ w_2^{\rightarrow} \\ \vdots \\ w_N^{\rightarrow} \end{pmatrix} \quad w_i^{\rightarrow} = \begin{pmatrix} v_{i1} \\ v_{i2} \\ \vdots \\ v_{iN} \end{pmatrix}$$

Produit de Kronecker

$$\frac{\partial}{\partial x_1} v^{\rightarrow} = \begin{pmatrix} \tilde{D}w_1^{\rightarrow} \\ \tilde{D}w_2^{\rightarrow} \\ \vdots \\ \tilde{D}w_N^{\rightarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{D} & & & \\ & \tilde{D} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \tilde{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1^{\rightarrow} \\ w_2^{\rightarrow} \\ \vdots \\ w_N^{\rightarrow} \end{pmatrix} = (I \otimes \tilde{D}) v^{\rightarrow}$$

Produit de Kronecker Pour $A \in M_{mn}$ et $B \in M_{pq}$, le produit de Kronecker $A \otimes B$ est la matrice de taille $pm \times vn$ définie par :

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11} \cdot B & \dots & A_{1n} \cdot B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} \cdot B & \dots & A_{mn} \cdot B \end{pmatrix}$$

Produit de Kronecker

Pour v^\rightarrow , les dérivées sont :

$$\frac{\partial}{\partial x_1} v^\rightarrow = (I \otimes \tilde{D}) v^\rightarrow, \quad \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} v^\rightarrow = (I \otimes \tilde{D}^{(2)}) v^\rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} v^\rightarrow = (\tilde{D} \otimes I) v^\rightarrow, \quad \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} v^\rightarrow = (\tilde{D}^{(2)} \otimes I) v^\rightarrow$$

Approximation de $H_{(k_1, k_2)}$

$$H_{(k_1, k_2)} = (-\partial_{x_1}^2 - 2ik_1\partial_{x_1} + k_1^2) + (-\partial_{x_2}^2 - 2ik_2\partial_{x_2} + k_2^2) + V$$

est approximé par : $\tilde{H}_{(k_1, k_2)} :=$

$$\left(-I \otimes \tilde{D}^{(2)} - 2ik_1 I \otimes \tilde{D} + k_1^2 I_{N^2}\right) + \left(-\tilde{D}^{(2)} \otimes I - 2ik_2 \tilde{D} \otimes I + k_2^2 I_{N^2}\right) + V_{N^2}$$

Premiers pas en 2D

$$\sigma(H) = \bigcup_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{2D}} \sigma(H_{\mathbf{k}}) = \bigcup_{(k_1, k_2) \in [0, \frac{2\pi}{a}] \times [0, \frac{2\pi}{b}]} \sigma(H_{k_1, k_2})$$

$k_1 \in [0, 1] \rightarrow \text{linspace}(0, 1, n)$

$k_2 \in [0, 1] \rightarrow \text{linspace}(0, 1, n)$

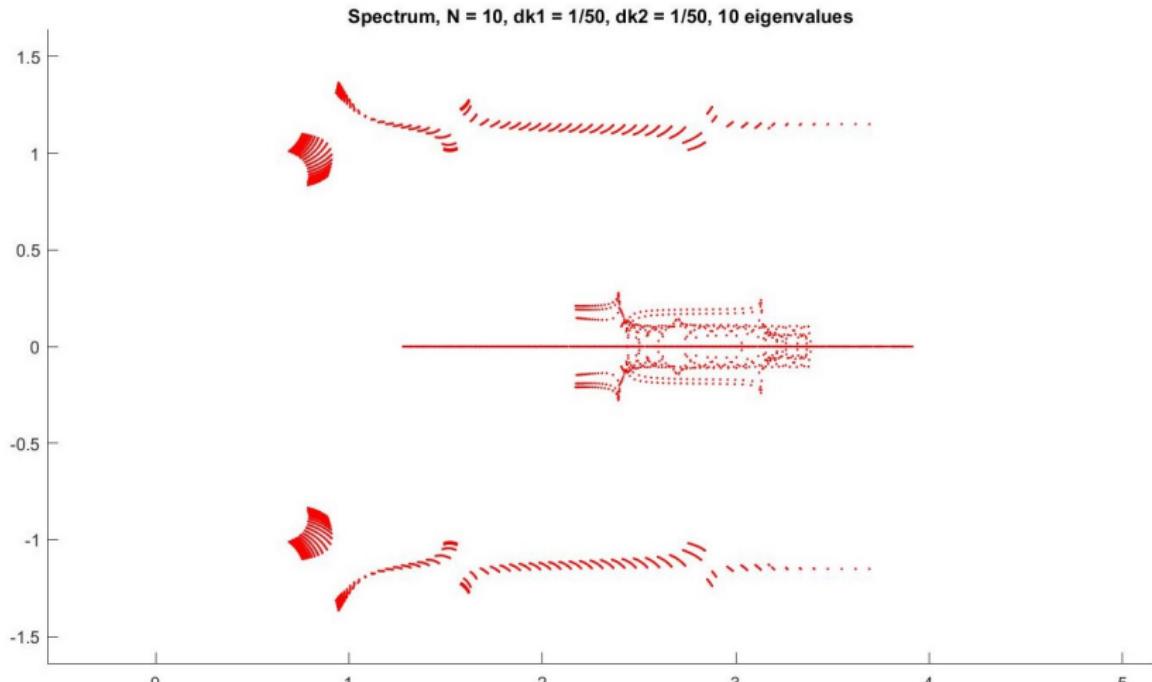
$H_{(k_1, k_2)} \rightarrow \tilde{H}_{(k_1, k_2)} \in M_{N^2}(\mathbb{C})$

Calcul des valeurs propres de $\tilde{H}_{(k_1, k_2)}$:

- `eigs(A, Neig, "smallestreal")`
- `eigs(A, Neig, "smallestabs")`

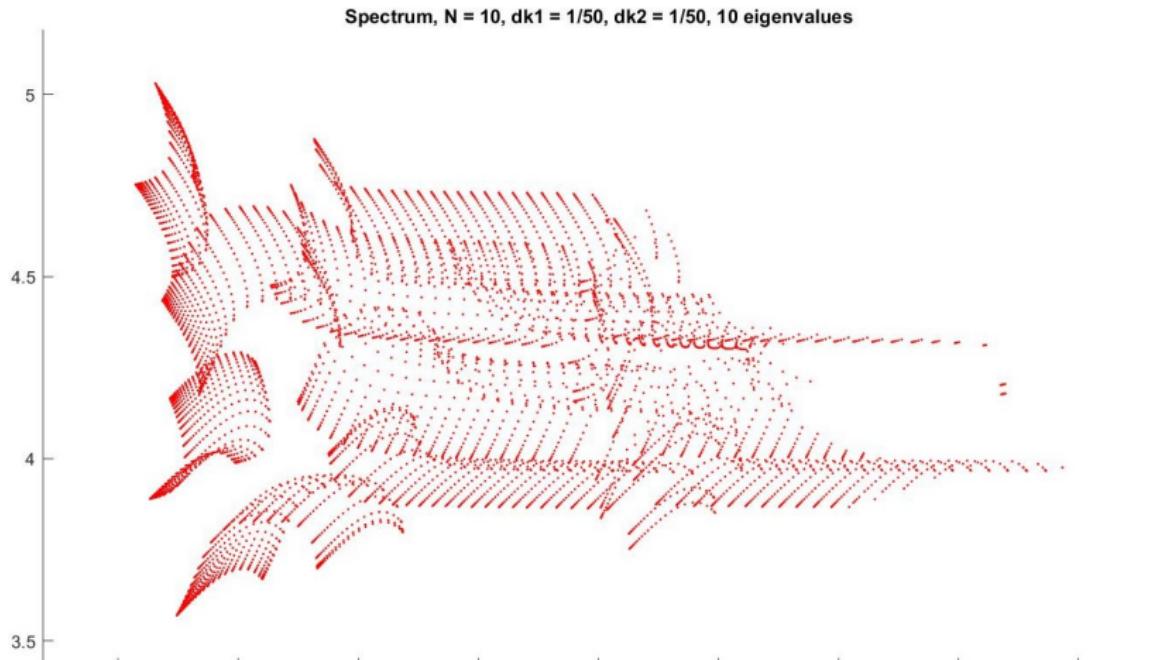
Examinons les résultats pour $n = 50$ et $N = 10$.

Exemples de résultats



$$V(x_1, x_2) = i \cos(x_1) \sqrt{x_2}$$

Exemples de résultats



$$V(x_1, x_2) = i(\sqrt{x_1} + \sqrt{2x_2})$$

1ère amélioration : réduire \mathcal{B}_{2D}

On utilise $\mathcal{B}_{2D} = [0, 1] \times [0, 1]$. Peut-on utiliser $[0, 0.5] \times [0, 0.5]$?

Cas particulier en 2D : $V(x_1, x_2) = V_1(x_1) + V_2(x_2)$

$$\sigma(H) = \sigma(H^{V_1}) + \sigma(H^{V_2})$$

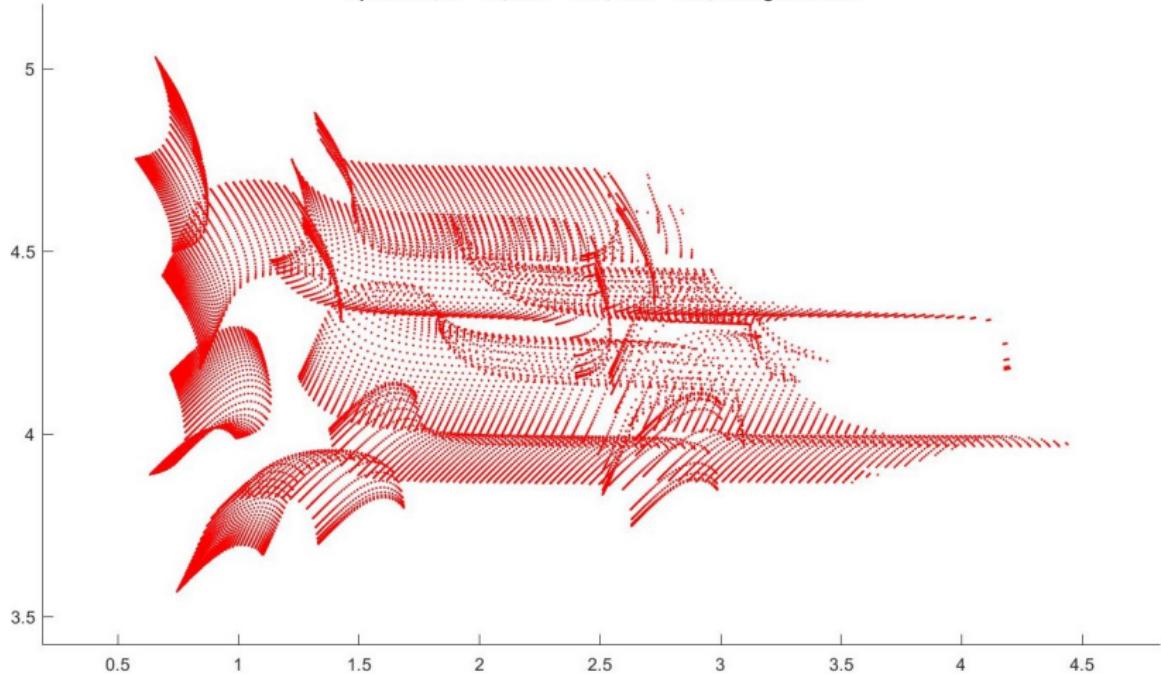
avec $H^{V_i} = -\frac{d}{dx_i^2} + V_i(x_i)$ de domaine $H^2(\mathbb{R})$

Démonstration de $\sigma(H^{V_1}) + \sigma(H^{V_2}) \subset \sigma(H)$:

$$\begin{cases} H^{V_1} u_1 = \lambda u_1 \\ H^{V_2} u_2 = \mu u_2 \end{cases} \Rightarrow Hu_1 u_2 = (\lambda + \mu) u_1 u_2$$

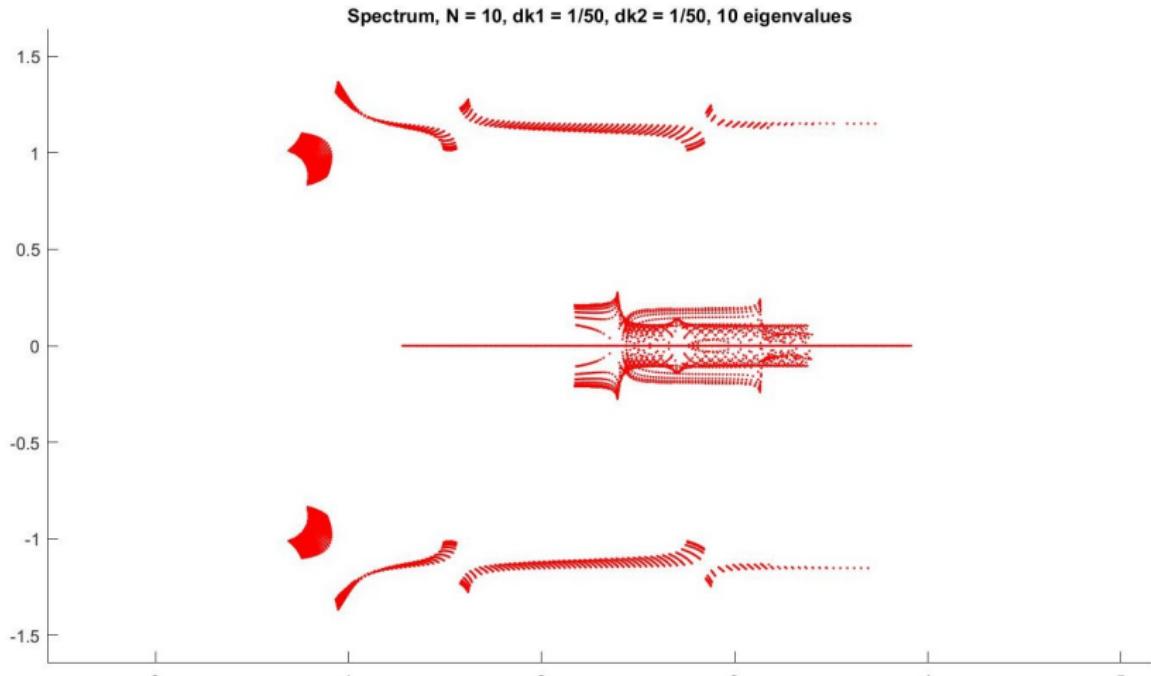
1ère amélioration : réduire \mathcal{B}_{2D}

Spectrum, $N = 10$, $dk1 = 1/50$, $dk2 = 1/50$, 10 eigenvalues



$$V(x_1, x_2) = i(\sqrt{x_1} + \sqrt{2x_2})$$

1ère amélioration : réduire \mathcal{B}_{2D}



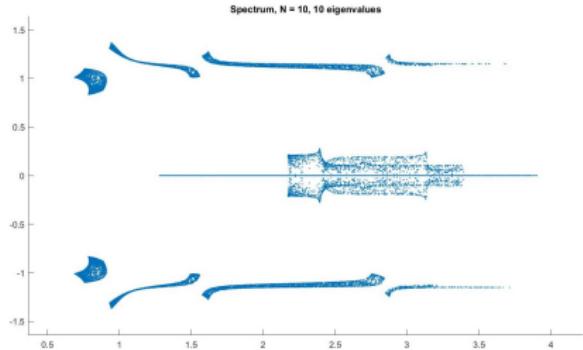
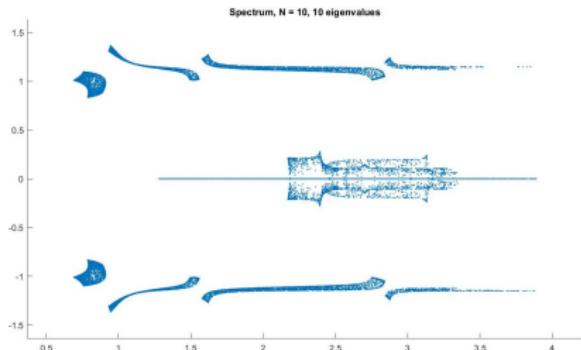
$$V(x_1, x_2) = i \cos(x_1) \sqrt{x_2}$$

pas de preuves...

2ème amélioration : l'aléatoire

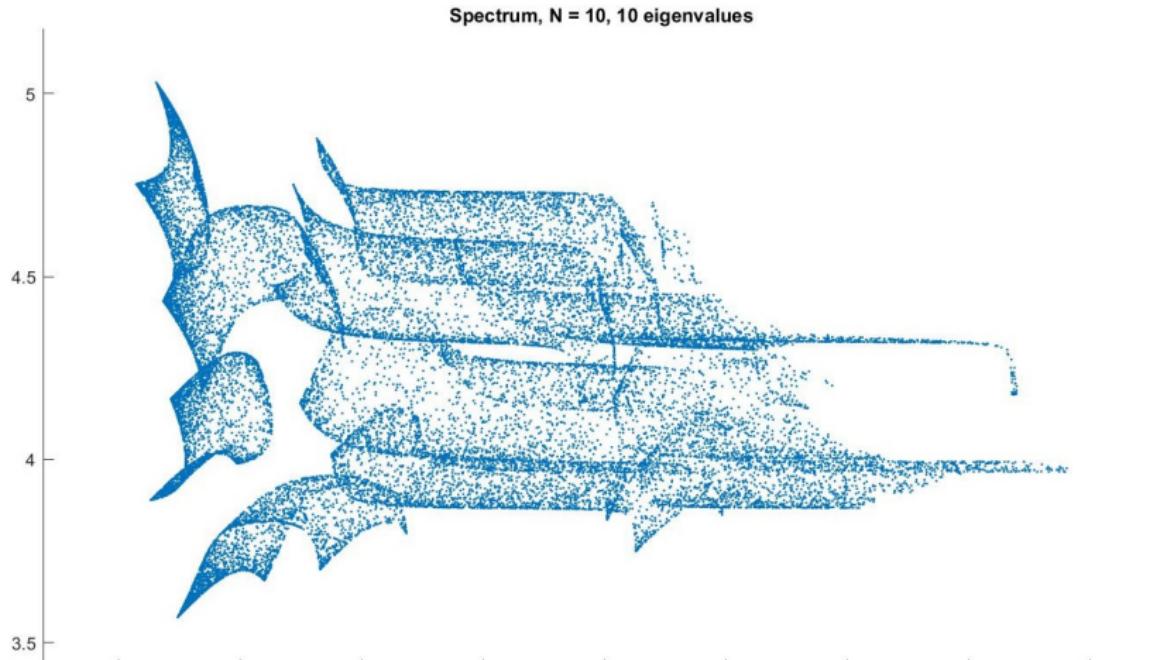
- Idée : Supprimer l'apparition de lignes artificielles qui viennent casser l'apparence continue du spectre.
- 2 tirages possibles :
 - $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{2D} \rightarrow \text{rand}(2, n)$
 - $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{2D}^{\frac{1}{4}} \rightarrow 0.5 * \text{rand}(2, n)$

2ème amélioration : l'aleatoire



$$V(x_1, x_2) = i \cos(x_1) \sqrt{x_2}$$

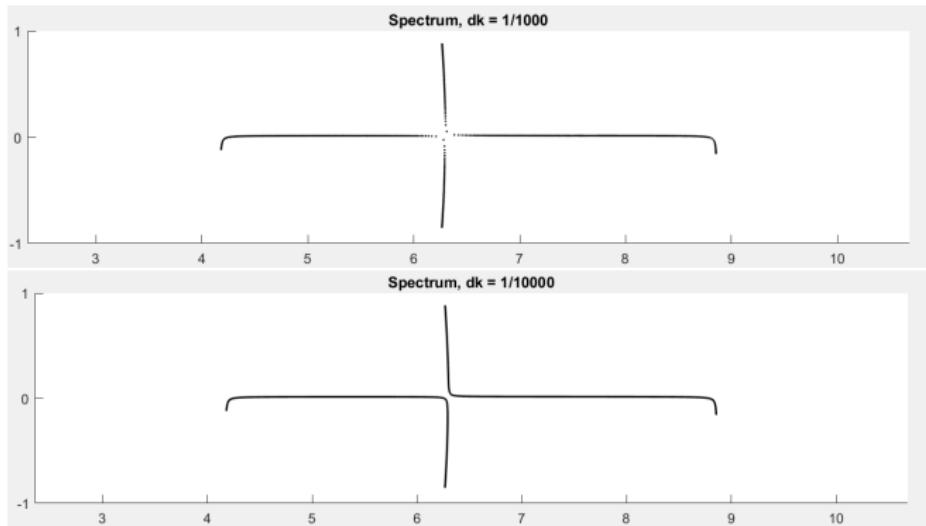
2ème amélioration : l'aleatoire



$$V(x_1, x_2) = i(\sqrt{x_1} + \sqrt{2x_2})$$

Piste 1 : Trouver de bonne valeurs de k

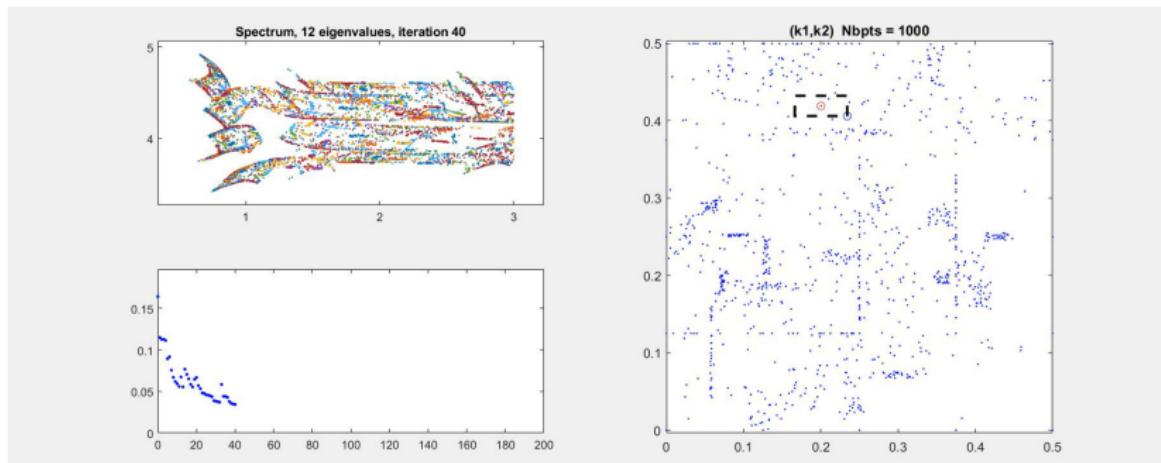
- Idée : Le maillage régulier n'est pas adapté car il y a des zones où $\lambda_n(\cdot)$ varie très peu ou très fortement.



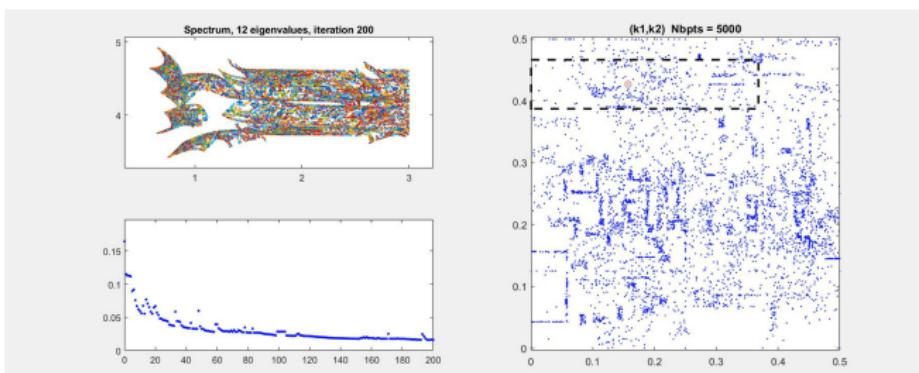
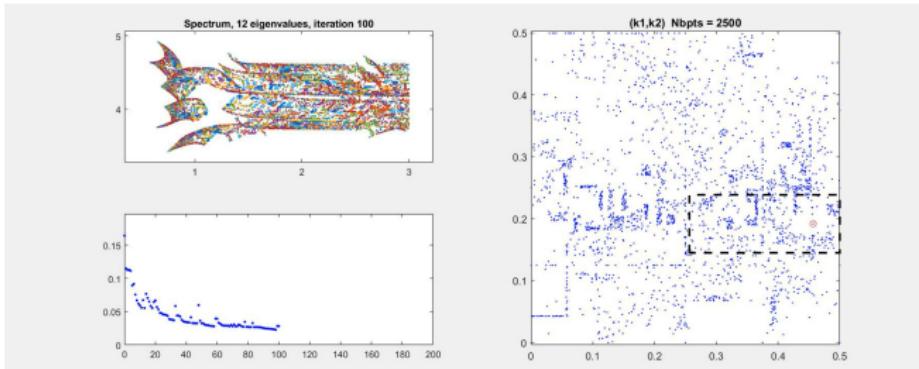
$$\lambda_5([0, 1]) \text{ et } \lambda_6([0, 1]) \text{ pour } V(x) = i\sqrt{x} \cos(5x)$$

Trouver de bonne valeurs de \mathbf{k} : algorithme itératif

- Initialisation : tirage aléatoire de n_k valeurs de \mathbf{k}
- Itération : Chercher le point A le plus isolé du spectre.
Récupérer les valeurs de \mathbf{k}_A correspondant à ce point et de \mathbf{k}_B correspondant à son plus proche voisin B .
Tirer n_k nouvelles valeurs de \mathbf{k} dans le rectangle de centre \mathbf{k}_A et de coin \mathbf{k}_B



Trouver de bonne valeurs de k : algorithme itératif



Algorithme itératif : problèmes...

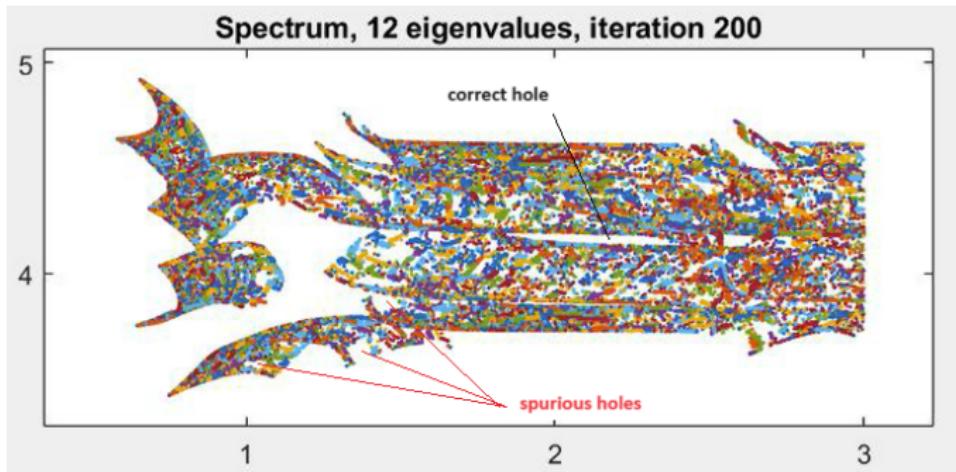
- Temps d'exécution :

Trouver le point : n_σ^2 calculs.

n_σ augmente de $(n_k \times N_{\text{eig}})$ à chaque itération.

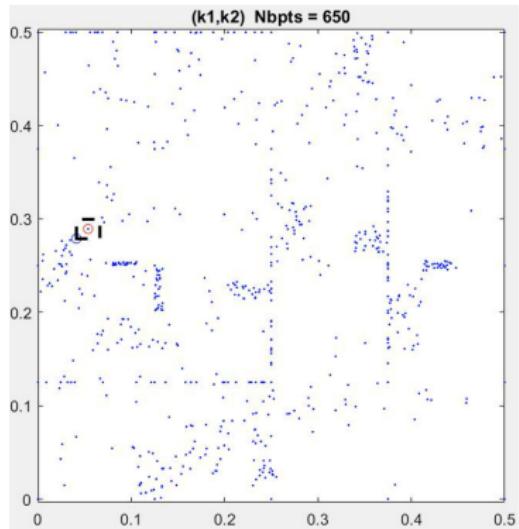
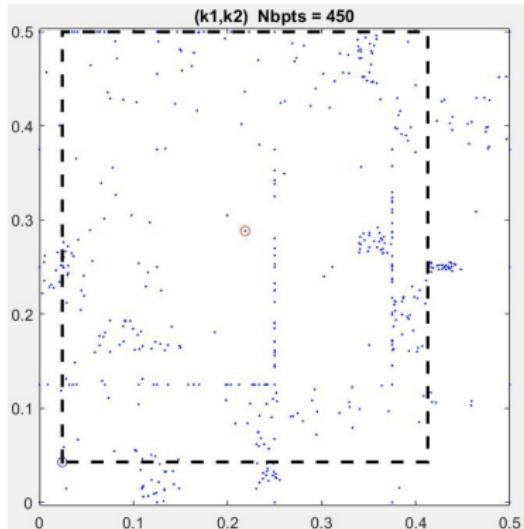
$$\implies \mathcal{O}(n_k^2 N_{\text{eig}}^2 N_{\text{it}}^3)$$

- Apparition de trous artificiels :



Algorithme itératif : problèmes...

- $\lambda_n(\cdot)$ non identifiés :



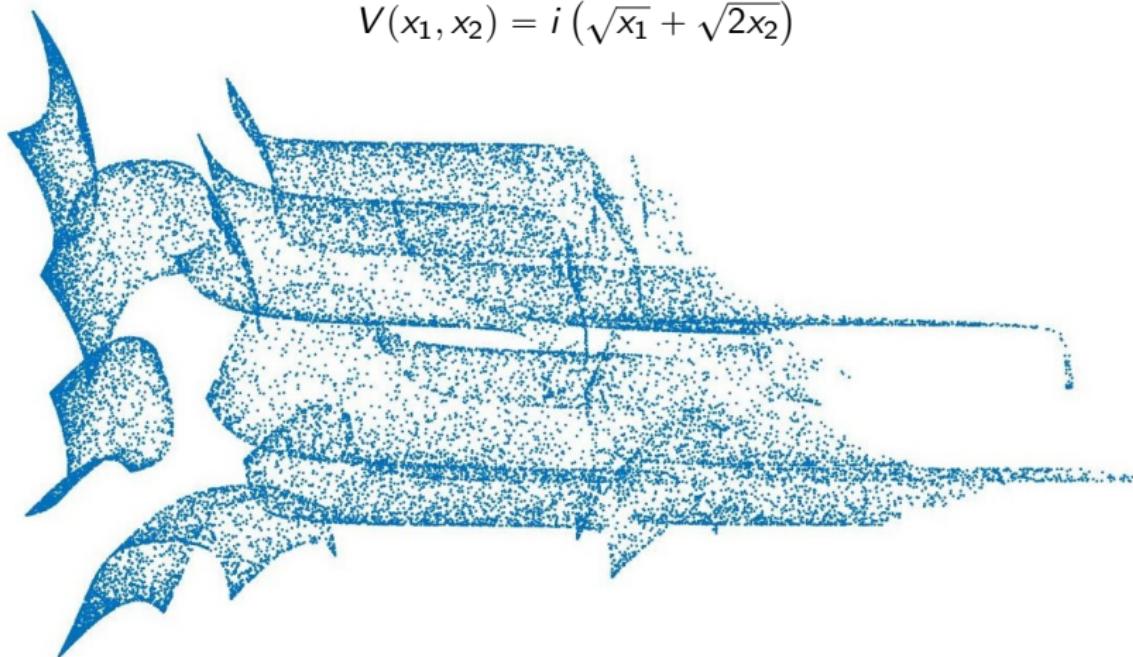
$$\begin{cases} A \in \lambda_{n_A}(\mathcal{B}_{2D}) \\ B \in \lambda_{n_B}(\mathcal{B}_{2D}) \\ n_A \neq n_B \end{cases}$$

$$\begin{cases} A \in \lambda_{n_A}(\mathcal{B}_{2D}) \\ B \in \lambda_{n_B}(\mathcal{B}_{2D}) \\ n_A = n_B \end{cases}$$

Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

- **Idée :** On arrive à l'oeil à entrevoir des composantes connexes dans le spectre correspondant sûrement à l'image de \mathcal{B}_{2D} par une fonction $\lambda_n(\cdot)$.

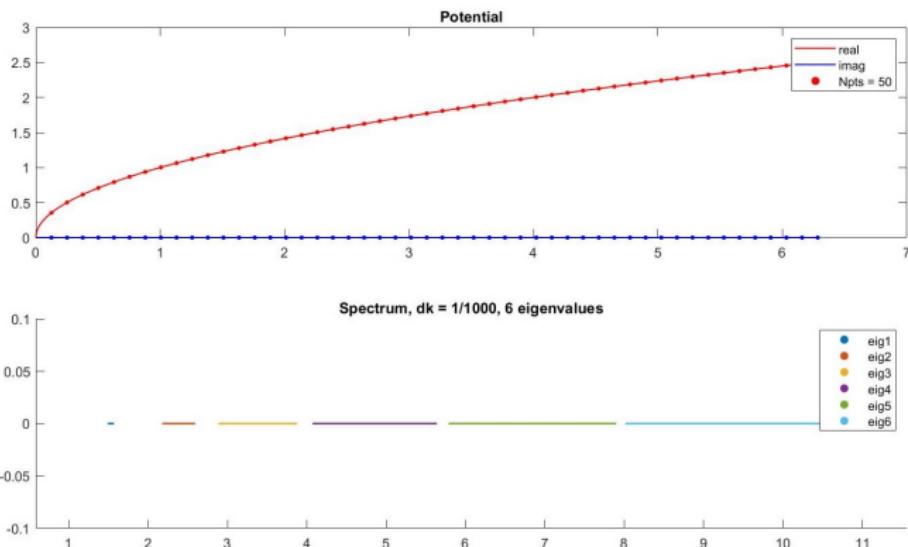
$$V(x_1, x_2) = i (\sqrt{x_1} + \sqrt{2x_2})$$



Plus simple : identifier les bandes $\lambda_n(\mathcal{B}_{1D})$

V réel

Pour chaque valeur de k , on numérote $\sigma(H_k)$ par ordre croissant :
 $\lambda_1(k) \leq \lambda_2(k) \leq \dots \leq \lambda_n(k)$

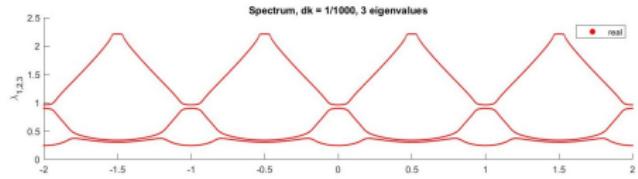
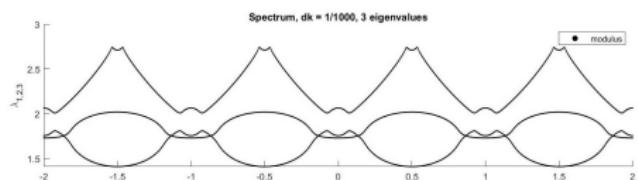
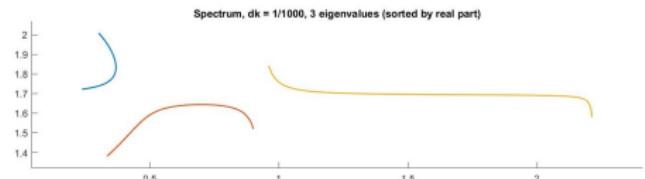
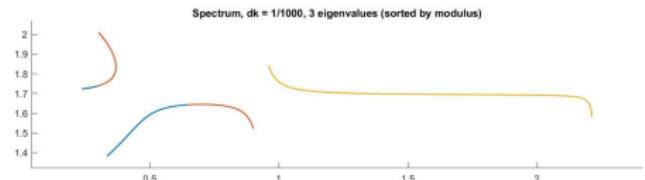


$$V(x) = \sqrt{x}$$

Plus simple : identifier les bandes $\lambda_n(\mathcal{B}_{1D})$

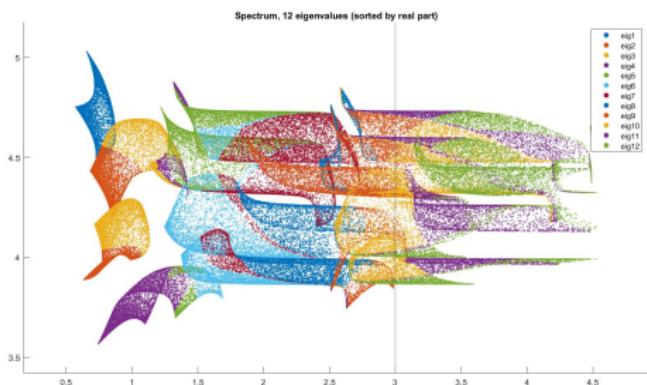
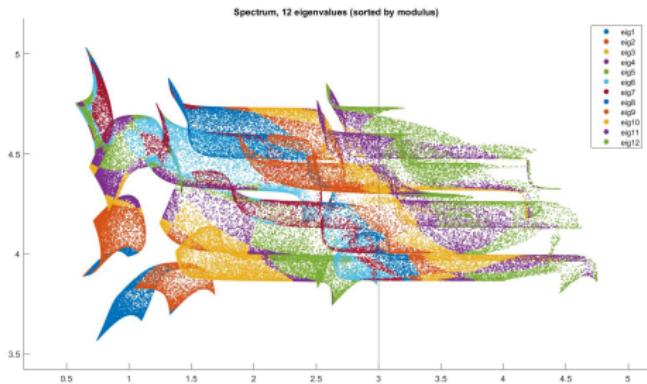
V complexe

Pour chaque valeur de k , comment ordonner $\sigma(H_k)$?



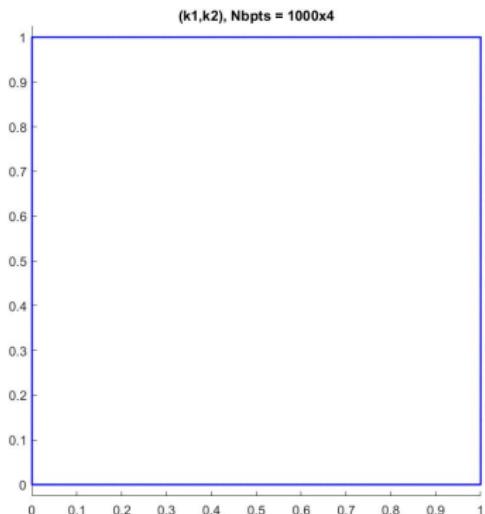
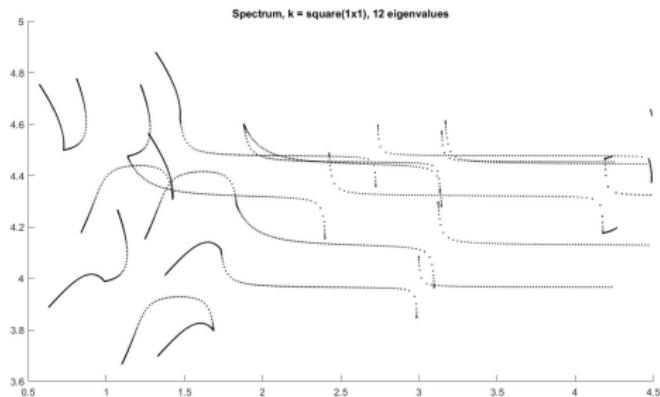
$$V(x) = i\sqrt{x}$$

Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$



Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

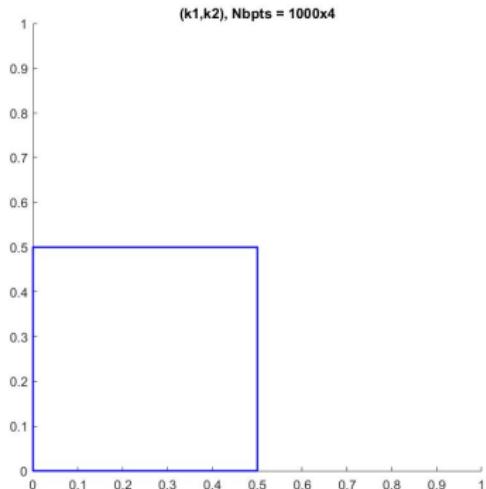
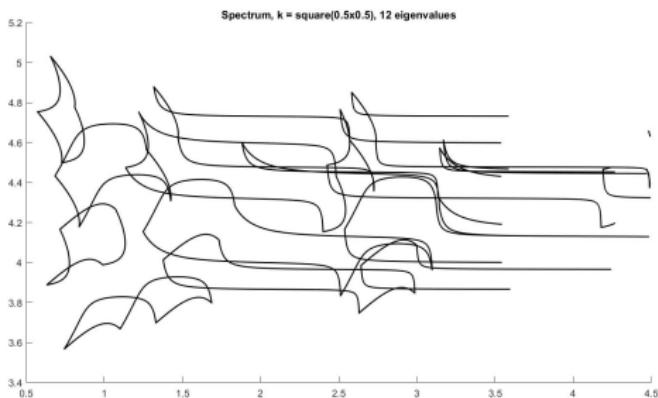
- Idée 1 : Afficher les bords de \mathcal{B}_{2D}



Pas de boucles fermées...

Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

- Idée 2 : Afficher les bords de $\mathcal{B}_{2D}^{\frac{1}{4}}$

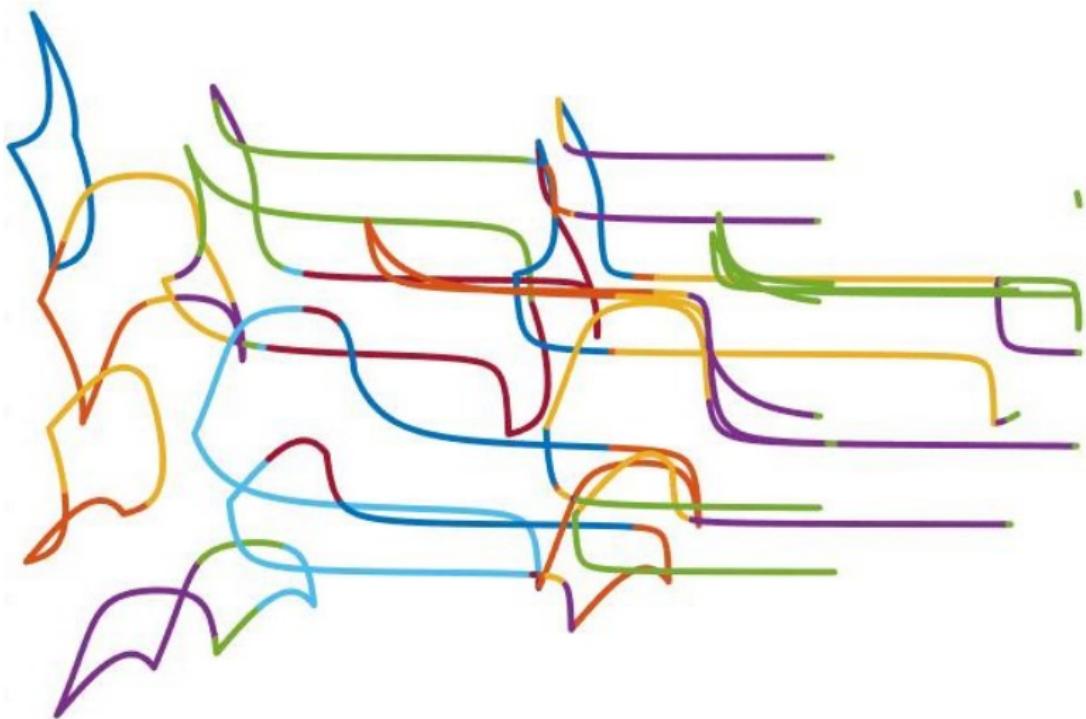


Boucles fermées...

Problème : Comment les séparer ?

Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

Ranked by increasing real part

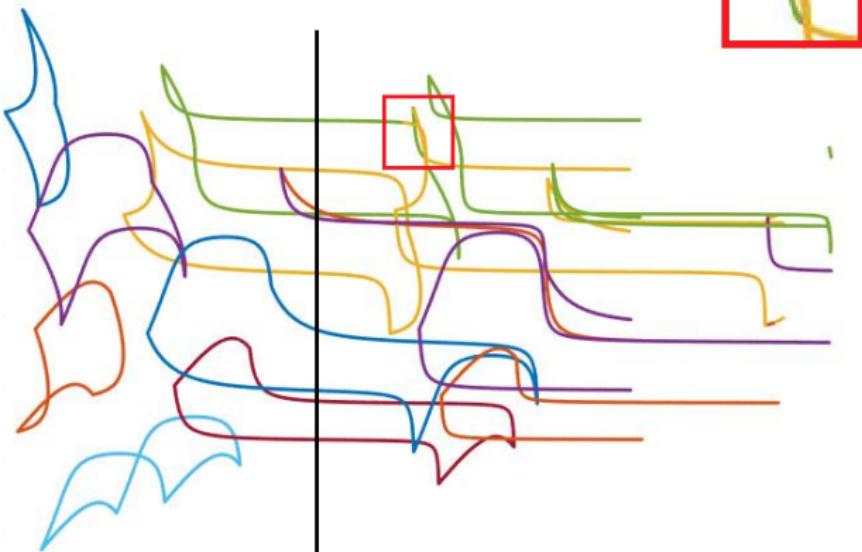


Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

- **Idée 3 : Réarranger l'ordre des valeurs propres**

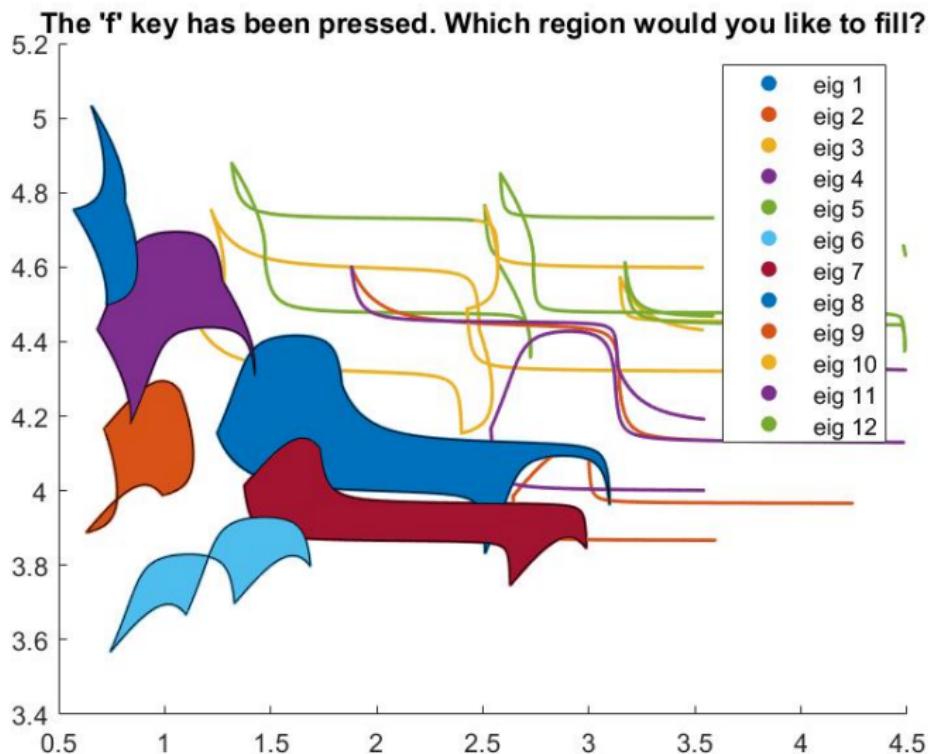
k varie de façon continue donc on peut réorganiser $v_{k_{i+1}}$ de façon à minimiser la norme de $v_{k_{i+1}} - v_{k_i}$

Permutation (1:7),(6:12)



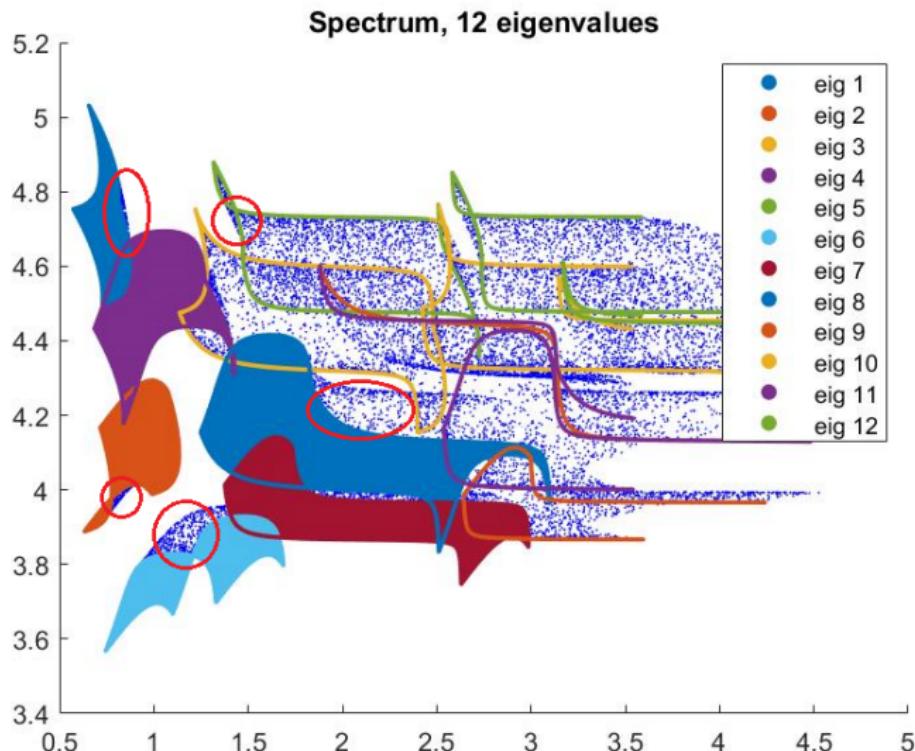
Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

On peut maintenant colorer les blocs à l'aide de la commande MATLAB `fill(xlist,ylist,color)`.

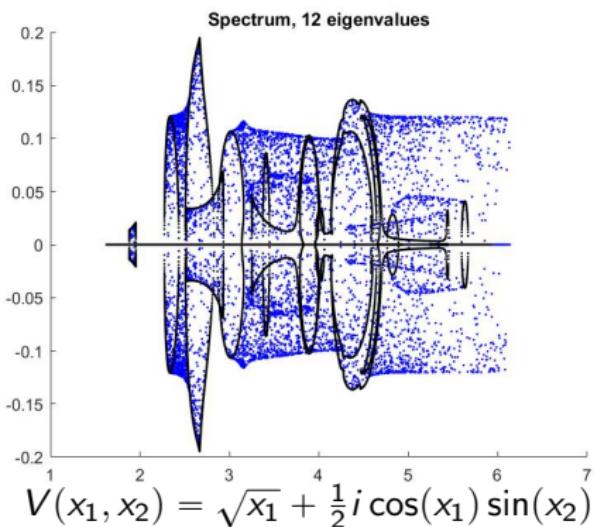
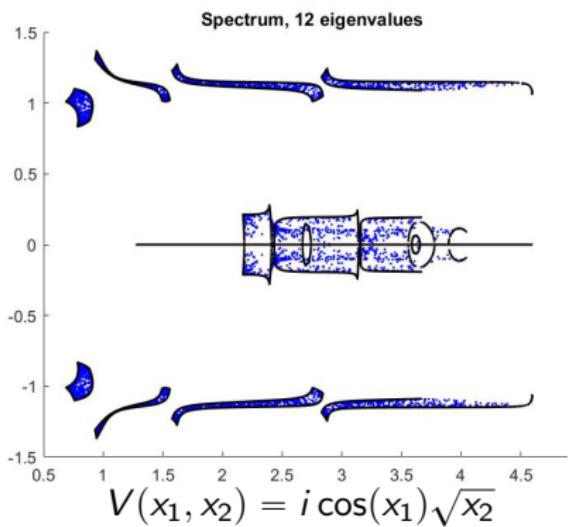


Piste 2 : identifier les blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$

Superposons à celà des points du spectre obtenus pour des valeurs aléatoires de k .



Autres exemples...



- Peut-on trouver les autres frontières ?
- D'où viennent les points en dehors ?

Cas particulier $V = V_1 + V_2$

$$\sigma(H) = \sigma(H^{V_1}) + \sigma(H^{V_2})$$

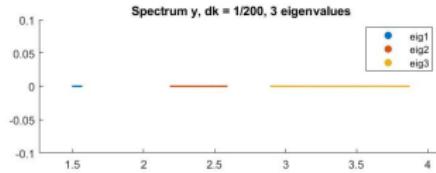
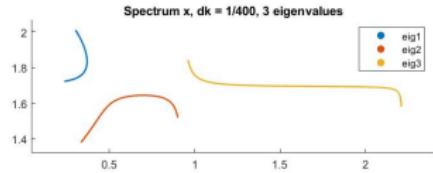
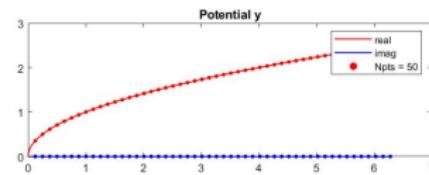
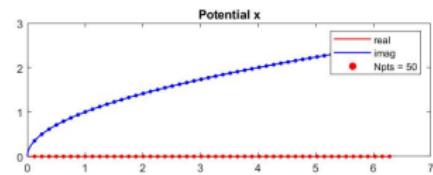
Si on note $\lambda_n^{V_1}(k_1)$ les valeurs propres de H^{V_1} et $\lambda_m^{V_2}(k_2)$ les valeurs propres de $\sigma(H^{V_2})$, nous pouvons indexer les valeurs propres de H par $\mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*$ et nous avons :

$$\lambda_{n,m}(k_1, k_2) = \lambda_n^{V_1}(k_1) + \lambda_m^{V_2}(k_2)$$

Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 réel

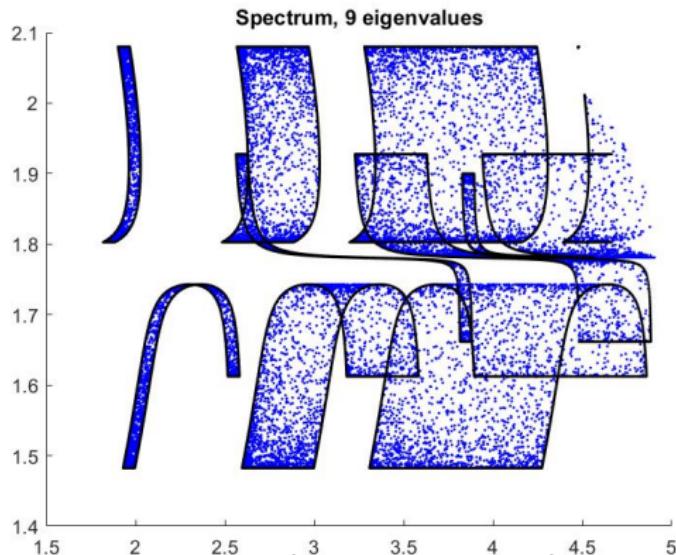
Si V_2 est réel, alors $\lambda_m^{V_2}(\mathcal{B}_{1D}) = [a_m, b_m] \subset \mathbb{R}$.

Les composantes connexes $\lambda_{n,m}(\mathcal{B}_{2D})$ correspondent à la zone couverte par $\lambda_n^{V_1}(\mathcal{B}_{1D})$ lors d'une translation de a_m à b_m .



$$V(x_1, x_2) = i\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2}$$

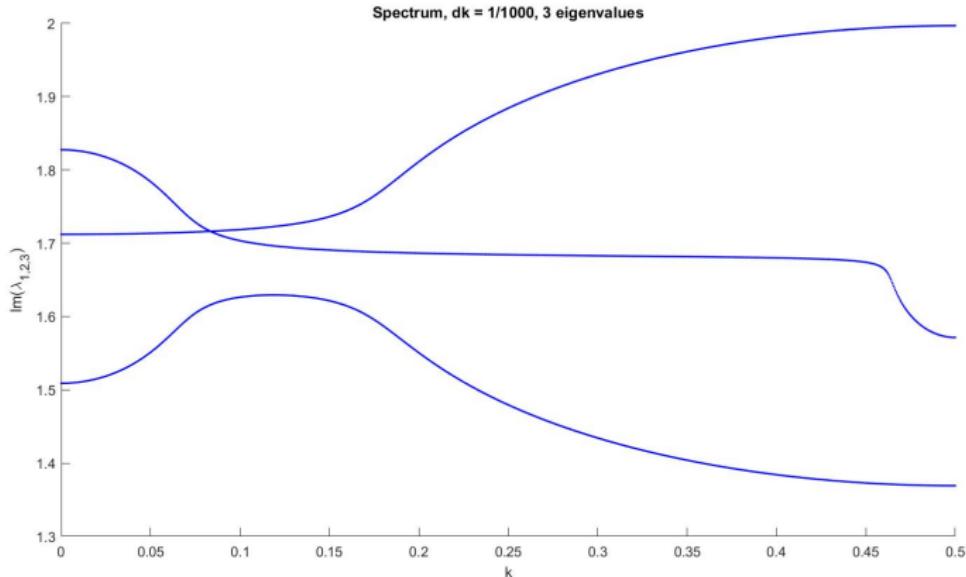
Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 réel



- Les lignes noires $\lambda_{1,m}(\partial\mathcal{B}_{2D}^{\frac{1}{4}})$ et $\lambda_{3,m}(\partial\mathcal{B}_{2D}^{\frac{1}{4}})$ donnent toutes les frontières de $\lambda_{1,m}(\mathcal{B}_{2D})$ et $\lambda_{3,m}(\mathcal{B}_{2D})$.
- Manquent les frontières supérieures des blocs $\lambda_{2,m}(\mathcal{B}_{2D})$

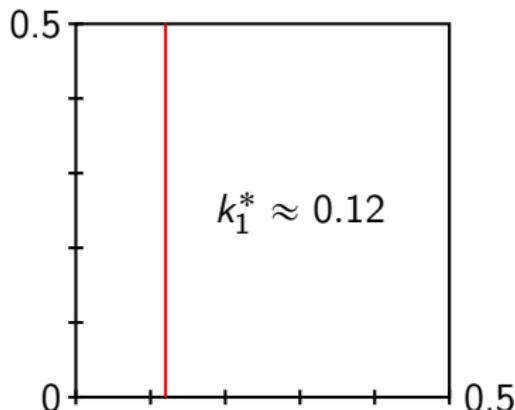
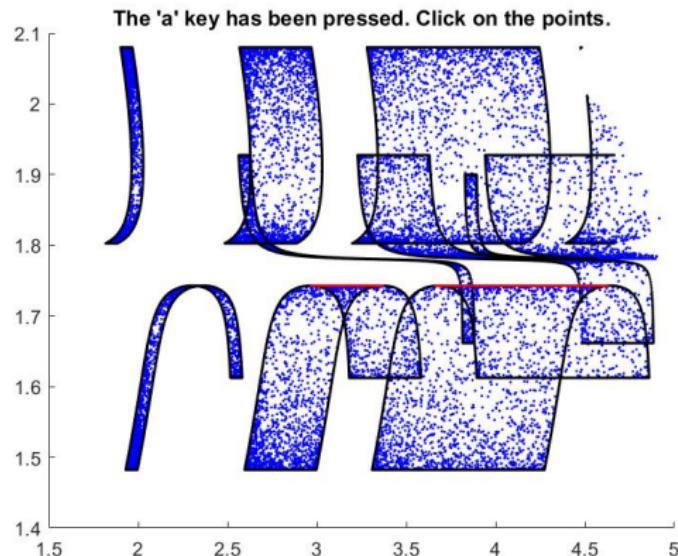
Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 réel

Trouvons la valeur k_1^* pour laquelle la fonction $\Im(\lambda_2^{V_1}(\cdot))$ atteint son maximum.



$k_1^* \approx 0.12$. Si nous traçons $\lambda_{2,m}(k^*, \mathcal{B}_{1D})$, nous obtenons les limites manquantes en haut.

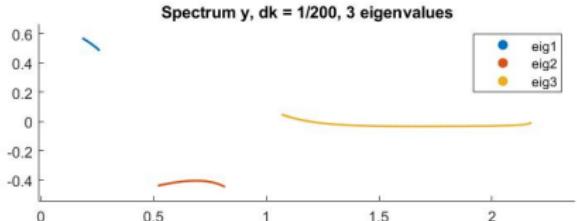
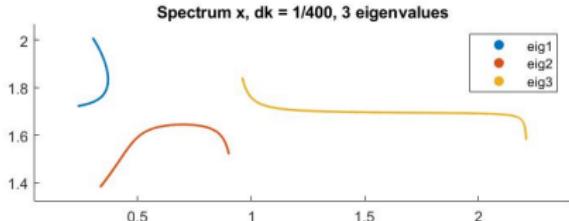
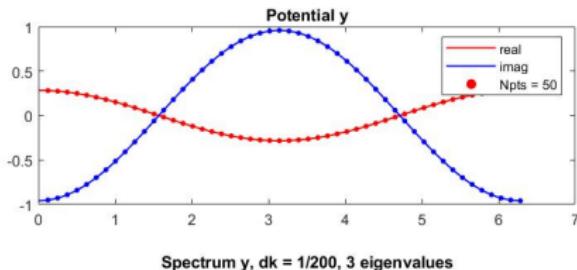
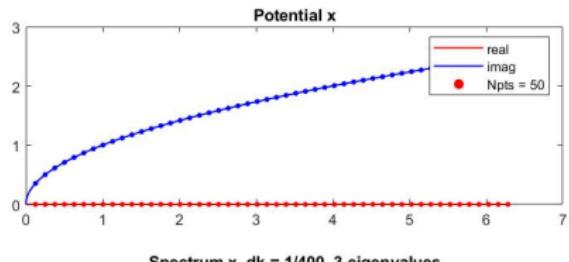
Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 réel



Cas particulier $V = V_1 + V_2$

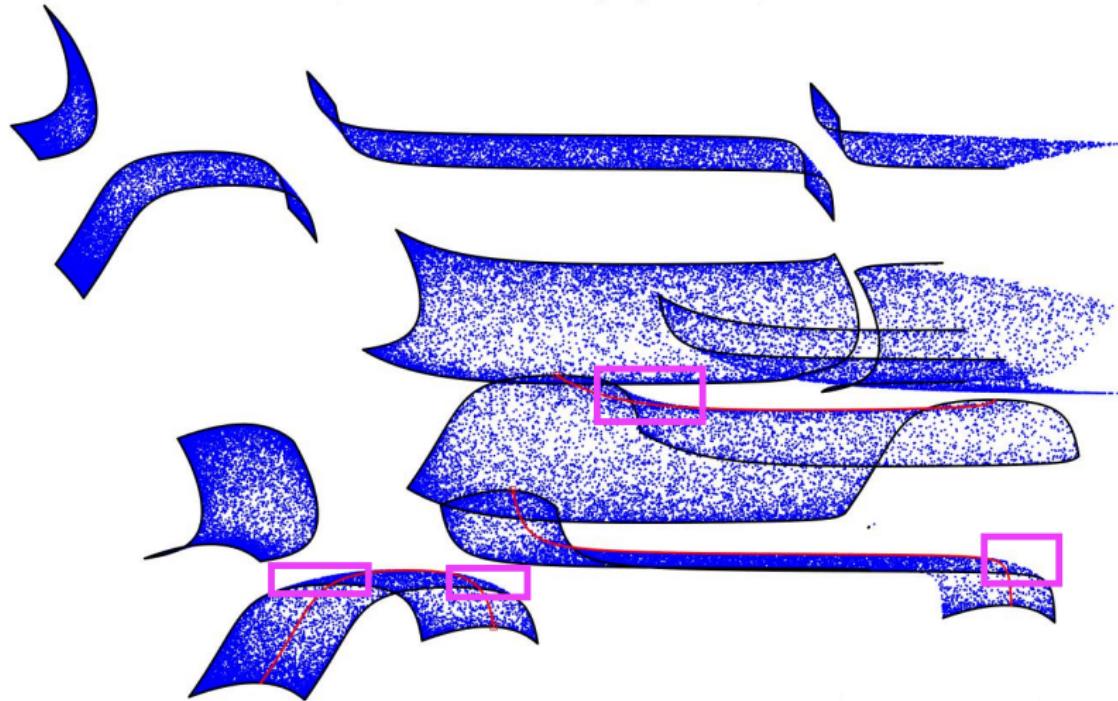
V_2 complexe

Si nous prenons un potentiel complexe V_2 , la forme des $\lambda_{n,m}(\mathcal{B}_{2D})$ est beaucoup plus compliquée.



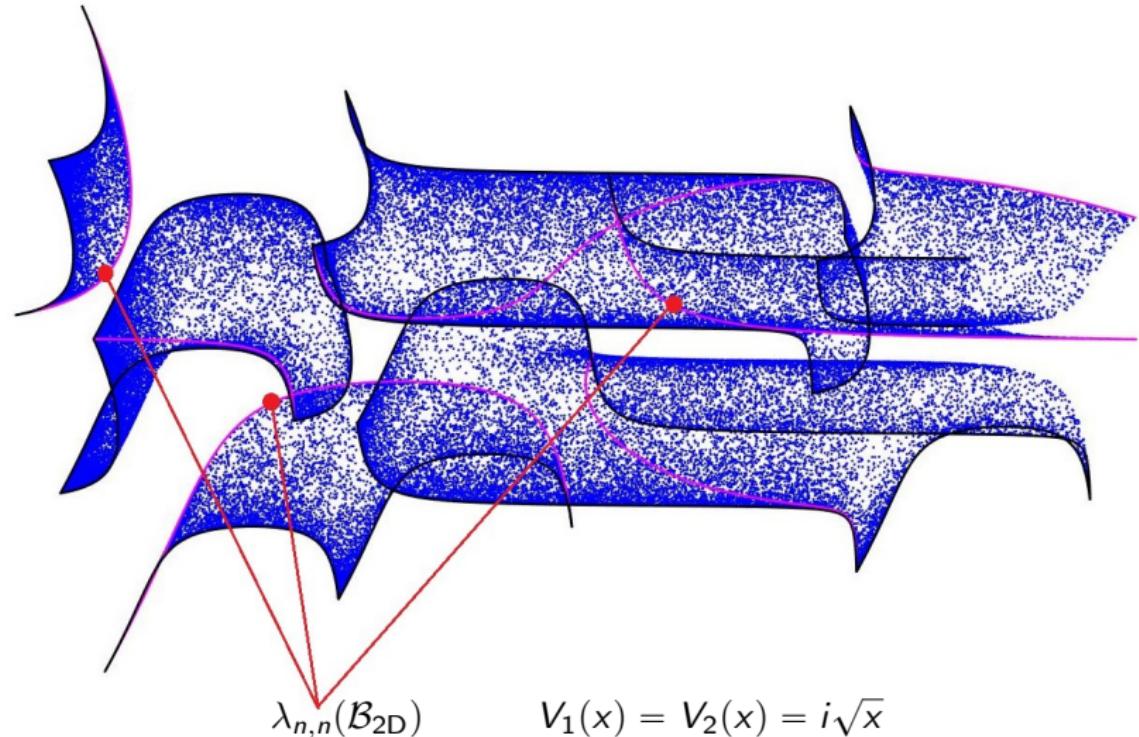
$$V(x_1, x_2) = i\sqrt{x_1} + e^{5i} \cos(x_2)$$

Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 complexe



En rouge, les lignes qui devraient être utilisées pour obtenir les limites manquantes par la méthode précédente.

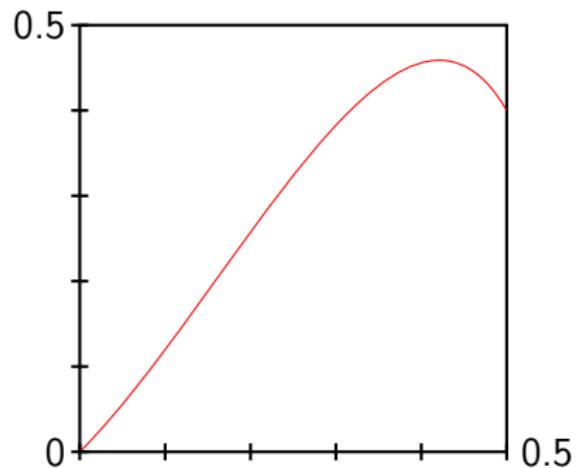
Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 complexe



Pour $V_1 = V_2$, une des frontières des blocs $\lambda_{n,n}(\mathcal{B}_{2D})$ est toujours donnée par l'image de la diagonale (en magenta).

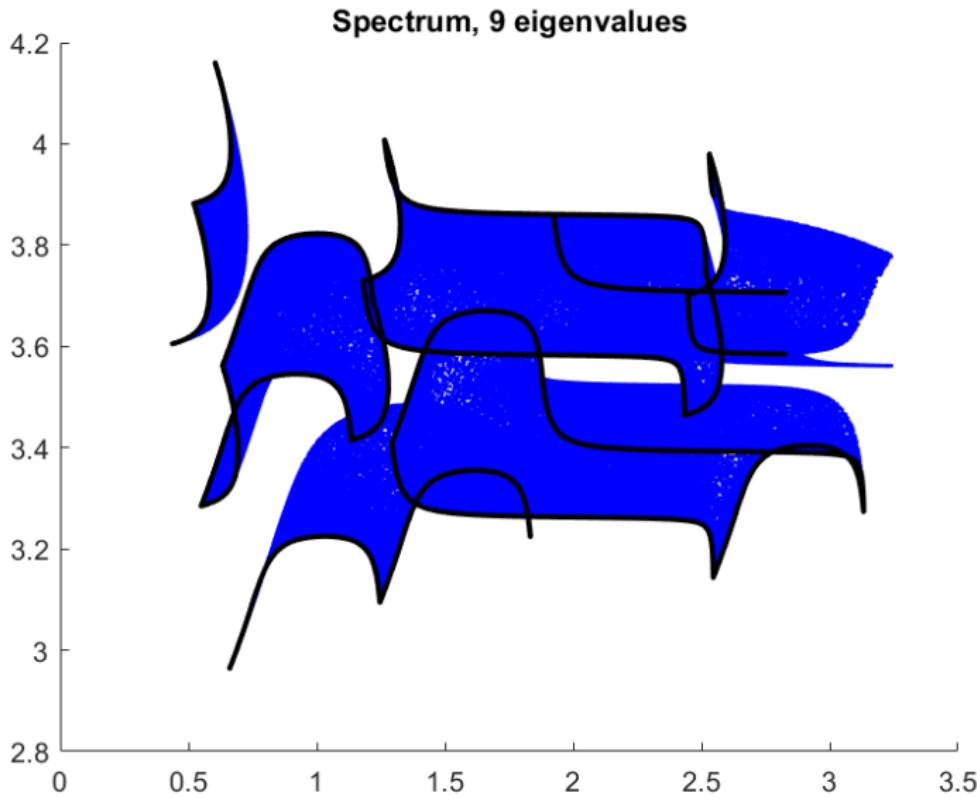
Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 complexe

Découpage envisageable...



mais non nécessaire... car l'on peut visuellement constater la translation et en déduire les frontières manquantes !

Cas particulier $V = V_1 + V_2$ V_2 complexe



Cas particulier V réel...

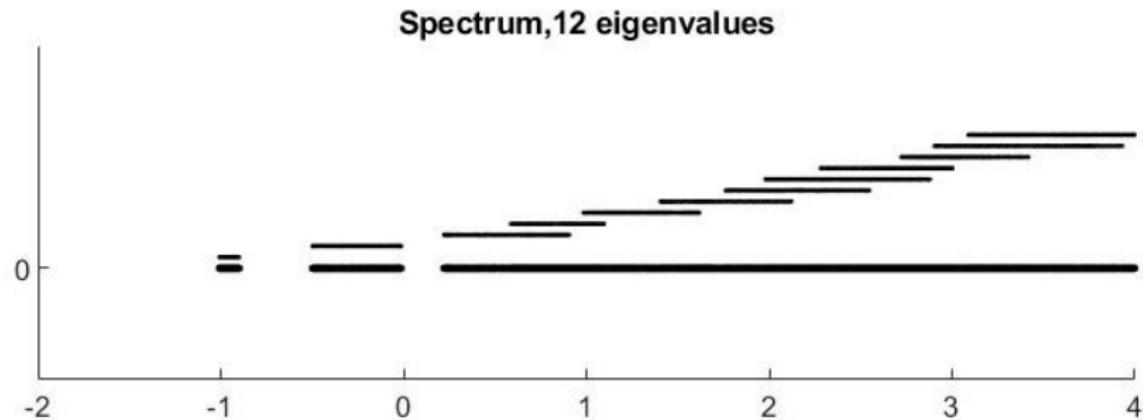
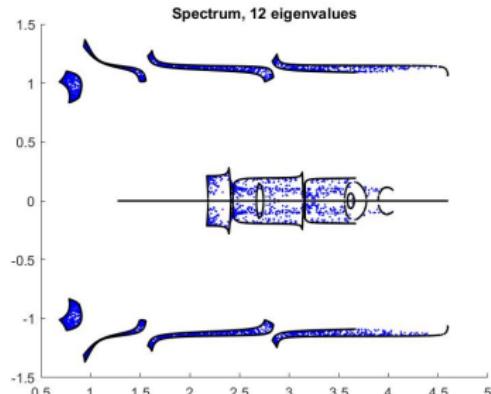
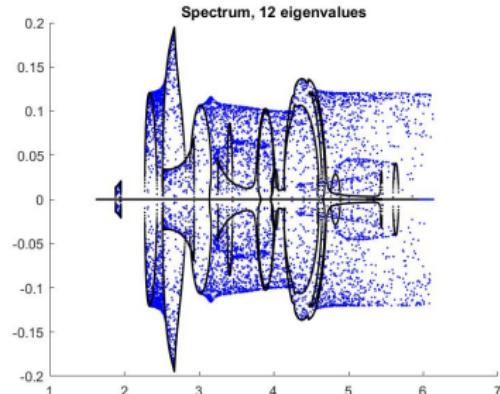


Illustration of the Bethe-Sommerfeld conjecture with
 $V(x_1, x_2) = \cos(x_1)\sqrt{x_2}$

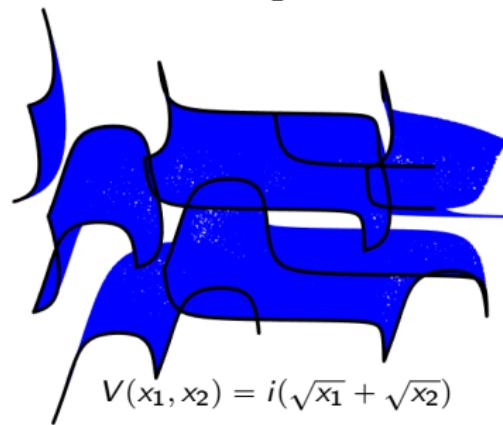
Cas général...



$$V(x_1, x_2) = i \cos(x_1) \sqrt{x_2}$$



$$V(x_1, x_2) = \sqrt{x_1} + \frac{1}{2}i \cos(x_1) \sin(x_2)$$



Généralisations de la conjecture de Bethe-Sommerfeld possibles :

- Nombre de composantes connexes fini
- Nombre de trous intérieurs fini

Conclusion

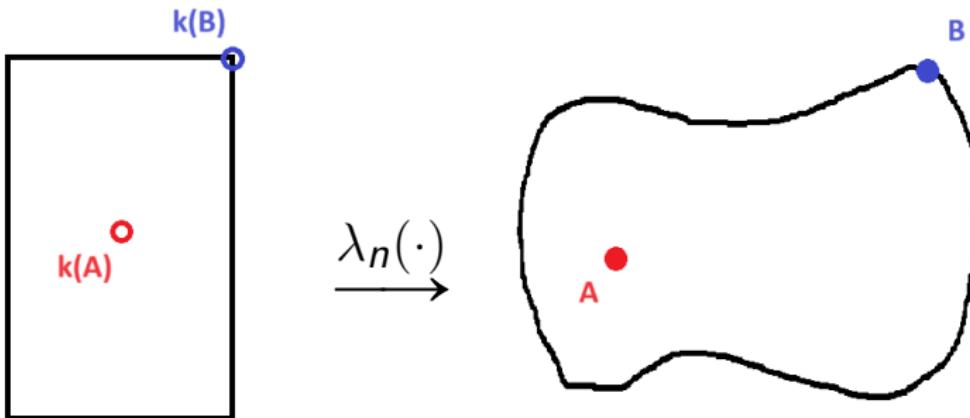
■ Dimension 1 :

- V réel :
 - discrétisation régulière de $\mathcal{B}_{1D}^{\frac{1}{2}}$
 - identification des bandes $\lambda_n(\cdot)$ immédiate
- V complexe :
 - discrétisation régulière de $\mathcal{B}_{1D}^{\frac{1}{2}}$
 - identification des bandes $\lambda_n(\cdot)$ possible dans le pire des cas après permutation

■ Dimension 2 :

- V réel :
 - discrétisation régulière de $\partial\mathcal{B}_{2D}^{\frac{1}{4}}$
 - identification des bandes $\lambda_n(\cdot)$ possible par permutation
-> Bethe-Sommerfeld, nombre de trous fini
- V complexe :
 - discrétisation régulière de $\partial\mathcal{B}_{2D}^{\frac{1}{4}}$ + points aléatoire de \mathcal{B}_{2D}
 - identification des blocs $\lambda_n(\mathcal{B}_{2D})$ possible dans le cas particulier $V = V_1 + V_2$

Pourquoi on espère que ça marche ?



Annexe 1 : Discriminant de Hill

Pour chaque $\lambda \in \mathbb{C}$, l'équation différentielle d'ordre 2 :

$$-\frac{d^2}{dx^2}u + (V(x) - \lambda)u = 0 \quad (E_\lambda)$$

admet toujours un espace de solutions de dimension 2.

On peut donc trouver deux fonctions qui forment une base de l'espace des solutions. Appelons-les ψ_1^λ et ψ_2^λ et posons leurs conditions initiales :

$$\begin{cases} \psi_1^\lambda(0) = 0 \\ \psi_1'^\lambda(0) = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_2^\lambda(0) = 1 \\ \psi_2'^\lambda(0) = 0 \end{cases}$$

Annexe 1 : Discriminant de Hill

Le discriminant de Hill H est une fonction de λ définie par :

$$\Delta(\lambda) = \psi_1^\lambda(a) + \psi_2'^\lambda(a)$$

La décomposition de Floquet-Bloch donne :

$$\lambda \in \sigma(H) \iff \exists \psi \text{ solution de } (E_\lambda) : \psi(x+a) = \rho \psi(x) \quad \rho \in \mathbb{T}$$

Annexe 1 : Discriminant de Hill

Recherchons une solution de (E_λ) de la forme $\psi(x + a) = \rho \psi(x)$ avec $\rho \in \mathbb{C}$.

Décomposons :

$$\psi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$$

L'équation (E_λ) est invariante par translation de a grâce à la périodicité de V . Donc $\psi_1(x + a)$ et $\psi_2(x + a)$ sont aussi des solutions :

$$\begin{cases} \psi_1(x + a) = A_{11}\psi_1(x) + A_{12}\psi_2(x) \\ \psi_2(x + a) = A_{21}\psi_1(x) + A_{22}\psi_2(x) \end{cases}$$

Annexe 1 : Discriminant de Hill

Pour que $\psi(x + a)$ soit égal à $\rho\psi(x)$, il faut que :

$$\begin{cases} \rho(A_{11} - \rho)c_1 + A_{21}c_2 = 0 \\ \rho A_{12}c_1 + (A_{22} - \rho)c_2 = 0 \end{cases}$$

Cette égalité est vraie pour des c_1 et c_2 non nuls si et seulement si :

$$\det \begin{pmatrix} A_{11} - \rho & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} - \rho \end{pmatrix} = 0$$

C'est-à-dire :

$$\rho^2 - (A_{11} + A_{22})\rho + \det(A) = 0$$

avec $A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{pmatrix}$

Annexe 1 : Discriminant de Hill

En raison des conditions initiales de ψ_1^λ et ψ_2^λ , on obtient :

$$A_{11} = \psi_1^\lambda(a), \quad A_{12} = \psi_1'^\lambda(a), \quad A_{21} = \psi_2^\lambda(a), \quad A_{22} = \psi_2'^\lambda(a)$$

Donc, $\det(A)$ est égal au wronskien de ψ_1^λ et ψ_2^λ en a . Utilisons la formule de Liouville pour le wronskien :

$$W(a) = W(0) \exp \left(\int_0^a \text{Tr}(C_\lambda(\tau)) d\tau \right)$$

où $C_\lambda(x)$ est la matrice utilisée pour transformer (E_λ) en une équation différentielle du premier ordre.

Annexe 1 : Discriminant de Hill

En posant

$$U = \begin{pmatrix} u \\ u' \end{pmatrix}$$

on a :

$$U' = C_\lambda(x) \quad \text{avec} \quad C_\lambda(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ V(x) - \lambda & 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi, $\text{Tr}(C_\lambda(\tau)) = 0 \quad \forall \tau$ et $W(a) = W(0) = 1$.

Finalement, nous savons que ρ satisfait :

$$\rho^2 - \Delta(\lambda)\rho + 1 = 0$$

Annexe 1 : Discriminant de Hill

Cette équation a deux solutions ρ_1 et ρ_2 dans \mathbb{C} .

- Si $|\Delta(\lambda)| > 2$, alors

$$\begin{cases} \rho_1, \rho_2 \in \mathbb{R} \\ \rho_1 \neq \rho_2 \\ \rho_1 \rho_2 = 1 \end{cases} \implies \lambda \notin \sigma(H)$$

- Si $|\Delta(\lambda)| \leq 2$, alors

$$\begin{cases} \rho_1, \rho_2 \in \mathbb{C} \\ \rho_1 = \rho_2^* \\ \rho_1 \rho_2 = 1 \end{cases} \implies \rho_1, \rho_2 \in \mathbb{U} \implies \lambda \in \sigma(H)$$

Annexe 1 : Discriminant de Hill

Pour $|\Delta(\lambda)| \leq 2$, si on écrit $\rho_1 = e^{ika}$ et $\rho_2 = e^{-ika}$, on obtient :

$$e^{ika} + e^{-ika} = \Delta(\lambda) \iff 2 \cos(ka) = \Delta(\lambda)$$

Le discriminant de Hill a les propriétés suivantes :

- $|\Delta(\lambda)| \leq 2 \iff \lambda \in \sigma(H)$
- $|\Delta(\lambda)| - 2 \cos(ka) = 0 \iff \lambda \in \sigma(H_k)$

Annexe 1 : Discriminant de Hill

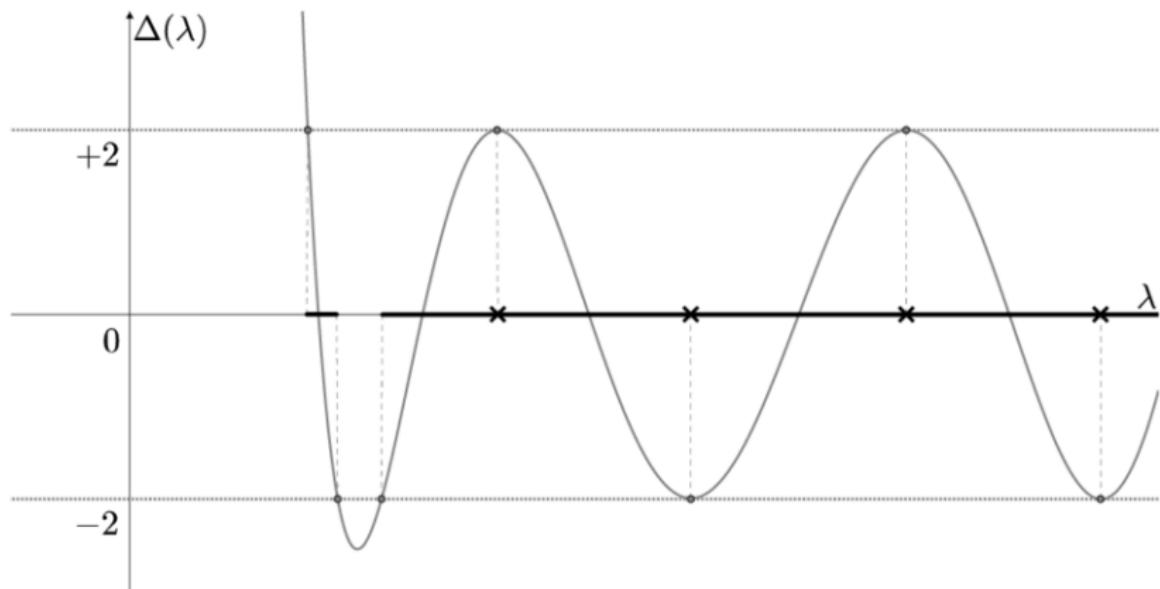


Figure: Illustration du discriminant de Hill

Annexe 2 : Cas particulier $V = V_1 + V_2$

- Il nous reste à prouver l'inclusion réciproque :

$$\sigma(H) \subset \sigma(H^{V_1}) + \sigma(H^{V_2})$$

Supposons que $Hu = -\Delta u + (V_1(x_1) + V_2(x_2))u$ et que nous cherchons une solution de l'équation $Hu - \lambda u = 0$, sous la forme :

$$u(x, y) = \sum_{n,m=1}^{\infty} c_{nm} X_n(x_1) Y_m(x_2),$$

où $\{X_n \mid n \in \mathbb{N}\}$ et $\{Y_m \mid m \in \mathbb{N}\}$ sont des fonctions linéairement indépendantes qui ne s'annulent qu'en des points discrets.

Annexe 2 : Cas particulier $V = V_1 + V_2$

À condition que la série converge localement uniformément, nous avons par un calcul formel direct :

$$(H - \lambda)u = \sum_{n,m=1}^{\infty} X_n(x_1) Y_m(x_2)$$
$$\left[\frac{-X_n''(x_1) + V_1(x_1)X_n(x_1)}{X_n(x_1)} + \frac{-Y_m''(x_2) - \lambda V_2(x_2)Y_m(x_2)}{Y_m(x_2)} \right]$$

L'équation $(H - \lambda)u = 0$ ne peut être satisfaite que si :

$$\frac{-X_n''(x_1) + V_1(x_1)X_n(x_1)}{X_n(x_1)} + \frac{-Y_m''(x_2) - \lambda V_2(x_2)Y_m(x_2)}{Y_m(x_2)} = 0, \quad n, m \in \mathbb{N}$$

Annexe 2 : Cas particulier $V = V_1 + V_2$

Pour une constante c indépendante de n et m , nous avons :

$$\frac{-X_n''(x_1) + V_1(x_1)X_n(x_1)}{X_n(x_1)} = c, \quad \frac{-Y_m''(x_2) - \lambda V_2(x_2)Y_m(x_2)}{Y_m(x_2)} = -c.$$

Pour que X_n soit non trivial, il est nécessaire que $c =: \lambda_{n_1}^{V_1}$ soit une valeur propre de $-\frac{d^2}{dx_1^2} + V_1(x_1)$ (avec les conditions aux limites appropriées).

Pour que Y_m soit non trivial, il est nécessaire que $\lambda - c =: \lambda_{n_2}^{V_2}$ soit une valeur propre de $-\frac{d^2}{dx_2^2} + V_2(x_2)$ (avec les conditions aux limites appropriées).

En ajoutant les deux équations, nous trouvons que $\lambda = \lambda_{n_1}^{V_1} + \lambda_{n_2}^{V_2}$.

Remerciements à M. Marletta pour la rédaction de cette partie.

Annexe 3 : Produit de Kronecker

Si A est une matrice $m \times n$ et B est une matrice $p \times v$, alors le produit de Kronecker $A \otimes B$ est la matrice bloc $pm \times vn$ suivante :

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11} \cdot B & \dots & A_{1n} \cdot B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} \cdot B & \dots & A_{mn} \cdot B \end{pmatrix}$$

Annexe 3 : Produit de Kronecker

Nous allons démontrer que $\frac{\partial}{\partial x_2} = \tilde{D} \otimes I$. (La même preuve s'applique pour $\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$)

Nous choisissons de disposer les valeurs $v_{i,j}$ dans le vecteur v^\rightarrow , mais nous aurions également pu utiliser :

$$v^\uparrow = \begin{pmatrix} w_1^\uparrow \\ w_2^\uparrow \\ \vdots \\ w_N^\uparrow \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad w_i^\uparrow = \begin{pmatrix} v_{1i} \\ v_{2i} \\ \vdots \\ v_{Ni} \end{pmatrix}$$

Il est immédiatement clair que $\frac{\partial}{\partial x_2} v^\uparrow = (I \otimes \tilde{D}) v^\uparrow$.

Annexe 3 : Produit de Kronecker

De plus, $v^\uparrow = Pv^\rightarrow$ avec :

$$P = \begin{pmatrix} E^{11} & \dots & E^{N1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E^{1N} & \dots & E^{NN} \end{pmatrix}$$

E^{ij} est la matrice $N \times N$ avec $E^{ij}(k, l) = \delta_{ik}\delta_{jl}$

Annexe 3 : Produit de Kronecker

Ainsi, nous avons $\frac{\partial}{\partial x_2} P v^\rightarrow = (I \otimes \tilde{D}) P v^\rightarrow$, donc

$$\frac{\partial}{\partial x_2} v^\rightarrow = P^{-1} (I \otimes \tilde{D}) P v^\rightarrow.$$

Comme $P^{-1} = P$, nous avons :

$$P^{-1} (I \otimes \tilde{D}) P = \begin{pmatrix} E^{11} & \dots & E^{N1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E^{1N} & \dots & E^{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{D} & & \\ & \ddots & \\ & & \tilde{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E^{11} & \dots & E^{N1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E^{1N} & \dots & E^{NN} \end{pmatrix}$$

Annexe 3 : Produit de Kronecker

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} E^{11} & \dots & E^{N1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ E^{1N} & \dots & E^{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{D}E^{11} & \dots & \tilde{D}E^{N1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{D}E^{1N} & \dots & \tilde{D}E^{NN} \end{pmatrix} \\ &= \left(\sum_{k=1}^{k=N} E^{ki} \tilde{D} E^{jk} \right)_{(i,j)} = \left(\tilde{d}_{ij} \sum_{k=1}^{k=N} E^{kk} \right)_{(i,j)} \\ &= \begin{pmatrix} \tilde{d}_{11}| & \dots & \tilde{d}_{1N}| \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{d}_{N1}| & \dots & \tilde{d}_{NN}| \end{pmatrix} = \tilde{D} \otimes I \end{aligned}$$

sachant que $E^{ab} A E^{cd} = a_{bc} E^{ad}$

Bibliographie

- (1) M. S. P. Eastham, *The spectral theory of periodic differential equations*, Texts in Mathematics (Edinburgh), Scottish Academic Press, 1973
- (2) N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders Collage Publishing, 1976
- (3) L. N. Trefethen, *Spectral Methods in Matlab*, SIAM, Philadelphia, 2000
- (4) P. Kuchment, *An Overview of Periodic Elliptic Operators*, Bulletin of the American Mathematical Society, Volume 53, Number 3, July 2016
- (5) Anne-Sophie Bonnet-Ben Dhia, Christophe Hazard et Jean-François Mercier *Théorie Spectrale des Opérateurs Auto-Adjoints et Applications*, 2023