

Fonctions de Wannier et interpolation de valeurs propres

Antoine Levitt, Inria Paris & ENPC

Les fonctions de Wannier permettent une représentation localisée des fonctions propres d'opérateurs de Schrödinger périodiques. Elles sont utilisées comme outil d'interprétation des liaisons chimiques dans les solides, et comme outil numérique pour l'interpolation de diagrammes de bandes. Dans cet exposé, je décrirai cet outil sous un angle plus abstrait: étant donnée une matrice $H(k)$ dépendant de paramètres k vivant sur un tore, comment interpoler efficacement quelques valeurs propres de $H(k)$? Je présenterai des travaux récents visant à fournir des méthodes systématiques de construction de telles interpolations, ainsi que l'extension de ces concepts au cas de valeurs propres non-isolées, un cas important en pratique pour l'étude des métaux. Travaux en commun avec E. Cancès, H. Cornean, A. Damle, D. Gontier, L. Lin, D. Monaco, G. Panati, S. Siraj-Dine, G. Stoltz.