

# Guides d'ondes quantiques à coins

Monique DAUGE, CNRS, Université de Rennes 1

## Motivations

Dans une littérature assez abondante s'étageant sur les 20 dernières années, le terme de *guide d'ondes quantique* se rapporte au problème spectral pour le Laplacien posé sur des domaines infinis de structure tube ou film avec, le plus souvent, des conditions de Dirichlet sur le bord. Ce problème modélise les états quantiques d'électrons dans des structures mésoscopiques (fils, circuits) dont la taille caractéristique va de la dizaine à plusieurs centaines de nanomètres. Les interactions entre particules peuvent être négligées car le libre parcours moyen de l'électron est très supérieur aux tailles des structures. D'autre part les potentiels associés à ces structures forment des barrières autour de leurs bords. Ainsi l'équation de Schrödinger se ramène à une simple équation de Helmholtz avec conditions au bord de Dirichlet.

Le domaine  $\Omega$  où est posé le problème est toujours supposé avoir une description simple de type produit tensoriel à l'infini. Cette propriété induit une caractérisation simple du spectre essentiel du Laplacien Dirichlet qui est de la forme  $[\gamma, \infty)$  avec  $\gamma > 0$ . En général on cherche la réponse aux deux questions suivantes

- Existe-t-il des états liés (c'est-à-dire des valeurs propres sous le spectre essentiel)?
- Existe-t-il des configurations où le nombre d'états liés est grand?

Ces deux questions ont déjà été abondamment traitées et reçoivent une réponse générique assez simple — de manière une peu surprenante — en ce qui concerne les tubes:

- La réponse est oui dès que la fibre moyenne du tube présente une courbure non identiquement nulle.
- Ces configurations sont celles où la courbure est grande (et, donc, la section du tube est petite).

## Le guide à coin

L'idée de grande courbure renvoie inmanquablement à celle de coin: la configuration la plus simple est celle du guide brisé ("broken waveguide") où  $\Omega$  est le domaine du plan limité par deux secteurs de même ouverture  $2\theta$ , où  $\theta \in (0, \frac{\pi}{2}]$ , selon

$$\Omega_\theta = \left\{ (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_1 \tan \theta < |x_2| < \left( x_1 + \frac{\pi}{\sin \theta} \right) \tan \theta \right\},$$

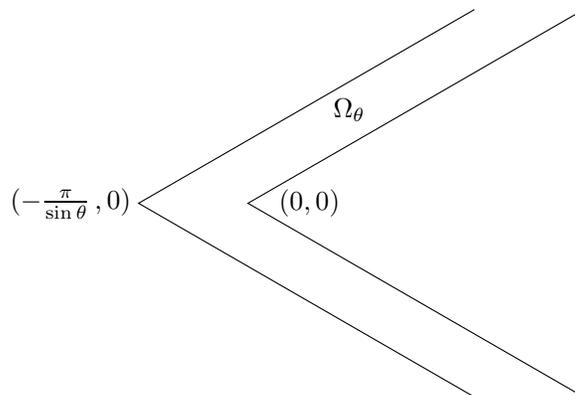


Figure 1: Le guide à coin  $\Omega_\theta$ .

La largeur du guide en dehors de la zone du coin est ainsi fixée à  $\pi$ . On en déduit que le spectre essentiel de  $-\Delta$  avec condition de Dirichlet sur  $\Omega_\theta$  est l'intervalle  $[1, \infty)$ . Schématiquement, les propriétés du spectre en dessous de la borne 1 sont les suivantes

- a) Pour tout  $\theta$  dans l'intervalle ouvert  $(0, \frac{\pi}{2})$ , il y a au moins une valeur propre  $< 1$ .  
b) Quand  $\theta \rightarrow 0$ , le nombre des valeurs propres  $< 1$  tend vers l'infini.

## Aperçu des résultats

Dans cet exposé nous montrerons pourquoi ces deux propriétés sont vraies. Par des développements multi-échelles, nous exhiberons des asymptotiques précises des paires (valeur propre, vecteur propre) lorsque  $\theta$  tend vers 0. Ces paires admettent des développements en puissances entières de  $\theta^{1/3}$ . Les échelles présentes dans les asymptotiques des vecteurs propres sont l'échelle standard sans scaling (partie exponentiellement décroissante) et une échelle en  $x_1 \theta^{1/3}$  (partie à support dans le morceau triangulaire du guide, (dé)concentrée à l'échelle  $\theta^{-1/3}$ ).

Nous aborderons les relations entre ce problème et son approximation unidimensionnelle dite de Born-Oppenheimer, et aussi les relations avec le problème de Dirichlet sur un triangle.

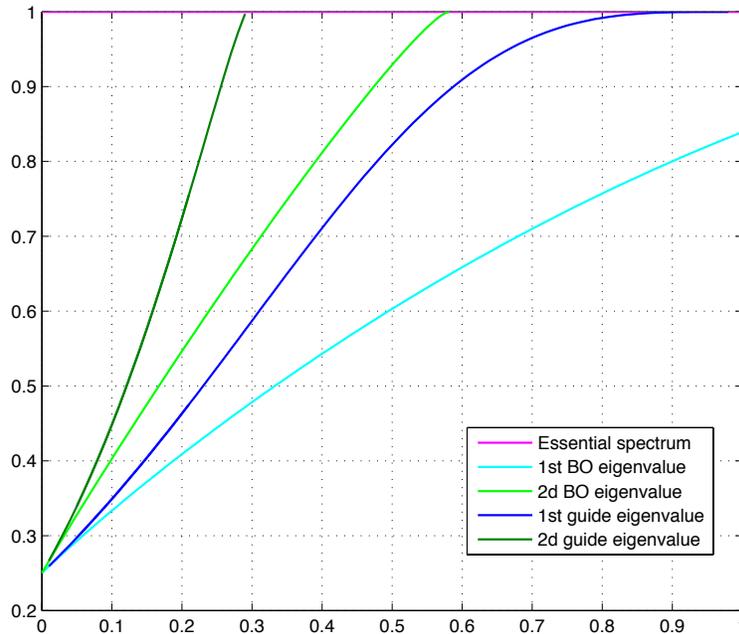


Figure 2: Les premières et deuxièmes valeurs propres dans  $\Omega_\theta$  en fonction de  $h = 2\theta/\pi$ , comparées avec celles d'un opérateur unidimensionnel tangent à l'approximation de Born-Oppenheimer.

Une question intéressante est le comportement des vecteurs propres au voisinage de coin rentrant  $(0, 0)$ . La théorie standard annonce la présence d'une partie singulière non  $H^2$  de la forme

$$(r, \phi) \mapsto d r^{\pi/2(\pi-\theta)} \sin\left(\frac{\phi \pi}{2(\pi-\theta)}\right)$$

où  $(r, \phi)$  sont des coordonnées polaires adaptées centrées en  $(0, 0)$  et  $d$  est un coefficient qui dépend du vecteur propre. Nous verrons pourquoi les vecteurs propres normalisés ont un coefficient  $d$  qui tend vers 0 comme  $\theta^{1/3}$ .

## Littérature

Voir [5] pour un survey sur les guides d'ondes quantiques, et [1, 2] pour des résultats de physique théorique sur les guides à coins. Voir aussi [6] pour des asymptotiques précises dans les triangles avec un angle petit, et [4] pour les tubes minces en dimension supérieure.

## Collaboration

Cet exposé est issu du travail commun [3] avec Nicolas Raymond. Les simulations numériques que nous présenterons sont réalisées à l'aide de la bibliothèque éléments finis MÉLINA [7] grâce aux contributions de Pierre Carcaud et Yvon Lafranche.

## Références

- [1] Y. AVISHAI, D. BESSIS, B. G. GIRAUD, G. MANTICA. Quantum bound states in open geometries. *Phys. Rev. B* **44**(15) (Oct 1991) 8028–8034.
- [2] J. P. CARINI, J. T. LONDERGAN, K. MULLEN, D. P. MURDOCK. Multiple bound states in sharply bent waveguides. *Phys. Rev. B* **48**(7) (Aug 1993) 4503–4515.
- [3] M. DAUGE, N. RAYMOND. Plane waveguides with corners and small angle limit. *Preprint* (2011).
- [4] B. CHENAUD, P. DUCLOS, P. FREITAS, D. KREJČIŘÍK. Geometrically induced discrete spectrum in curved tubes. *Differential Geom. Appl.* **23**(2) (2005) 95–105.
- [5] P. DUCLOS, P. EXNER. Curvature-induced bound states in quantum waveguides in two and three dimensions. *Rev. Math. Phys.* **7**(1) (1995) 73–102.
- [6] P. FREITAS. Precise bounds and asymptotics for the first Dirichlet eigenvalue of triangles and rhombi . *J. Funct. Anal.* **251** (2007) 376–398.
- [7] D. MARTIN. Mélina, bibliothèque de calculs éléments finis. <http://anum-maths.univ-rennes1.fr/melina> (2010).