

SEMINAIRE

**Equations aux  
Dérivées  
Partielles**

**2009-2010**

Francis Nier

**Une approche alternative de l'évolution adiabatique des résonances de forme 1D.**

*Séminaire É. D. P.* (2009-2010), Exposé n° XIII, 9 p.

<[http://sedp.cedram.org/item?id=SEDP\\_2009-2010\\_\\_\\_\\_A13\\_0](http://sedp.cedram.org/item?id=SEDP_2009-2010____A13_0)>

U.M.R. 7640 du C.N.R.S.  
F-91128 PALAISEAU CEDEX

Fax : 33 (0)1 69 33 49 49

Tél : 33 (0)1 69 33 49 99

**cedram**

*Exposé mis en ligne dans le cadre du  
Centre de diffusion des revues académiques de mathématiques*  
<http://www.cedram.org/>

# Une approche alternative de l'évolution adiabatique des résonances de forme 1D.

F. Nier

IRMAR, UMR - CNRS 6625

Université Rennes 1, Campus de Beaulieu

35042 Rennes Cedex, France

& CMAP, UMR - CNRS 7641

Ecole Polytechnique

Travail en commun avec A. Faraj et A. Mantile

## 1 Introduction

Motivés par la modélisation des diodes à effet tunnel résonnant qui touche à la question de la dynamique hors et loin de l'équilibre de réservoirs alimentant un petit système quantique avec des effets non linéaires, nous avons reconsidéré la question de l'évolution adiabatique des états résonnants. Rappelons que les résonances sont les états métastables de la mécanique quantique dont la description intuitive est celle d'états propres couplés à un continuum par effet tunnel. Mathématiquement elles sont définies comme des valeurs propres à partie imaginaire négative d'une déformation complexe du Hamiltonien quantique initial (cf [3][5][29][14][15]). La question de l'évolution adiabatique, c'est à dire le comportement dynamique quand le Hamiltonien subit des variations temporelles lentes, des états propres d'un Hamiltonien auto-adjoint est déjà bien comprise et nous renvoyons à [4][22][17] par exemple. Pour les états résonnants le caractère non auto-adjoint de l'opérateur déformé pose des difficultés bien connues et deux approches essentiellement ont été développées jusqu'à présent :

- Regarder l'évolution de quasi-résonances, état résonnants tronqués définis sur le réel, pour la dynamique Hamiltonienne à générateur auto-adjoint initial. Pour des Hamiltoniens indépendant du temps, c'est le point de vue développé dans [33][34][35][20][21] pour valider l'interprétation des résonances comme état métastables de la physique quantique. Pour la question de l'évolution adiabatique avec des Hamiltoniens lentement variables, cela a été développé dans [27][36][2].
- Essayer de développer une théorie adiabatique pour les Hamiltoniens déformés. Des résultats partiels ont été obtenus dans [23][31], mais la difficulté principale est que même si un opérateur non auto-adjoint  $A(t)$  a un spectre dans  $\{\text{Im } z \leq 0\}$ , il n'y a pas a priori d'estimation uniforme en  $\varepsilon$  pour le système dynamique donné par  $i\varepsilon\partial_t S_\varepsilon(t, s) = A(t)S_\varepsilon(t, s)$  pour  $t \geq s$  avec  $S_\varepsilon(s, s) = \text{Id}$ . Le résultat le plus abouti dans un cadre abstrait sur cette question est le résultat récent de A. Joye dans [18] qui utilise les estimations exponentielles des erreurs de l'approximation adiabatique en  $\mathcal{O}(e^{-\frac{C_1}{\varepsilon}})$  sous des hypothèses d'analyticité, pour compenser l'amplification temporelle en  $e^{\frac{C_2 t}{\varepsilon}}$ . Il obtient une justification de l'approximation adiabatique dans un cadre non auto-adjoint pour des temps petit  $t < \frac{C_1}{C_2}$ .

La première approche a le défaut de produire des erreurs avec des termes dispersifs mal contrôlés pour la modélisation non linéaire qui nous intéresse. La deuxième semble mieux adaptée mais fournit au mieux dans le cadre abstrait des résultats en temps petits, qui interdit des raccords d'échelles ou des échelles multiples comme cela peut arriver dans des situations concrètes. De plus les hypothèses très fortes d'analyticité par rapport à  $t$  nous ont semblé un peu trop fortes.

Nous avons donc proposé dans [13] une variante de la deuxième approche qui consiste introduire une modification supplémentaire à la déformation dans le complexe pour : 1) obtenir des générateurs maximaux accréatifs qui conduisent à  $\|S(t, s)\| \leq 1$ ; 2) assurer que cette modification artificielle perturbe peu toutes les quantités intervenant dans la modélisation non linéaire.

Nous avons montré dans [9][10][11][25][8] l'intérêt d'une modélisation semi-quantique, décrivant des puits quantiques à l'intérieur d'une île semiclassique. Celle-ci intègre complètement ce qui ressort de la littérature physique à savoir que dans ces hétérostructures

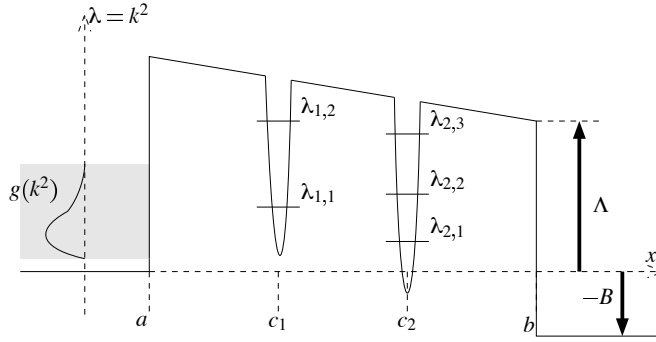
« Les phénomènes non linéaires sont gouvernés par un nombre fini d'états résonnants. »

Le petit paramètre étant noté  $\hbar > 0$ , nous nous intéressons à des opérateurs de Schrödinger sur  $\mathbb{R}$

$$H^{\hbar} = -\hbar^2 \Delta + V(x) - W^{\hbar}(s) = -\hbar^2 \Delta + V(x) - \sum_{j=1}^N W_j \left( \frac{x - c_j}{\hbar} \right)$$

avec  $V(x) \in L^\infty(\mathbb{R})$ ,  $\text{supp } V \subset [a, b]$ ,  $V_0 1_{[a,b]}(x) \leq V(x) \leq \frac{1}{c} 1_{[a,b]}(x)$ , les  $W_j \in L^\infty(\mathbb{R})$  (éventuellement  $\in \mathcal{M}_b(\mathbb{R})$ ) sont à support compact et positifs et nous supposons que le spectre ponctuel de  $-\Delta - W_j$  est contenu dans  $[-V_0 + c, -c]$ . La constante  $c > 0$  désigne une constante générique indépendante de  $\hbar \rightarrow 0$ , mais supposée suivant les cas suffisamment petite.

Plus généralement le potentiel  $V(x)$  inclut une différence de potentiel  $B$  et des effets non linéaires dans la zone  $[a, b]$  suivant le dessin ci-dessous.



Les énergies résonnantes sont les  $\lambda_{j,\ell}$ , la différence de potentiel appliquée est  $B$ ,  $V_0 = \Lambda$  sur la figure.

Pour simplifier nous travaillons ici avec  $B = 0$ , mais il est bon de rappeler que la dissymétrie traduisant la situation hors équilibre ne se décrit pas seulement avec cette différence de potentiel  $B$ , mais surtout avec l'anisotropie du profil d'injection des particules. Sur la figure ci-dessus le profil d'injection est  $f(k) = g(k^2) 1_{\mathbb{R}_+}(k)$  si  $k$  désigne le moment, et décrit un faisceau de particules provenant de la gauche. La modélisation de ces systèmes hors-équilibre, qui met l'accent sur le petit système, se fait au niveau quantique dans une approche dite de Landauer-Büttiker (see [Lan][BuLa][6][7]) et il a été montré dans [24] comment une quantification naturelle des conditions aux limites de flux entrants de la théorie cinétique classique permet d'en donner une version dynamique.

La forte anisotropie à l'échelle quantique doit amener à une analyse dans l'espace des phases de l'effet tunnel. Ainsi les modèles asymptotiques stationnaires présentés dans [10][11][25] et dont l'efficacité pour le traitement numérique de situation concrètes à été vérifié dans [9] avec une bonne explication de l'influence de la géométrie du potentiel sur les phénomènes d'hystérésis étudiés dans [16][28] et la prédiction de nouveaux phénomènes non linéaires dans [8], font intervenir le taux de branchement asymptotique

$$t_{j,\ell} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{|\langle W^{\hbar} \tilde{\psi}_{-}^{\hbar}(+k, \cdot), \Phi_{j,\ell}^{\hbar} \rangle|^2}{4\hbar k \Gamma_{j,\ell}^{\hbar}}, \quad (1.1)$$

pour une énergie résonnante  $\lambda_{j,\ell}$  (valeur asymptotique de la partie réelle de la résonance). La formule ci-dessus est valable  $k^2 \sim \lambda_{j,\ell}$  et quand  $\phi_{j,\ell}^{\hbar}$  est une fonction propre du problème de Dirichlet sur  $[a, b]$  localisée dans les puits et  $\tilde{\psi}_{-}^{\hbar}(+k, \cdot)$  est une fonction propre généralisée entrante du Hamiltonien à puits bouchés  $-\hbar^2 \Delta + V(x)$ . Le nombre  $\Gamma_{j,\ell}^{\hbar}$  est la partie imaginaire de la résonance est donnée par une règle d'or de Fermi

$$\Gamma_{j,\ell}^{\hbar}(1 + o(1)) = \frac{|\langle W^{\hbar} \tilde{\psi}_{-}^{\hbar}(+k, \cdot), \phi_{j,\ell}^{\hbar} \rangle|^2}{4\hbar k} + \frac{|\langle W^{\hbar} \tilde{\psi}_{-}^{\hbar}(-k, \cdot), \phi_{j,\ell}^{\hbar} \rangle|^2}{4\hbar k}. \quad (1.2)$$

Comme les fonctions  $\tilde{\psi}^h(\pm, \cdot)$  décroissent exponentiellement et les fonctions  $W^h$  et  $\phi_{j,\ell}^h$  sont localisées autour de  $\cup_{j=1}^N \{c_j\}$ , les taux de branchements asymptotiques qui interviennent dans le modèle non linéaire réduit (établi dans le cas stationnaire) résulte de la comparaison de quantités exponentiellement petites. C'est la subtilité du modèle et une difficulté certaine pour l'analyse.

En particulier, il s'agit de vérifier que les modifications apportées sur le Hamiltonien affectent peu (en valeurs relatives) ces exponentiellement petits.

## 2 Déformation dans le complexe

Comme nous l'avons déjà rappelé, les résonances sont bien définies après déformation dans le complexe du Hamiltonien initial (cf [3][5][15][14][29]). Comme le modèle à traiter au final présente des non linéarités dans le domaine  $[a, b]$  avec peu de régularité, nous avons pris le parti de faire cette déformation à l'extérieur du domaine  $[a, b]$  un peu dans l'esprit du « black box formalism » développé par Sjöstrand et Zworski dans [32], ou plus précisément pour ce cas unidimensionnel en reprenant la présentation de Simon dans [30] dans un des premiers travaux mathématiques sur le sujet.

D'abord on remarque que pour  $\theta \in \mathbb{R}$ , l'opérateur  $U_\theta$  donné par

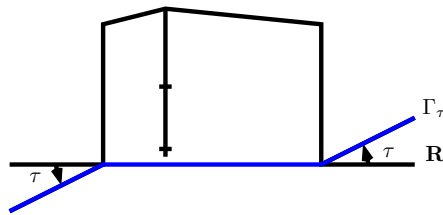
$$U_\theta \psi(x) = \begin{cases} e^{\frac{\theta}{2}} \psi(e^\theta(x-b) + b), & x > b \\ \psi(x), & x \in (a, b) \\ e^{\frac{\theta}{2}} \psi(e^\theta(x-a) + a), & x < a, \end{cases} \quad (2.1)$$

est unitaire et qu'un opérateur auto-adjoint  $H^h = -h^2 \Delta + \mathcal{V}^h(x)$  avec  $\mathcal{V}^h \in L^\infty((a, b); \mathbb{R})$ , donne par conjugaison,  $H^h(\theta) = U_\theta H^h U_\theta^{-1}$ ,

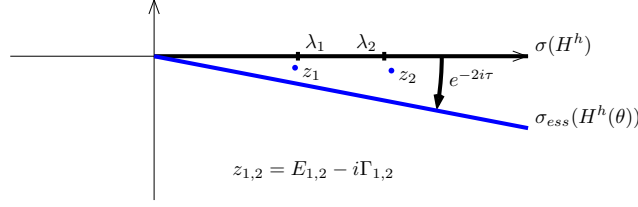
$$D(H^h(\theta)) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{a, b\}), \begin{cases} e^{-\frac{\theta}{2}} u(b^+) = u(b^-), & e^{-\frac{3\theta}{2}} u'(b^+) = u'(b^-) \\ e^{-\frac{\theta}{2}} u(a^-) = u(a^+), & e^{-\frac{3\theta}{2}} u'(a^-) = u'(a^+) \end{cases} \right\},$$

$$H^h(\theta) = -e^{-2\theta \times 1_{\mathbb{R} \setminus [a, b]}(x)} h^2 \Delta + \mathcal{V}^h(x).$$

Quand  $\theta$  est pris complexe avec une partie imaginaire positive, la famille  $(H^h(\theta))_{\text{Im } \theta \geq 0}$  définit une famille holomorphe d'opérateurs au sens de Kato avec un spectre essentiel tourné dans le demi-plan inférieur de  $e^{-2 \text{Im } \theta}$ . Rappelons que les résonances sont les valeurs propres qui, une fois dévoilées ainsi, ne dépendent pas de  $\theta$  (cf [29][3][5][12]). Les choses peuvent se résumer dans les figures suivantes



Pour  $\theta = i\tau$ , considérer  $H^h(i\tau)$  sur  $L^2(\mathbb{R})$  revient à considérer le Hamiltonien initial  $H^h$  dans l'espace des fonctions sur une déformation dans le complexe de l'axe réel  $L^2(\Gamma_\tau)$



Le spectre essentiel de  $H^h(i\tau)$  est tourné dans le complexe et dévoile les résonances.

Dans le cas qui nous intéresse des puits quantiques dans une île semiclassique on peut vérifier, en adaptant les techniques de Helffer-Sjöstrand dans [14] à notre cas avec peu de régularité, que les écarts entre les résonances  $z_{j,\ell}^h$  et les valeurs propres associées du problème de Dirichlet  $\lambda_{j,\ell}^h \sim \lambda_{j,\ell}$  sont exponentiellement petites :

$$z_{j,\ell}^h - \lambda_{j,\ell}^h = \tilde{\mathcal{O}}(e^{-\frac{2S_{j,\ell}}{h}}), \quad S_i = d_{Ag}(\text{supp } W^h, \{a, b\}; \lambda_{j,\ell}).$$

où  $d_{Ag}(x, y; e)$  est la distance d'Agmon donnée par

$$d_{Ag}(x, y; E) = \left| \int_x^y \sqrt{V(t) - E} dt \right|.$$

Finalement, notons deux choses pour ces déformations dans le complexe :

- 1) La déformation singulière conduit à des opérateurs à domaine variable et il faut faire un peu attention notamment sur la manipulation des adjoints. En revanche en dimension 1, ces déformations singulières sont des perturbations ponctuelles d'opérateurs différentiels et on a des formules de Krein pour les résolvantes sont disponibles en adaptant l'approche générale de [1][26].
- 2) La déformation dans le complexe singulière a pour autre mérite de localiser aux deux points  $a$  et  $b$ , l'obstruction à la maximale accréativité du Hamiltonien déformé. En fait une intégration par partie donne pour  $\theta = i\tau$

$$\text{Re} \langle u, iH^h(\theta)u \rangle = \text{Re} \left[ ih^2(\bar{u}u') \Big|_{a^-}^{b^+} (e^{-2\theta} - e^{-\frac{\theta+3\theta}{2}}) \right] + h^2 \sin(2\tau) \int_{\mathbb{R} \setminus [a,b]} |u'|^2 dx, \quad (2.2)$$

où le terme de bord n'a pas de signe et n'est pas contrôlé par l'autre terme.

### 3 Hamiltonien modifié

La modification que nous envisageons consiste à changer les conditions de raccord en  $a$  et  $b$  pour que le terme de bord dans (2.2) disparaisse pour  $\theta = i\tau$ . On introduit un deuxième paramètre  $\theta_0$  et on considère la famille d'opérateurs  $H_{\theta_0}^h(\theta)$ , paramétrée par  $(\theta_0, \theta)$  et donnée par

$$D(H_{\theta_0}^h(\theta)) = \left\{ u \in H^2(\mathbb{R} \setminus \{a, b\}), \left[ \begin{array}{l} e^{-\frac{\theta_0+\theta}{2}} u(b^+) = u(b^-), \quad e^{-\frac{3\theta_0+3\theta}{2}} u'(b^+) = u'(b^-) \\ e^{-\frac{\theta_0+\theta}{2}} u(a^-) = u(a^+), \quad e^{-\frac{3\theta_0+3\theta}{2}} u'(a^-) = u'(a^+) \end{array} \right] \right\},$$

$$H_{\theta_0}^h(\theta) = -e^{-2\theta \times 1_{\mathbb{R} \setminus [a,b]}(x)} h^2 \Delta + \mathcal{V}^h(x).$$

Le point important est que pour  $\theta_0 = \theta = i\tau$ , l'intégration par partie donne

$$\text{Re} \langle u, iH_{i\tau}^h(i\tau)u \rangle = +h^2 \sin(2\tau) \int_{\mathbb{R} \setminus [a,b]} |u'|^2 dx \geq 0. \quad (3.1)$$

Il y a différents résultats de comparaison qui montrent que cette modification paramétrée par  $\theta_0$  conduit à des erreurs relatives proportionnelles à  $\theta_0$  pour toutes les quantités spectrales intéressantes dans le problème. Le premier d'entre eux qui s'obtient par calcul explicite des fonctions propres généralisées pour  $H_{\theta_0}^h(0) = -h^2 \Delta_{\theta_0}$  quand  $\mathcal{V}^h \equiv 0$  ramène au Laplacien usuel par conjugaison (entre autres choses cela dit que  $-\Delta_{\theta_0}$  est symétrisable i.e. auto-adjoint après un choix global du bon produit scalaire sur  $L^2(\mathbb{R})$ ).

**Proposition 3.1.** *Pour  $\theta_0 \in \mathbb{C}$ ,  $|\theta_0| < \pi/4$ , il existe un opérateur borné  $W(\theta_0)$  tel que  $W(\theta_0) = Id_{L^2} + \mathcal{O}(|\theta_0|)$  dans  $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$  et*

$$-\Delta_{\theta_0} = W(\theta_0)(-\Delta)W(\theta_0)^{-1}.$$

Ce résultat rejoint la discussion à la fin du livre de Kato [19] sur la question de l'analyticité près de 0 des opérateurs d'onde par rapport à la perturbation. On notera que même si les perturbations ponctuelles peuvent être vues comme des perturbations de rang fini singulières, cela n'a rien d'automatique comme le montre la paire  $(-\Delta, -\Delta + \alpha\delta_0(x))$  pour laquelle l'opérateur d'onde ne définit un opérateur borné que pour  $\alpha \in \mathbb{R}$  (et donc aucune analyticité n'est envisageable).

Le deuxième résultat concerne les fonctions d'onde du problème à puits bouché  $W^h \equiv 0$ ,  $\mathcal{V}^h \equiv V$ , toujours sans déformation dans le complexe,  $\theta = 0$ . Rappelons que les fonctions propres généralisées associées à  $H_{\theta_0}^h(0) = -h^2\Delta_{\theta_0} + V(x)$  sont données par

$$\begin{aligned} (-h^2\Delta + V(x) - k^2)\psi &= 0 \quad \text{in } \mathbb{R} \setminus \{a, b\} \\ \psi(a^+) &= e^{-\frac{\theta_0}{2}}\psi(a^-) \quad , \quad \psi'(a^+) = e^{-\frac{3\theta_0}{2}}\psi'(a^-) \\ \psi(b^-) &= e^{-\frac{\theta_0}{2}}\psi(b^+) \quad , \quad \psi'(b^-) = e^{-\frac{3\theta_0}{2}}\psi'(b^+) \\ \psi|_{(-\infty, a)} &= e^{i\frac{kx}{h}} + R(k)e^{-i\frac{kx}{h}} \quad , \quad \psi|_{(b, +\infty)} = T(k)e^{i\frac{kx}{h}} \quad \text{pour } k > 0 \\ \psi|_{(-\infty, a)} &= T(k)e^{i\frac{kx}{h}} \quad , \quad \psi|_{(b, +\infty)} = e^{i\frac{kx}{h}} + R(k)e^{-i\frac{kx}{h}} \quad \text{pour } k < 0. \end{aligned}$$

Ces fonctions propres généralisées associées à une énergie  $k^2 \in [0, V_0]$  présente une décroissance exponentielle dans la zone classiquement interdite  $x \in [a, b]$ . Le résultat de comparaison entre  $\theta_0 = 0$  et  $\theta_0 \neq 0$ , inclut ce poids de décroissance exponentielle.

**Proposition 3.2.** *Supposons  $V - k^2 \geq c$ ,  $\|V\|_{L^\infty} \leq \frac{1}{c}$  et  $|\theta_0| \leq ch$  avec  $c$  suffisamment petit en fonction de  $a, b$ . La différence entre les fonctions propres généralisées  $u = \tilde{\psi}_{-\theta_0}^h(k, \cdot) - \tilde{\psi}_{0,0}^h(k, \cdot)$  vérifie*

$$h^{1/2} \sup_{x \in [a, b]} |e^{\frac{\varphi(x)}{h}} u(x)| + \|he^{\frac{\varphi}{h}} u'\|_{L^2} + \|e^{\frac{\varphi}{h}} u\|_{L^2} \leq \frac{C_{a,b,c}|\theta_0|}{h^{3/2}},$$

$$\begin{aligned} \text{avec} \quad \varphi(x) &= d_{Ag}(x, a, k^2) \quad \text{quand } k > 0, \\ \text{et} \quad \varphi(x) &= d_{Ag}(x, b, k^2) \quad \text{quand } k < 0. \end{aligned}$$

Pour étudier les résonances, nous travaillons localement autour d'une énergie  $\lambda^0$  (On peut s'y ramener dans notre problème). Les hypothèses pour le Hamiltonien  $H_D^h = -h^2\Delta + V - W^h$  avec conditions de Dirichlet en  $a, b$  sont : Il y a un nombre fini de valeurs propres  $\lambda_1^h, \dots, \lambda_\ell^h$  de  $H_D^h$  telles que

$$d(\lambda^0, \sigma(H_D^h) \setminus \{\lambda_1^h, \dots, \lambda_\ell^h\}) \geq c, \quad (3.2)$$

$$c \leq \lambda^0 \leq \inf_{x \in (a, b)} V(x) - c \leq \|V\|_{L^\infty} \leq \frac{1}{c}, \quad (3.3)$$

$$\max_{1 \leq j \leq \ell} |\lambda_j^h - \lambda^0| \leq \frac{1}{c}h. \quad (3.4)$$

Enfin on désigne par  $\omega_{ch}$  un voisinage de  $\{\lambda_1^h, \dots, \lambda_\ell^h\}$  tel que

$$\omega_{ch} \subset \{z \in \mathbb{C}, d(z, \{\lambda_1^h, \dots, \lambda_\ell^h\}) \leq ch\}. \quad (3.5)$$

Les résonances étudiées sont pour l'opérateur  $H_{\theta_0}^h = -h^2\Delta_{\theta_0} + V(x) - W^h(x)$ . Comme pour le cas  $\theta_0 = 0$ , cela passe par une déformation dans le complexe et il faut considérer  $H_{\theta_0}^h(\theta)$  avec  $\text{Im } \theta > 0$ . Le résultat suivant donne aussi la comparaison des résonances proches de  $\lambda_j^h$ ,  $z_j^h(\theta_0)$  pour  $\theta_0 \neq 0$  et  $z_j^h$  pour  $\theta_0 = 0$ .

**Proposition 3.3.** *Supposons (3.2)(3.3)(3.4) et choisissons  $\theta_0$  tel que  $|\theta_0| \leq \frac{c^2 h}{8}$ . Alors pour  $h > 0$  assez petit, le Hamiltonien modifié  $H_{\theta_0}^h(0)$  admet exactement  $\ell$  résonances  $\{z_1^h(\theta_0), \dots, z_\ell^h(\theta_0)\}$  dans le domaine complexe*

$\omega_{\frac{c_h}{2}}$ , éventuellement comptées avec multiplicité, avec l'estimation

$$z_j^h(\theta_0) - \lambda_j^h = \mathcal{O}\left(\frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3}\right), \quad S_0 = d_{Ag}(\text{supp } W^h, \{a, b\}, \lambda^0).$$

En particulier quand

$$\lim_{h \rightarrow 0} h^3 e^{\frac{2S_0}{h}} \min_{j \neq j'} |\lambda_j^h - \lambda_{j'}^h| = +\infty, \quad (3.6)$$

il existe  $C > 1$  tel que chaque disque  $D_{j,h} = \left\{ z \in \mathbb{C}, |z - \lambda_j^h| \leq C \frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3} \right\}$  contienne exactement une résonance  $z_j^h(\theta_0)$  pour  $h > 0$  is suffisamment petit.

De plus si  $e^{-\frac{S_0}{4h}} \leq |\theta_0| \leq \frac{e^2 h}{8}$ , et sous la condition (3.6), la comparaison des résonances de  $H_{\theta_0}^h$  et  $H_0^h$  est donnée par

$$\max_{j \in \{1, \dots, \ell\}} |z_j^h(\theta_0) - z_j^h| = \mathcal{O}\left(|\theta_0| \frac{e^{-\frac{2S_0}{h}}}{h^3}\right).$$

La preuve de ce résultat se fait après réduction à un problème sur  $[a, b]$  et en reprenant les techniques de Helffer-Sjöstrand in [14] à l'aide d'un problème de Grushin, après quelques ajustements pour permettre un potentiel  $V$  peu régulier et calculer de façon précise les variations par rapport à  $\theta_0$ .

En rassemblant les Propositions 3.2 et 3.3, nous voyons que toutes les quantités intervenant dans (1.2) et (1.1) ont des variations relatives petites pourvu que  $|\theta_0| = \mathcal{O}(h^4)$ .

## 4 Evolution adiabatique des résonances pour le Hamiltonien modifié

Nous considérons maintenant un Hamiltonien avec un potentiel dépendant du temps  $V(t) - W^h(t) = V(t) - W_1^h(t) - W_2^h(t)$  à support dans  $[a, b]$  avec

$$W_1^h(x, t) = \sum_{j_1=1}^{M_1} w_{j_1}\left(\frac{x - x_{j_1,1}}{h}, t\right), \quad W_2^h(t) = \sum_{j_2=1}^{M_2} \alpha_{j_2}(t) h \delta(x - x_{j_2,2}), \quad \alpha_{j_2}(t) > 0, \quad (4.1)$$

où les  $x_j$  sont des points distincts fixés dans  $(a, b)$  et les supports  $\text{supp } w_{j_1}$  sont contenus dans un compact fixé. Les fonctions  $V(\cdot, t)$ ,  $w_{j_1}(\cdot, t)$ ,  $\alpha_{j_2}(t)$  sont des fonctions  $\mathcal{C}^K$ ,  $K \geq 2$ , de  $t$  avec un contrôle uniforme des dérivées par rapport à  $h \in (0, h_0)$  et  $t \in [0, T]$  et des hypothèses similaires à (3.2)(3.3)(3.4). Plus précisément nous supposons que l'on peut trouver  $\lambda^0(t)$  de telle sorte que

$$\max_{\substack{t \in [0, T] \\ 0 \leq k \leq K \\ 0 \leq j_1 \leq M_1 \\ 0 \leq j_2 \leq M_2}} \|\partial_t^k V(t)\|_{L^\infty} + \|\partial_t^k w_{j_1}(t)\|_{L^\infty} + |\partial_t^k \alpha_{j_2}(t)| + |\partial_t^k \lambda^0(t)| \leq \frac{1}{c}, \quad (4.2)$$

$$\forall x \in [a, b], \quad c \leq \lambda^0(t) \leq V(x, t) - c. \quad (4.3)$$

Ce  $\lambda^0(t)$  est de plus choisi de façon à être au centre d'un paquet de valeurs propres du Hamiltonien  $H_D^h(t) = -h^2 \Delta_D + V(t) - W^h(t)$  avec conditions de Dirichlet sur  $(a, b)$  : Il existe  $\lambda_1^h(t), \dots, \lambda_\ell^h(t) \in \sigma(H_D^h(t))$  tels que

$$d(\lambda^0(t), \sigma(H_D^h(t)) \setminus \{\lambda_1^h(t), \dots, \lambda_\ell^h(t)\}) \geq c, \quad (4.4)$$

$$\max_{1 \leq j \leq \ell} |\lambda_j^h(t) - \lambda^0(t)| \leq \frac{h}{c}. \quad (4.5)$$

L'opérateur considéré est  $H_{\theta_0}^h(\theta_0, t)$  pour le potentiel  $V(x, t) - W^h(x, t)$  avec

$$\theta_0 = ih^{N_0}, \quad N_0 > 1.$$

On peut alors trouver un contour  $\Gamma^h(t)$  qui entoure les résonances  $z_j^h(\theta_0)$  et tel que

$$\min_{t \in [0, T]} d(\Gamma^h(t), \sigma(H_{\theta_0}^h(\theta_0, t))) \geq \frac{1}{C_{a,b,c}} h^{N_0}.$$

De plus l'étude fine des normes de résolvantes, passant par la comparaison du problème du  $[a, b]$  avec les techniques de problème de Grushin mais également par les formules de Krein pour traiter la partie sur  $\mathbb{R} \setminus [a, b]$ , conduit à des estimations précises pour la projections spectrale associée aux valeur propres  $\{z_1^h(\theta_0), \dots, z_\ell^h(\theta_0)\}$  de  $H_{\theta_0}^h(\theta, t)$  :

$$P_0^h(t) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\Gamma^h(t)} (z - H_{\theta_0}^h(\theta_0, t))^{-1} dz. \quad (4.6)$$

Ces estimations pour  $K \geq 2$  assurent

$$\max_{t \in [0, T]} \|P_0^h(t)\| + \|\partial_t P_0^h(t)\| \leq C_T.$$

Donc le transport parallèle  $\Phi_0(t, s)$ ,  $t, s \in [0, T]$  associé à  $(P_0^h(t))_{t \in [0, T]}$  est bien défini par

$$\begin{cases} \partial_t \Phi_0 + [P_0^h, \partial_t P_0^h] \Phi_0 = 0 \\ \Phi_0(t = s, s) = \text{Id} \end{cases} \quad (4.7)$$

et vérifie

$$\forall s, t \in [0, T], \quad P_0^h(t) = \Phi_0(t, s) P_0^h(s).$$

Finalement le résultat d'évolution adiabatique concerne des variations temporelles variant très lentement et l'échelle de temps considérée est

$$\varepsilon = e^{-\frac{\tau}{h}}, \quad \text{avec } \tau > 0 \text{ fixé,}$$

sans pour autant relier cet exponentiellement grand aux parties imaginaires des résonances. Avec  $K \geq 2$ , le problème de Cauchy

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t u = H_{\theta_0}^h(\theta_0, t) u, & t \geq s, \\ u(t = s) = u_s \end{cases} \quad (4.8)$$

définit un système dynamique  $U^\varepsilon(t, s)$ ,  $0 \leq s \leq t \leq T$ , qui de plus est un système dynamique de contractions sur  $L^2(\mathbb{R})$  quand  $\theta_0 = \theta = ih^{N_0}$ , en vertu de (3.1)

**Theorem 4.1.** *Supposons (4.2)(4.4)(4.3)(4.5) avec  $K \geq 2$  prenons  $\theta_0 = \theta = ih^{N_0}$ ,  $N_0 > 1$ ,  $\varepsilon = e^{-\frac{\tau}{h}}$ ,  $\tau > 0$ . Notons  $P_0^h(t)$  la projection spectrale (4.6), et soit  $r \in \mathcal{C}^0([0, T]; L^2(\mathbb{R}))$  et  $r_s \in L^2(\mathbb{R})$ . Pour  $s \in [0, T]$  prenons une donnée initiale  $u_s \in L^2(\mathbb{R})$  telle que  $P_0(s)u_s = u_s$ .*

*Alors les solutions  $u^h$  et  $v^h$  aux problèmes de Cauchy*

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t u^h = H_{\theta_0}^h(\theta_0, t) u^h + r(t), & t \geq s, \\ u^h(t = s) = u_s + r_s \end{cases} \quad (4.9)$$

et

$$\begin{cases} i\varepsilon \partial_t v^h = \Phi_0(s, t) P_0(t) H_{\theta_0}^h(\theta_0, t) P_0(t) \Phi_0(t, s) v^h, & t \geq s \\ v^h(t = s) = u_s, \end{cases}$$

satisfont

$$\max_{t \in [s, T]} \|u^h(t) - \Phi_0(t, s) v^h(t)\| \leq C_{a,b,c,\tau,T,\delta} \left[ \varepsilon^{1-\delta} \|u_s\| + \|r_s\| + \frac{1}{\varepsilon} \max_{t \in [s, T]} \|r(t)\| \right]. \quad (4.10)$$

## Références

- [1] S. Albeverio et K. Pankrashkin. A remark on Krein's resolvent formula and boundary conditions. *J. Phys. A*, 38(22) :4859–4864, 2005.
- [2] W.K. Abou Salem et J. Fröhlich. Adiabatic theorems for quantum resonances. *Comm. Math. Phys.*, 273(3) :651–675, 2007.



- [3] J. Aguilar et J. M. Combes. A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger Hamiltonians. *Comm. Math. Phys.*, 22 :269–279, 1971.
- [4] J. E. Avron, R. Seiler et L. G. Yaffe. Adiabatic theorems and applications to the quantum Hall effect. *Comm. Math. Phys.*, 110(1) :33–49, 1987.
- [5] E. Balslev et J. M. Combes. Spectral properties of many-body Schrödinger operators with dilatation-analytic interactions. *Comm. Math. Phys.*, 22 :280–294, 1971.
- [6] N. Ben Abdallah, P. Degond, and P.A. Markowich. On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model. *Z. Angew. Math. Phys.*
- [7] N. Ben Abdallah. On a multidimensional Schrödinger-Poisson scattering model for semiconductors. *J. Math. Phys.*, 41(7) :4241–4261, 2000.
- [8] V. Bonnaillie-Noël, A. Faraj et F. Nier. Simulation of resonant tunneling heterostructures : numerical comparison of a complete Schrödinger-Poisson system and a reduced nonlinear model. *J. Comput. Elec.*, 8(1) :11–18, 2009.
- [9] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier et Y. Patel. Computing the steady states for an asymptotic model of quantum transport in resonant heterostructures. *J. Comput. Phys.*, 219(2) :644–670, 2006.
- [10] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier et Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells. I. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 25(5) :937–968, 2008.
- [11] V. Bonnaillie-Noël, F. Nier et Y. Patel. Far from equilibrium steady states of 1D-Schrödinger-Poisson systems with quantum wells. II. *J. Math. Soc. Japan*, 61(1) :65–106, 2009.
- [BuLa] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer et S. Pinhas. Generalized manychannel conductance formula with application to small rings. *Phys. Rev. B* **31** (1985) pp. 6207–6215.
- [12] H. L. Cycon, R. G. Froese, W. Kirsch et B. Simon. *Schrödinger operators with application to quantum mechanics and global geometry*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, Berlin, study edition, 1987.
- [13] A. Faraj, A. Mantile et F. Nier. Adiabatic evolution of 1D shape resonances : an artificial interface conditions approach. Prépublication de l'IRMAR janvier 2010, hal-00448868.
- [14] B. Helffer et J. Sjöstrand. *Résonances en limite semi-classique*. Number 24-25 in Mém. Soc. Math. France (N.S.). 1986.
- [15] P. D. Hislop et I. M. Sigal. *Semiclassical theory of shape resonances in quantum mechanics*, volume 78(399) of *Mem. Amer. Math. Soc.* 1989.
- [16] G. Jona-Lasinio, C. Presilla et J. Sjöstrand. On Schrödinger equations with concentrated nonlinearities. *Ann. Physics*, 240(1) :1–21, 1995.
- [17] A. Joye et C.E. Pfister. Exponential estimates in adiabatic quantum evolution. In *XIIth International Congress of Mathematical Physics (ICMP '97) (Brisbane)*, pages 309–315. Int. Press, Cambridge, MA, 1999.
- [18] A. Joye. General adiabatic evolution with a gap condition. *Comm. Math. Phys.*, 275(1) :139–162, 2007.
- [19] T. Kato. *Perturbation theory for linear operators*. Second edition. Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften, Band 132. Springer-Verlag (1976).
- [20] M. Klein et J. Rama. Almost exponential decay of quantum resonance states and Paley-Wiener type estimates in Gevrey spaces. preprint, mp-arc 09-64, 2009.
- [21] M. Klein, J. Rama et R. Wüst. Time evolution of quantum resonance states. *Asymptot. Anal.*, 51(1) :1–16, 2007.
- [Lan] R. Landauer. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM J. Res. Develop.* **1** (1957) pp. 223–231.
- [22] G. Nenciu. Linear adiabatic theory. Exponential estimates. *Comm. Math. Phys.*, 152(3) :479–496, 1993.
- [23] G. Nenciu et G. Rasche. On the adiabatic theorem for nonselfadjoint Hamiltonians. *J. Phys. A*, 25(21) :5741–5751, 1992.
- [24] F. Nier. The dynamics of some quantum open systems with short-range nonlinearities. *Nonlinearity*, 11(4) :1127–1172, 1998.

- [25] F. Nier. Accurate WKB approximation for a 1D problem with low regularity. *Serdica Math. J.*, 34(1) :113–126, 2008.
- [26] K. Pankrashkin. Resolvents of self-adjoint extensions with mixed boundary conditions. *Rep. Math. Phys.*, 58(2) :207–221, 2006.
- [27] G. Perelman. Evolution of adiabatically perturbed resonant states. *Asymptot. Anal.*, 22(3-4) :177–203, 2000.
- [28] C. Presilla et J. Sjöstrand. Transport properties in resonant tunneling heterostructures. *J. Math. Phys.*, 37(10) :4816–4844, 1996.
- [29] B. Simon. Resonances and complex scaling : a rigorous overview. *Int.J. Quantum Chem.*, 14(4) :529–542, 1978.
- [30] B. Simon. The definition of molecular resonance curves by the method of exterior complex scaling. *Phys. Lett.*, 71A(2,3) :211–214, 1979.
- [31] J. Sjöstrand. Projecteurs adiabatiques du point de vue pseudodifférentiel. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 317(2) :217–220, 1993.
- [32] J. Sjöstrand et M. Zworski. Complex scaling and the distribution of scattering poles. *J. Amer. Math. Soc.*, 4(4) :729–769, 1991.
- [33] E. Skibsted. Truncated Gamow functions,  $\alpha$ -decay and the exponential law. *Comm. Math. Phys.*, 104(4) :591–604, 1986.
- [34] E. Skibsted. Truncated Gamow functions and the exponential decay law. *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, 46(2) :131–153, 1987.
- [35] E. Skibsted. On the evolution of resonance states. *J. Math. Anal. Appl.*, 141(1) :27–48, 1989.
- [36] A. Soffer et M. I. Weinstein. Time dependent resonance theory. *Geom. Funct. Anal.*, 8(6) :1086–1128, 1998.