

Mémoire

présenté en vue de l'obtention de

L'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Université Paul Sabatier, Toulouse 3

Spécialité: Mathématiques Appliquées

par

Florian MÉHATS

Étude mathématique et analyse asymptotique de modèles quantiques : transport, confinement et collisions.

Soutenue le 23 novembre 2004 devant le jury composé de

MM. Naoufel Ben Abdallah
Yann Brenier
François Castella
Walter Craig (absent)
Pierre Degond
Jean Dolbeault
François Golse
Guy Métivier
Jean-Pierre Raymond

Mes premiers remerciements vont à Naoufel Ben Abdallah. Il m'a beaucoup appris et soutenu. Au delà de son énergie et du foisonnement d'idées dont il me fait profiter, j'apprécie tout particulièrement le caractère humain de son travail au quotidien. Je tiens à lui exprimer toute ma gratitude et mon amitié.

Pour son aide précieuse et pour le dynamisme qu'il insuffle à l'équipe "transport" du labo, je remercie Pierre Degond, avec qui j'ai beaucoup de plaisir à travailler et dont j'admire la profondeur de jugement.

Walter Craig, François Golse et Guy Métivier ont accepté de se pencher sur mes travaux en tant que rapporteurs. J'en suis très honoré.

Pour avoir accepté d'être membres de mon jury d'habilitation, je remercie vivement Yann Brenier, François Castella, Jean Dolbeault et Jean-Pierre Raymond.

Je tiens à exprimer mon amitié à Jean-Michel Roquejoffre, qui n'est jamais avare de son temps pour répondre à mes questions et me conseiller.

Je salue aussi mes coauteurs Rada Bombosi, Jean-Pierre Bourgade, Samy Gallego, Olivier Pinaud, Géraldine Quinio, Christian Ringhofer, Christian Schmeiser et Nicolas Vauchelet. Je remercie Patrick Gérard pour ses conseils et plusieurs discussions très enrichissantes.

Ces dernières années, j'ai eu la grande chance de bénéficier de l'environnement du laboratoire MIP, dont la politique est vraiment de faciliter le travail des jeunes enseignants et chercheurs. Je salue tous mes collègues et amis qui contribuent à l'ambiance sympathique qui y règne. Tout particulièrement, je pense à Xavier Antoine, Christophe Besse, Komla Domelevo, Philippe Laurençot, Mohammed Lemou, Luc Mieussens, Alain Rigal, Marie-Hélène Vignal, ainsi qu'à Christine Marty, dont je loue la bonne humeur et l'efficacité.

Par-dessus tout, merci à toi, Béatrice, pour ta présence à mes côtés, et à mes petites princesses Maude, Pauline et Alix.

Table des matières

Introduction	3
Première Partie	
Transport quantique partiellement confiné	5
1 Une hiérarchie de modèles pour les gaz d'électrons bidimensionnels [1, 2]	6
1.1 Le modèle de transport à densité de surface	7
1.2 Deux modèles intermédiaires	10
1.3 Analyse asymptotique d'erreurs	12
2 Réduction de dimensionnalité pour l'équation de Schrödinger non linéaire [3]	14
3 Système de Schrödinger-Poisson en domaine ouvert [4]	17
Deuxième partie	
Modèles diffusifs quantiques	19
4 Le modèle de dérive-diffusion quantique [5, 6]	20
4.1 Équilibres locaux et opérateur de collision	20
4.2 Limite de diffusion et établissement du modèle QDD	22
4.3 Propriétés formelles du modèle QDD	24
5 Discrétisation(s) et simulations numériques [7, 8]	25
5.1 Un système semi-discrétisé en temps	26
5.2 Schéma numérique et illustrations	28
6 Autres modèles diffusifs quantiques [5, 9]	30

Troisième partie	
Modélisation hybride quantique et classique	33
7 Dérivation de modèles de sous-bandes [10]	35
8 Le système Vlasov-Schrödinger-Poisson	39
8.1 Solutions faibles sur un domaine borné [11]	39
8.2 Solutions classiques dans tout l'espace [12]	41
9 Systèmes de Schrödinger-Poisson quasistatiques	42
10 Transport diffusif partiellement quantifié [14, 13, 15]	44
Liste de Publications	49
Bibliographie	51

Introduction

Les travaux présentés dans ce mémoire de synthèse concernent la modélisation mathématique du transport quantique dans les nanostructures. S'il est un domaine d'activité dont le développement a été intrinsèquement lié avec la possibilité de décrire la matière selon les lois de la mécanique quantique, c'est bien celui des composants électroniques et des semiconducteurs. Cependant, à partir du moment où, dans les années cinquante, la phénoménologie de composants de base tels que le transistor a été comprise, on a pu se satisfaire d'une description purement classique, occultant durant plusieurs décennies la mécanique quantique sous-jacente. Des modèles comme le système de dérive-diffusion, les modèles hydrodynamiques ou encore l'équation de Boltzmann, sont restés très précis pour l'électronique à l'échelle du micron. Or, pour faire face aux besoins grandissants des technologies de l'information et de la communication en terme de hauts débits et faibles consommations, les composants électroniques doivent subir une miniaturisation à des échelles nanométriques. À ces échelles, les effets ondulatoires ne peuvent plus être négligés et la mécanique quantique peut même parfois déterminer le mode de fonctionnement du composant [Bas, Dav, FG, VW]. Dans ce contexte, il faut donc revenir à une description quantique du transport de charges.

Une première voie consiste en une modélisation balistique à l'aide de l'équation de Schrödinger (ou de l'équation de von Neumann) couplée à l'équation de Poisson. Il s'agit d'un modèle de type champ moyen (aussi appelé équation de Hartree) qui peut être obtenu comme une limite de l'équation de Schrödinger linéaire à N corps avec interaction Coulombienne [BEGMY, BGM, EY, Ge2]. L'utilisation d'un tel modèle complètement quantique a fait l'objet d'intenses recherches ces dernières années (voir par exemple [Dat, Fis, Fre, KKFR, MVL, BAP1, DEA]) mais rencontre actuellement deux principales difficultés. Les systèmes mis en jeu dans des conditions physiquement réalistes sont très coûteux numériquement et la prise en compte dans ce type de modèles des collisions que subissent les charges durant leur transport est une question extrêmement ardue et cantonne pour l'instant leur utilisation au transport balistique.

Une stratégie radicalement opposée, aussi très populaire, consiste à incorporer des termes correctifs "quantiques" dans les modèles de type classique qui sont bien

maîtrisés. On trouve dans cette catégorie, en premier lieu, le modèle de *density-gradient* (ou dérive-diffusion quantique) [Anc, AI, BAU, Jü, JP, Pu, PuU], puis des modèles plus élaborés comme l'hydrodynamique quantique [Gar, GR1, GR2, GJ, GM, GMR, ZF]. Ces modèles exploitent une analogie entre l'équation de Schrödinger et le système d'Euler sans pression. Si l'on écrit le système satisfait par l'amplitude et la phase d'une fonction d'onde vérifiant l'équation de Schrödinger, on obtient le système d'Euler sans pression corrigé d'un terme qui prend la forme d'une dérivée seconde d'une fonction non linéaire de la densité, appelé potentiel de Bohm. Les modèles cités précédemment sont obtenus en ajoutant phénoménologiquement ce potentiel de Bohm aux modèles classiques correspondants. Ils prennent en compte empiriquement les collisions mais leur assise n'est pour l'instant pas claire.

Enfin, pour compléter ce rapide panorama des modèles de transport quantique, on peut citer l'équation de Wigner collisionnelle (dite aussi équation de Boltzmann quantique ou de Fokker-Planck quantique, selon les cas) [Fre, ALMS, AS, FMR]. Cette équation exploite l'analogie entre l'équation de Vlasov et l'équation de Wigner, en ajoutant un terme de collision ad-hoc à cette dernière. Cette analogie a des limites car la fonction de Wigner n'est pas une fonction de distribution et cette approche rencontre des difficultés au niveau des simulations numériques. En particulier, les calculs peuvent mener à des densités négatives.

Ce mémoire de synthèse regroupe donc des travaux de recherche effectués dans cette thématique du transport quantique et s'articule en trois parties. La première a trait au système de Schrödinger-Poisson et à des modèles structurellement similaires, dans différents contextes physiques mettant en jeu le transport de particules partiellement confinées. Dans cette série de travaux, nous avons recherché des modèles précis et peu coûteux numériquement, puis nous les avons analysé mathématiquement. La deuxième partie de ce mémoire contient des travaux qui se réfèrent plutôt à la deuxième approche décrite ci-dessus, consistant à faire évoluer les modèles classiques vers la mécanique quantique. Des modèles macroscopiques quantiques sont établis et étudiés, apparaissant comme des alternatives intéressantes aux modèles avec corrections quantiques qui sont actuellement utilisés. Enfin, la troisième partie présente une stratégie hybride : le couplage directionnel de modèles quantiques et de modèles classiques, qui permet de tirer parti des avantages de chacune des descriptions. Ceci correspond à des situations où certaines directions spatiales peuvent être encore traitées classiquement, par des modèles cinétiques ou fluides, tandis que dans les autres directions l'énergie est quantifiée et une équation de Schrödinger (stationnaire) doit être employée. Une hiérarchie de modèles pour le transport de particules partiellement quantifiés est ainsi dérivée et analysée.

Première Partie

Transport quantique partiellement confiné

Dans la plupart des dispositifs électroniques à l'échelle nanométrique, les différentes directions d'espace ne jouent pas des rôles identiques. Le transport des charges s'effectue dans des directions privilégiées, par exemple dans le canal d'un transistor MOS, tandis que le gaz que forment les particules est confiné dans la (ou les) autre(s) direction(s). On s'intéresse ici au cas fréquent où les dimensions caractéristiques du confinement sont très petites devant celles du transport. Le choix de modèles tridimensionnels n'est pas réellement adapté dans de telles situations, car conduit à des modèles surdimensionnés et trop coûteux. Il est souhaitable de tirer parti de cette dissymétrie des directions spatiales afin de mettre au point des modèles à dimensionnalité réduite, en diminuant ainsi la complexité numérique des systèmes à résoudre.

La section 1 aborde ce problème à l'aide d'une asymptotique "fort confinement partiel" appliquée au système de Schrödinger-Poisson 3D. Une hiérarchie de modèles est obtenue à partir de ce système, puis analysée, avec une attention particulière accordée à évaluer les ordres de grandeur des approximations faites. Dans la section 2, cette méthodologie est déclinée dans un autre contexte : celui des condensats de Bose-Einstein. Le modèle de Gross-Pitaevskii, qui n'est autre qu'une équation de Schrödinger non linéaire cubique, est souvent admis pour décrire la dynamique des atomes ultra froids. On s'attache ici à décrire des condensats fortement anisotropes, dont certaines dimensions sont plus petites que les autres.

Enfin, la troisième section de cette première partie concerne aussi un problème de modélisation du transport de charges partiellement confinées, mais dans une optique différente. Il s'agit d'écrire et d'étudier des conditions aux limites pour le système de Schrödinger-Poisson en domaine borné, permettant de modéliser l'injection de charges depuis l'extérieur à travers une partie de la frontière.

1 Une hiérarchie de modèles pour les gaz d'électrons bidimensionnels [1, 2]

Cette section effectue la synthèse des travaux [1] et [2]. Elle est consacrée à l'étude d'un problème de perturbation singulière pour le système de Schrödinger-Poisson en dimension 3, modélisant un gaz d'électrons extrêmement confiné selon une direction particulière. La variable spatiale s'écrit $(x, z) \in \mathbb{R}^3$, où $z \in \mathbb{R}$ correspond à la direction du confinement et où l'on regroupe dans $x \in \mathbb{R}^2$ les deux variables selon lesquelles s'effectue le transport. On considère le système suivant :

$$i\partial_t \psi^{3\text{D}} = -\frac{1}{2} \Delta_{x,z} \psi^{3\text{D}} + (V_c^\varepsilon + V^{3\text{D}}) \psi^{3\text{D}}, \quad (1.1)$$

$$V^{3\text{D}} = \frac{1}{4\pi r} * (|\psi^{3\text{D}}|^2), \quad (1.2)$$

dans lequel on a noté $r = \sqrt{|x|^2 + z^2}$. La donnée initiale $\psi_0^{3\text{D}} = \psi^{3\text{D}}|_{t=0}$ est précisée plus loin. L'inconnue de ce système est le couple $(\psi^{3\text{D}}, V^{3\text{D}})$, composé de la fonction d'onde des électrons et du potentiel autoconsistant d'interaction Coulombienne. L'asymptotique "fort confinement partiel" consiste à écrire le potentiel extérieur V_c^ε , qui ne dépend que de la variable z , de la manière suivante :

$$V_c^\varepsilon(z) = \frac{1}{\varepsilon^2} V_c\left(\frac{z}{\varepsilon}\right),$$

après avoir introduit un petit paramètre sans dimension ε ainsi qu'un profil de potentiel positif $V_c(z)$ (indépendant de ε) tel que $V_c(z) \rightarrow +\infty$ lorsque $|z| \rightarrow +\infty$. Ce paramètre ε caractérise l'ordre de grandeur de l'extension spatiale du gaz d'électrons dans la direction z , comparée aux dimensions caractéristiques dans la direction x . Il traduit donc l'anisotropie du gaz.

De manière formelle, il est clair que, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, les électrons vont se concentrer sur le plan $\{z = 0\}$. Dans la prochaine sous-section, nous le montrons rigoureusement et nous exhibons le modèle limite (1.3), (1.4). Souhaitant aller plus loin dans la modélisation des gaz d'électrons bidimensionnels, nous avons aussi étudié deux modèles intermédiaires, qui s'avèrent être de meilleures approximations du modèle initial (1.1), (1.2) pour des données bien préparées. Cette partie du travail est développée dans les sous-sections 1.2 et 1.3.

Pour terminer cette introduction, précisons qu'une version stationnaire de cette asymptotique a été étudiée par O. Pinaud dans [Pd1]. Nous signalons aussi le travail de Froese et Herbst [FH], qui appliquent dans le cas linéaire (sans potentiel autoconsistant) la même asymptotique de confinement (dans le cas d'un potentiel harmonique), afin de décrire le transport quantique contraint sur des surfaces plus générales que le plan (dans la même perspective, on peut aussi citer les travaux formels [dC, Mit]). Enfin, dans un contexte purement classique, l'étude et l'établissement par méthode asymptotique de modèles de transport de particules confinées (et diffusées) le long d'une surface sont faits dans [De3, DPV].

1.1 Le modèle de transport à densité de surface

Le modèle limite associé à (1.1), (1.2), obtenu en faisant tendre ε vers 0, est bidimensionnel et s'écrit ainsi¹ :

$$i\partial_t \phi_p^{2\text{D}} = -\frac{1}{2} \Delta_x \phi_p^{2\text{D}} + W^{2\text{D}} \phi_p^{2\text{D}} \quad (p \in \mathbb{N}^*), \quad (1.3)$$

$$W^{2\text{D}} = \frac{1}{4\pi|x|} *_x n_s^{2\text{D}} \quad ; \quad n_s^{2\text{D}} = \sum_{p \geq 1} |\phi_p^{2\text{D}}|^2. \quad (1.4)$$

Il se compose donc d'une collection d'équations de Schrödinger indexée par $p \in \mathbb{N}^*$, couplée à une équation de champ moyen dont le noyau de convolution est plus singulier que le noyau logarithmique de l'équation de Poisson 2D. Pour comprendre cette équation, il suffit de préciser que, dans ce modèle, la densité des électrons est portée par la mesure de surface sur le plan $\{z = 0\}$. En effet, si l'on introduit la masse de Dirac $\delta(z)$ et si l'on pose

$$n^{2\text{D}}(t, x, z) = n_s^{2\text{D}}(t, x) \delta(z), \quad V^{2\text{D}} = \frac{1}{4\pi r} * n^{2\text{D}},$$

alors on retrouve le potentiel intervenant dans (1.3) en posant $W^{2\text{D}}(t, x) = V^{2\text{D}}(t, x, 0)$. L'équation (1.4) est donc la trace sur le plan $\{z = 0\}$ de l'équation de Poisson avec densité surfacique. Le gaz d'électrons est en fait décrit par un mélange statistique d'états quantiques, chaque état pur vérifiant l'une des équations de Schrödinger bidimensionnelles (1.3). Pour compléter tout à fait le lien entre (1.3), (1.4) et (1.1), (1.2), il faut préciser une donnée de Cauchy pour chacune des équations de Schrödinger 2D et la relier à $\psi_0^{3\text{D}}$.

Auparavant, certaines notations sont à introduire. Soit $A^\varepsilon = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + V_c^\varepsilon$ le Hamiltonien partiel selon la direction z . Le profil de potentiel V_c étant confinant, cet opérateur A^ε est à résolvante compacte (voir par exemple [RS]) et son spectre est simple. Plus précisément, on peut voir que les éléments propres $(E_p^\varepsilon, X_p^\varepsilon)$ de A^ε s'écrivent simplement à l'aide d'un changement d'échelle :

$$E_p^\varepsilon = \frac{E_p}{\varepsilon^2}, \quad X_p^\varepsilon(z) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} X_p\left(\frac{z}{\varepsilon}\right),$$

où l'on désigne par E_p les valeurs propres de $A^1 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + V_c$ et par X_p ses fonctions propres (qui forment une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R})$). La donnée de Cauchy pour (1.1) doit varier à la même échelle z/ε . On suppose donc l'existence d'une fonction $\Psi(x, z)$, indépendante de ε (pour simplifier) et telle que

$$\psi^{3\text{D}}(0, x, z) = \psi_0^{3\text{D}}(x, z) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \Psi\left(x, \frac{z}{\varepsilon}\right). \quad (1.5)$$

1. On note $*_x$ la convolution en la variable x et $|x|$ désigne la norme euclidienne de $x \in \mathbb{R}^2$.

Le modèle limite (1.3), (1.4) peut maintenant être complété. On définit ses données initiales comme les composantes de ψ^{3D} sur cette base $(X_p^\varepsilon)_{p \geq 1}$, en posant²

$$\forall p \in \mathbb{N}^*, \quad \forall x \in \mathbb{R}^2, \quad \phi_p^{2D}(0, x) = \Phi_p(x) := \langle \Psi(x, \cdot) X_p \rangle = \langle \psi_0^{3D}(x, \cdot) X_p^\varepsilon \rangle. \quad (1.6)$$

Avant d'énoncer le résultat de convergence, précisons dans quel sens ces deux problèmes sont bien posés. On suppose que la donnée est dans l'espace d'énergie :

$$\Psi \in H^1(\mathbb{R}^3), \quad \sqrt{V_c} \Psi \in L^2(\mathbb{R}^3).$$

Alors il est possible d'adapter les techniques classiques d'analyse du système de Schrödinger-Poisson [BM, IZL, Arn1] pour démontrer que (1.1), (1.2) admet une unique solution. Par ailleurs, selon une méthode usuelle qui consiste à formuler (1.3), (1.4) comme un système d'évolution non linéaire [Pa], il est facile de prouver que ce système admet aussi une unique solution dans un espace d'énergie. Nous avons le théorème de convergence suivant :

Théorème 1.1 *Soit $T > 0$. Sous les hypothèses ci-dessus, la solution du modèle 3D (1.1), (1.2) converge vers la solution du modèle 2D (1.3), (1.4) dans le sens suivant :*

$$\forall p \in \mathbb{N}^* \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup_{t \in (0, T)} \left\| \langle \psi^{3D} X_p^\varepsilon \rangle - \phi_p^{2D} e^{-it E_p / \varepsilon^2} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 0, \quad (1.7)$$

$$\forall s \in (2, \infty) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup_{t \in (0, T)} \|V^{3D} - V^{2D}\|_{L_x^s L_z^\infty} = 0. \quad (1.8)$$

On voit donc que la composante de la fonction d'onde ψ^{3D} dans le p -ième sous-espace propre de A^ε est asymptotiquement proche de la solution de (1.3), tournée d'un facteur de phase oscillant. Toutefois, ces facteurs de phase n'interviennent pas dans la formulation du modèle limite. Au cours de ce passage à la limite, il se produit donc une perte de cohérence quantique entre les différents sous-espaces propres.

Éléments de Preuve. Cette preuve est faite dans [1] dans le cas particulier où seul l'un des modes est initialement peuplé, c'est-à-dire $\Psi(x, z) = \Phi_p(x) X_p(z)$ pour un certain $p \in \mathbb{N}^*$. Nous améliorons ici ce résultat en traitant le cas général. La première étape de la preuve consiste à estimer la solution du modèle 3D (1.1), (1.2) indépendamment de ε . Pour cela, dans [1] (l'hypothèse d'un seul mode n'y est pas faite pour cette étape d'estimation), nous avons procédé par étapes successives en utilisant notamment les deux ingrédients suivants :

– En remarquant que le potentiel singulier V_c^ε est indépendant de t et x , on peut obtenir des estimations de dispersion de type Strichartz [Caz, GV, Stri, Y] dans les directions $x \in \mathbb{R}^2$ en utilisant un résultat de [Cas] (noter que l'on ne peut espérer ici de résultat de dispersion indépendant de ε dans la direction z du confinement).

². Pour toute fonction $f(x, z)$, on désigne par $\langle f(x, \cdot) \rangle = \int f(x, z) dz$ cette fonction intégrée par rapport à la variable z .

– Comme la densité se concentre sur le plan $\{z = 0\}$, les propriétés de régularisation de l'équation de Poisson sont amoindries. Nous avons développé des résultats de type Hardy-Littlewood-Sobolev spécifiques pour estimer la convolution de $\frac{1}{r}$ avec des densités bornées dans des espaces anisotropes $L_x^p L_z^1$.

Une fois ces estimations *a priori* établies, nous allons voir que le découplage entre les modes s'opère à deux niveaux. Commençons par décomposer la fonction d'onde $\psi^{3\text{D}}$ sur la base $(X_p^\varepsilon)_{p \geq 1}$ en posant

$$\psi^{3\text{D}}(t, x, z) = \sum_p \phi_p^{3\text{D}}(t, x) X_p^\varepsilon(z) e^{-it E_p / \varepsilon^2}.$$

Un calcul simple montre que la p -ième composante $\phi_p^{3\text{D}}(t, x)$ vérifie l'équation

$$i\partial_t \phi_p^{3\text{D}} = -\frac{1}{2} \Delta_x \phi_p^{3\text{D}} + \langle V^{3\text{D}} |X_p^\varepsilon|^2 \rangle \phi_p^{3\text{D}} + \sum_{q \neq p} e^{it(E_p - E_q)/\varepsilon^2} \langle V^{3\text{D}} X_p^\varepsilon X_q^\varepsilon \rangle \phi_q^{3\text{D}}. \quad (1.9)$$

Pour analyser cette équation, il est crucial maintenant de préciser que le potentiel $V^{3\text{D}}$ est régulier par rapport à la variable z , uniformément par rapport à ε . On a donc $|V^{3\text{D}}(\cdot, \cdot, z) - V^{3\text{D}}(\cdot, \cdot, 0)| \leq C|z|$, et en utilisant le fait que $(X_p^\varepsilon)_{p \geq 1}$ est une base orthonormée, on en déduit

$$\|\langle V^{3\text{D}} |X_p^\varepsilon|^2 \rangle - V^{3\text{D}}|_{z=0}\| \leq C \langle |z| |X_p^\varepsilon|^2 \rangle \quad ; \quad \|\langle V^{3\text{D}} X_p^\varepsilon X_q^\varepsilon \rangle\| \leq C \langle |z X_p^\varepsilon X_q^\varepsilon| \rangle$$

lorsque $q \neq p$. Or un changement de variable montre que $\langle |z X_p^\varepsilon X_q^\varepsilon| \rangle = \varepsilon \langle |z X_p X_q| \rangle = C_{pq} \varepsilon$. Sous réserve de vérifier la convergence de la série, on déduit alors de (1.9) que

$$i\partial_t \phi_p^{3\text{D}} = -\frac{1}{2} \Delta_x \phi_p^{3\text{D}} + V^{3\text{D}}|_{z=0} \phi_p^{3\text{D}} + \mathcal{O}(\varepsilon).$$

Un premier découplage s'est donc effectué dans les équations de Schrödinger 2D. Le second s'opère dans l'équation de Poisson. On a

$$V^{3\text{D}} = \frac{1}{4\pi r} * \sum_p |\phi_p^{3\text{D}}|^2 |X_p^\varepsilon|^2 + \frac{1}{4\pi r} * \sum_p \sum_{q \neq p} e^{-it(E_p - E_q)/\varepsilon^2} \phi_p^{3\text{D}} \overline{\phi_q^{3\text{D}}} X_p^\varepsilon X_q^\varepsilon. \quad (1.10)$$

Ici, l'orthogonalité de X_p^ε et X_q^ε pour $p \neq q$ implique que le produit $X_p^\varepsilon X_q^\varepsilon$ est d'ordre ε en topologie faible. L'effet de régularisation dû au noyau de convolution permet d'en déduire que les termes d'interférence apportent au potentiel une contribution petite en topologie forte, qui disparaît à la limite. Le passage du cas particulier traité dans [1] au cas général énoncé ici repose sur des questions de sommabilité de séries. Sachant que dans l'espace d'énergie on a $\sum_p E_p |\phi_p^{3\text{D}}|^2 < \infty$, une hypothèse (que nous ne précisons pas ici) selon laquelle V_c croît suffisamment vite à l'infini implique une décroissance des $\phi_p^{3\text{D}}$ selon p , de telle sorte que les séries rencontrées convergent. \square

Remarque 1.2 Deux idées, pourtant naturelles, n'ont pas été utilisées au cours de cette preuve. Tout d'abord, la conservation de l'énergie ne pouvait pas être utilisée pour les estimations. En effet, à cause du potentiel de confinement, l'énergie totale est à tout instant non bornée par rapport à ε , comme on peut le voir sur son expression :

$$\frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3} |\nabla_{x,z} \psi^{3\text{D}}|^2 dx dz + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3} |\nabla_{x,z} V^{3\text{D}}|^2 dx dz + \frac{1}{\varepsilon^2} \iint_{\mathbb{R}^3} V_c \left(\frac{z}{\varepsilon} \right) |\psi^{3\text{D}}|^2 dx dz .$$

Deuxièmement, nous n'avons pas tiré parti des oscillations rapides en temps. En fait, une analyse sommaire montre que des résonances peuvent *a priori* se produire entre les exponentielles oscillantes de (1.9) et celles de (1.10), *via* le potentiel non linéaire.

1.2 Deux modèles intermédiaires

Plusieurs travaux récents [BAP1, BAP2, VRDL, VPGDL] proposent des méthodes de réduction de dimensionnalité pour l'équation de Schrödinger qui se fondent sur une séparation des variables, dans le but d'écrire des algorithmes numériques performants. Cette stratégie peut s'interpréter comme une "diagonalisation par blocs" de l'équation de Schrödinger, selon des bases bien choisies. Les deux modèles intermédiaires que nous avons étudiés dans [1] et [2] sont issus de ces travaux. Notre objectif était d'analyser mathématiquement ces modèles et de préciser les approximations faites.

Le premier modèle, étudié dans [1], s'introduit naturellement en revenant à la preuve du Théorème 1.1. Nous avons vu qu'après projection sur la base $(X_p^\varepsilon)_{p \geq 1}$ le système 3D s'écrit (1.9), (1.10). Un modèle intermédiaire s'obtient en passant à la limite partiellement dans ces équations : seuls les termes d'interférences sont négligés. Constitué d'équations de Schrödinger 2D couplées à l'équation de Poisson 3D, ce modèle appelé 2.5D prend la forme suivante (pour éviter les confusions, les inconnues sont désignées par ${}^{2.5\text{D}}$) :

$$i\partial_t \phi_p^{2.5\text{D}} = -\frac{1}{2} \Delta_x \phi_p^{2.5\text{D}} + \left(\frac{E_p}{\varepsilon^2} + \langle V^{2.5\text{D}} | X_p^\varepsilon|^2 \rangle \right) \phi_p^{2.5\text{D}} , \quad (1.11)$$

$$V^{2.5\text{D}} = \frac{1}{4\pi r} * \left(\sum_{p \geq 1} |\phi_p^{2.5\text{D}}|^2 |X_p^\varepsilon|^2 \right) . \quad (1.12)$$

Ce système a la même structure que (1.3), (1.4) (il est d'ailleurs muni des mêmes données initiales définies par (1.6)) et il est aisé de démontrer qu'il est bien posé.

Le second modèle intermédiaire, que nous avons étudié dans [2] sous le nom de *modèle de sous-bandes quantiques*, se construit en projetant (1.1) sur une base différente. Introduisons la base des fonctions propres $(\chi_p^{3\text{D}})_{p \geq 1}$ et les valeurs propres $(\epsilon_p^{3\text{D}})_{p \geq 1}$ du Hamiltonien de (1.1), dans lequel on "oublie" le Laplacien en x et on gèle les variables t et x :

$$-\frac{1}{2} \partial_z^2 \chi_p^{3\text{D}} + (V_c^\varepsilon + V^{3\text{D}}) \chi_p^{3\text{D}} = \epsilon_p^{3\text{D}} \chi_p^{3\text{D}} .$$

Bien entendu, à cause du potentiel autoconsistant $V^{3D}(t,x,z)$, les fonctions de base χ_p^{3D} – usuellement appelées *sous-bandes* [AFS, Bas, Dav, FG]– dépendent de t et x de manière paramétrique. Par conséquent, des termes non diagonaux apparaissent lorsque l'on projette (1.1) sur cette base. Si l'on décompose $\psi^{3D} = \sum_{p \geq 1} \widehat{\phi}_p^{3D} \chi_p^{3D}$, alors un calcul simple montre que l'on obtient des équations du type

$$i\partial_t \widehat{\phi}_p^{3D} = -\frac{1}{2} \Delta_x \widehat{\phi}_p^{3D} + \epsilon_p^{3D} \widehat{\phi}_p^{3D} + r_p^\epsilon, \quad (1.13)$$

où l'on a regroupé dans le reste r_p^ϵ des termes parasites faisant intervenir $\partial_t \chi_p^{3D}$, $\nabla_x \chi_p^{3D}$ et $\Delta_x \chi_p^{3D}$. Le modèle de sous-bandes quantiques consiste à négliger ce terme r_p^ϵ (on montrera plus loin qu'il est petit avec ϵ). En réécrivant toutes les équations (les inconnues sont maintenant désignées par SB), on obtient les équations de ce nouveau système non linéaire. Il se compose d'équations de Schrödinger 1D quasistatiques selon la direction z :

$$-\frac{1}{2} \partial_z^2 \chi_p^{SB} + (V_c^\epsilon + V^{SB}) \chi_p^{SB} = \epsilon_p^{SB} \chi_p^{SB} \quad (p \in \mathbb{N}^*). \quad (1.14)$$

et d'équations de Schrödinger 2D découplées entre elles

$$i\partial_t \phi_p^{SB} = -\frac{1}{2} \Delta_x \phi_p^{SB} + \epsilon_p^{SB} \phi_p^{SB} \quad (p \in \mathbb{N}^*). \quad (1.15)$$

Notons que la valeur propre de la p -ième sous-bande agit comme terme de potentiel dans la p -ième équation d'évolution. Enfin, le potentiel autoconsistant, qui intervient dans (1.14), vérifie toujours l'équation de Poisson :

$$V^{SB} = \frac{1}{4\pi r} * \left(\sum_{p \geq 1} |\phi_p^{SB}|^2 |\chi_p^{SB}|^2 \right). \quad (1.16)$$

Les données de Cauchy pour ce modèle sont aussi les fonctions définies par (1.6) $\phi_p^{SB}(t, \cdot) = \Phi_p$. Avant d'étudier les erreurs d'approximations, il faut se demander si ce modèle (1.14), (1.15), (1.16) est bien posé. Dans [2], nous avons répondu positivement à cette question, sous la condition que le paramètre ϵ est suffisamment petit. Expliquons rapidement d'où vient cette restriction en présentant le plan de la preuve d'existence et unicité.

(i) *Résolution locale en temps.* Une façon de résoudre ce système consiste à le réinterpréter comme une équation de Schrödinger 2D vectorielle en écrivant (1.15) sous la forme

$$i\partial_t \phi = -\frac{1}{2} \Delta_x \phi + \mathcal{F}(\phi). \quad (1.17)$$

On a noté $\phi = (\phi_p^{SB})_{p \geq 1}$ et $\mathcal{F}(\cdot) = (\mathcal{F}(\cdot))_{p \geq 1}$ est une fonctionnelle non locale en espace, définie comme suit. Pour tout $\omega = (\omega_p)_{p \geq 1}$, on résout le système quasistatique de Schrödinger-Poisson suivant :

$$\begin{cases} -\frac{1}{2} \partial_z^2 \chi_p + (V_c^\epsilon + V) \chi_p = \epsilon_p \chi_p & (p \in \mathbb{N}^*) \\ V = \frac{1}{4\pi r} * \left(\sum_{p \geq 1} |\omega_p|^2 |\chi_p|^2 \right), \end{cases} \quad (1.18)$$

puis, pour tout p , on pose $\mathcal{F}(\omega)_p = \epsilon_p \omega_p$. On voit immédiatement que (1.17), (1.18) n'est qu'une réécriture du modèle de sous-bandes quantiques. Sous cette forme, on peut aussi se convaincre, grâce aux théorèmes généraux de résolution d'équations (vectorielles) de Schrödinger non linéaires [Pa, Caz], que pour résoudre le système *localement en temps*, il suffit de savoir définir \mathcal{F} comme une fonction localement Lipschitzienne de son argument (les espaces fonctionnels précis sont définis dans [2]). La limitation sur ε provient de cette dernière étape, qui n'est pas aisée, et nous renvoyons à la section 9 où la résolution de ce type de systèmes non linéaires est discutée (voir en particulier la Remarque 9.2).

(ii) *Solutions globales.* Grâce à une estimation provenant de la conservation de l'énergie, on peut prouver que les solutions construites à l'étape (i) sont globales en temps. L'énergie totale, conservée au cours du temps par (1.14), (1.15), (1.16), est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle $\mathcal{E}_{tot} = \mathcal{E}_{kin} + \mathcal{E}_{pot}$, ces deux quantités s'écrivant respectivement

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{kin} &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \sum_{p \geq 1} |\nabla_x \phi_p^{\text{SB}}|^2 dx + \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3} \sum_{p \geq 1} |\phi_p^{\text{SB}}|^2 |\partial_z \chi_p^{\text{SB}}|^2 dx dz, \\ \mathcal{E}_{pot} &= \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^3} |\nabla_{x,z} V^{\text{SB}}|^2 dx dz + \iint_{\mathbb{R}^3} \sum_{p \geq 1} V_c^\varepsilon |\phi_p^{\text{SB}}|^2 |\chi_p^{\text{SB}}|^2 dx dz.\end{aligned}$$

Signalons toutefois qu'une difficulté apparaît ici, comme pour le problème (1.1), (1.2), à cause du terme non borné V_c^ε (voir la Remarque 1.2). Afin d'obtenir des bornes indépendantes de ε (requis pour l'étude asymptotique de la section 1.3), un travail supplémentaire a été nécessaire, que nous ne détaillons pas ici.

1.3 Analyse asymptotique d'erreurs

Au total, nous sommes donc en présence de trois modèles dérivés à partir du modèle de Schrödinger-Poisson 3D : le modèle limite (1.3), (1.4), le modèle 2.5D (1.11), (1.12) et le modèle de sous-bandes quantiques (1.14), (1.15), (1.16). Dans [1] et [2], nous avons estimé les erreurs d'approximation entre ces modèles dans le cas simplifié où *seul un mode est occupé initialement*. Précisément, nous supposons qu'il existe $p \in \mathbb{N}^*$ (fixé) tel que

$$\Phi_p \in H^3(\mathbb{R}^2) \quad ; \quad \forall q \in \mathbb{N}^* \setminus \{p\} \quad \Phi_q \equiv 0.$$

Rappelons que l'on impose $\phi^{\text{3D}}(0, x, z) = \Phi_p(x) X_p^\varepsilon(z)$ et $\phi^\#(0, x) = \Phi_p(x)$, pour $\# \in \{\text{2D}, \text{2.5D}, \text{SB}\}$. Les résultats obtenus sont regroupés dans le théorème suivant :

Théorème 1.3 *Les solutions des systèmes présentés dans cette Section 1 sont telles que, pour tout $s \in (2, \infty)$ et $T > 0$,*

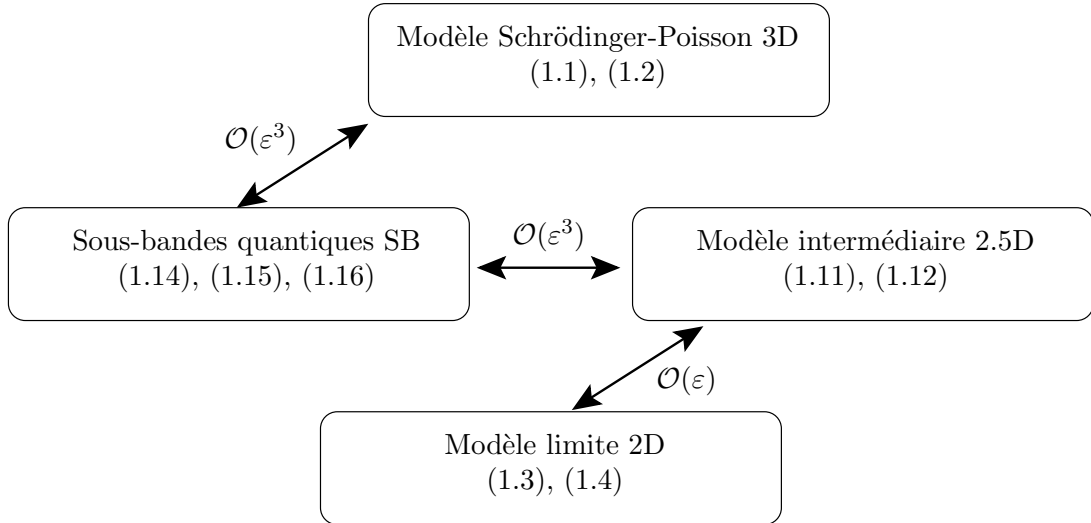
$$\sup_{t \in [0, T]} \left(\|\psi^{\text{3D}} - \phi_p^{\text{SB}} \chi_p^{\text{SB}}\|_{L_{x,z}^2} + \|V^{\text{3D}} - V^{\text{SB}}\|_{L_x^s L_z^\infty} \right) = \mathcal{O}(\varepsilon^3), \quad (1.19)$$

$$\sup_{t \in [0, T]} \left(\|\psi^{3\text{D}} - \phi_p^{2.5\text{D}} X_p^\varepsilon\|_{L_{x,z}^2} + \|V^{3\text{D}} - V^{2.5\text{D}}\|_{L_x^s L_z^\infty} \right) = \mathcal{O}(\varepsilon^3), \quad (1.20)$$

$$\sup_{t \in [0, T]} \left(\|\psi^{3\text{D}} - \phi_p^{2\text{D}} X_p^\varepsilon e^{-it E_p / \varepsilon^2}\|_{L_{x,z}^2} + \|V^{3\text{D}} - V^{2\text{D}}\|_{L_x^s L_z^\infty} \right) = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (1.21)$$

Remarque 1.4 Grâce à une borne par en dessous de l'erreur, nous avons par ailleurs démontré que l'estimation (1.21) ne peut être améliorée : l'erreur commise en prenant le modèle limite est exactement d'ordre ε . Les deux modèles intermédiaires (^{SB} et ^{2.5D}) sont donc des approximations plus précises du modèle initial. Ce fait a été corroboré par les expérimentations numériques réalisées par E. Polizzi [Poli]. Signalons que ces deux modèles présentent plusieurs autres caractères intéressants : ils font intervenir des équations de Schrödinger 2D, moins coûteuses numériquement que (1.1) et, par ailleurs, les effets de charge d'espace sont toujours modélisés par une équation de Poisson 3D, moins singulière que l'équation (1.3) du modèle limite.

Éléments de Preuve. Plutôt que de chercher à démontrer directement les estimations (1.19)–(1.21), il est plus astucieux (et équivalent) de regrouper les modèles deux par deux selon le schéma suivant (dans lequel chaque flèche désigne une estimation démontrée) :



Esquissons la preuve des deux flèches $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$. Elle est issue de [2]. Dans le premier travail [1], nous avons uniquement démontré que la différence entre les solutions de (1.1), (1.2) et de (1.11), (1.12) est en $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$, ce qui n'est pas optimal. Le modèle de sous-bandes quantiques introduit dans [2] apparaît donc comme un outil mathématique permettant d'améliorer cette estimation.

Il s'agit ici d'estimer les différences entre des systèmes non linéaires qui ont une structure similaire. Comme souvent pour les problèmes faiblement non linéaires, on compare d'abord les dynamiques linéaires à partir des équations de Schrödinger, puis on termine le travail en bouclant grâce à l'équation de Poisson et un lemme de Gronwall. Par souci de concision, nous ne détaillons pas cette deuxième étape

de “passage au non linéaire” et nous nous concentrons sur la partie “linéaire”, plus spécifique.

Comparaison du modèle de sous-bandes quantiques avec le modèle 2.5D. Les bornes obtenues précédemment permettent de démontrer que le potentiel V^{SB} est Lipschitzien par rapport à la variable z (uniformément en ε). Ceci autorise à prouver, par une analyse perturbative des éléments propres de (1.14), que l’on a les estimations cruciales suivantes

$$\left\| \chi_p^{\text{SB}} - X_p^\varepsilon \right\|_{L_t^\infty L_x^\infty L_z^2} + \left\| \epsilon_p^{\text{SB}} - \frac{E_p}{\varepsilon^2} - \langle V^{\text{SB}} | X_p^\varepsilon|^2 \rangle \right\|_{L_t^\infty L_x^\infty} \leq C \varepsilon^3 \quad (1.22)$$

(pour le voir formellement, on peut effectuer un changement d’échelle et réécrire (1.14) à l’échelle du confinement z/ε). En particulier, il en découle que les dynamiques induites par (1.15) et (1.11) ne diffèrent que d’un facteur en $\mathcal{O}(\varepsilon^3) + \mathcal{O}(V^{\text{SB}} - V^{2.5\text{D}})$.

Comparaison du modèle 3D avec le modèle de sous-bandes quantiques. C’est ici qu’intervient l’hypothèse de régularité $\phi_{p,0} \in H^3$. Elle permet de démontrer que les fonctions $\partial_t V^{\text{SB}}$, $\nabla_x V^{\text{SB}}$ et $\Delta_x V^{\text{SB}}$ sont Lipschitziennes par rapport à z (avec des constantes indépendantes de ε), puis, en poursuivant l’analyse perturbative de (1.14), on montre que

$$\left\| \partial_t \chi_p^{\text{SB}} \right\| + \left\| \nabla_x \chi_p^{\text{SB}} \right\| + \left\| \Delta_x \chi_p^{\text{SB}} \right\| \leq C \varepsilon^3.$$

En projetant (1.1) sur χ_p^{SB} , on obtient alors une équation similaire à (1.13), dans laquelle le reste \tilde{r}_p^ε est d’ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^3) + \mathcal{O}(V^{3\text{D}} - V^{\text{SB}})$. On en déduit que $\langle \psi^{3\text{D}} | \chi_p^{\text{SB}} \rangle - \phi_p^{\text{SB}}$ est du même ordre. Le point-clé de la preuve est que χ_p^{SB} n’oscille pas en temps. En projetant (1.1) sur $\chi_p^{3\text{D}}$, des difficultés seraient apparues, dues aux oscillations rapides en temps de $\chi_p^{3\text{D}}$ et $V^{3\text{D}}$ qui sont générées par les termes d’interférences apparaissant dans (1.10).

2 Réduction de dimensionnalité pour l’équation de Schrödinger non linéaire [3]

L’équation de Schrödinger non linéaire cubique avec potentiel harmonique extérieur modélise l’évolution d’un condensat de Bose-Einstein à basse température. On lui donne alors le nom d’équation de Gross-Pitaevskii [DGPS]. Le potentiel harmonique, dit de piégeage, est parfois créé par l’expérimentateur de manière anisotrope en espace afin de donner des formes particulières au condensat. Dans [3], nous avons décrit un modèle réduit pour les condensats fortement anisotropes. L’outil mathématique utilisé est l’asymptotique à fort confinement partiel, introduite au début de la Section 1.

Cette étude est placée en fait dans un cadre plus général. On travaille en dimension totale $n+d$, sachant que $x \in \mathbb{R}^n$ est la variable dans les directions faiblement confinées

et $z \in \mathbb{R}^d$ est la variable dans les directions fortement confinées. On considère une équation de Schrödinger non linéaire d'ordre $\alpha + 1$ ($\alpha > 0$ est fixé), dans laquelle intervient un paramètre de couplage $\gamma(\varepsilon)$:

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = -\frac{1}{2}\Delta_{x,z}\psi^\varepsilon + \left(\frac{|x|^2}{2} + \frac{|z|^2}{2\varepsilon^4}\right)\psi^\varepsilon + \gamma(\varepsilon)|\psi^\varepsilon|^\alpha \psi^\varepsilon. \quad (2.1)$$

Avant de présenter les résultats de [3], insistons sur le fait que la phénoménologie est ici très différente de celle observée dans le cas du système de Schrödinger-Poisson. En premier lieu, tandis que le potentiel de Poisson était borné dans L^∞ (par effet de régularisation), il est remplacé ici par $|\psi^\varepsilon|^\alpha$, qui est d'ordre $\varepsilon^{-\alpha d/2}$. Pour contrebalancer cela, il faut donc supposer un faible terme de couplage $\gamma(\varepsilon) = \mathcal{O}(\varepsilon^{\alpha d/2})$. Pratiquement, il est judicieux de faire un changement d'échelle dans la direction z et de considérer la nouvelle équation

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = \left(-\frac{1}{2}\Delta_x + \frac{|x|^2}{2}\right)\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\frac{1}{2}\Delta_z + \frac{|z|^2}{2}\right)\psi^\varepsilon + \gamma|\psi^\varepsilon|^\alpha \psi^\varepsilon, \quad (2.2)$$

dans laquelle $\gamma \in \mathbb{R}^*$ est maintenant une constante. La seconde différence avec le cas Schrödinger-Poisson est plus fondamentale. Au cours de la preuve du Théorème 1.1 est apparu le fait suivant : le découplage entre les différents modes a lieu parce que le potentiel électrostatique varie lentement dans la direction z tandis que les fonctions d'ondes varient à l'échelle $1/\varepsilon$. Ici ce n'est plus le cas et toutes ces quantités varient à la même échelle. Des effets de couplage peuvent donc apparaître. Pour le voir, introduisons les éléments propres $(E_p, X_p(z))_{p \geq 1}$ du Hamiltonien partiel $-\frac{1}{2}\Delta_z + \frac{|z|^2}{2}$ et décomposons la solution sur cette base, en écrivant :

$$\psi^\varepsilon(t, x, z) = \sum_{p \geq 1} \phi_p^\varepsilon(t, x) X_p(z) e^{-iE_p t/\varepsilon^2}. \quad (2.3)$$

Si l'on remplace ce développement dans (2.2) (dans le cas $\alpha = 2$), on obtient

$$i\partial_t \phi_p^\varepsilon = \left(-\frac{1}{2}\Delta_x + \frac{|x|^2}{2}\right)\phi_p^\varepsilon + \gamma \sum_{q,r,s} e^{i(E_p - E_q + E_r - E_s)t/\varepsilon^2} \langle X_p X_q X_r X_s \rangle \phi_q^\varepsilon \overline{\phi_r^\varepsilon} \phi_s^\varepsilon.$$

Génériquement, donc, des résonances se produisent entre certains modes à cause de la nonlinéarité. Les équations que l'on s'attend à trouver à la limite seront donc couplées. Un cas fait cependant exception : lorsque seul un mode X_p est occupé initialement. Dans [3], nous avons étudié le cas particulier où seul l'état fondamental X_1 est excité à l'instant initial, en utilisant une méthode d'énergie (le cas général fait l'objet d'un travail en cours). On démontre que, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, on a

$$\psi^\varepsilon(t, x, z) \sim \phi(t, x) X_1(z) e^{-iE_1 t/\varepsilon^2},$$

avec

$$i\partial_t \phi = -\frac{1}{2}\Delta_x \phi + \frac{|x|^2}{2} \phi + \gamma \langle (X_1)^{\alpha+2} \rangle |\phi|^\alpha \phi. \quad (2.4)$$

Théorème 2.1 *Si la donnée initiale pour (2.2) s'écrit $\phi^\varepsilon(0, x, z) = \phi_0(x) X_1(z)$ avec $\phi_0 \in H^1(\mathbb{R}^n)$ et $x \phi_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ et si*

$$\begin{cases} 0 \leq \alpha < \frac{4}{n+d-2} & \text{dans le cas défocalisant } \gamma > 0 \\ 0 \leq \alpha < \min\left(\frac{4}{n+d-2}, \frac{4}{n}\right) & \text{dans le cas focalisant } \gamma < 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

alors, (sous la condition supplémentaire $\alpha < \frac{2}{n-2}$ si $n \geq 3$) pour tout $T < \infty$ il existe $C_T > 0$ telle que les solutions de (2.2) et (2.4) vérifient

$$\sup_{t \in [0, T]} \left\| \psi^\varepsilon(t) - e^{-iE_1 t/\varepsilon^2} \phi(t) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^{n+d})} < C_T \varepsilon.$$

Éléments de Preuve. L'étape essentielle est une estimation globale en temps basée sur la conservation de l'énergie associée à une inégalité de Gagliardo-Nirenberg anisotrope. Nous n'abordons ici que cet argument. Le reste de la preuve utilise des inégalités de Strichartz pour l'équation de Schrödinger avec potentiel harmonique [Car, Caz, Oh].

En combinant les équations de conservation de la masse et de l'énergie pour (2.2), et en utilisant la décomposition (2.3), on obtient

$$\|\nabla_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^{n+d})}^2 + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{E_p - E_1}{\varepsilon^2} \|\phi_p^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 + 2\gamma \|\psi^\varepsilon(t)\|_{L^{\alpha+2}(\mathbb{R}^{n+d})}^{\alpha+2} \leq C_0. \quad (2.6)$$

Dans le cas défocalisant $\gamma > 0$, on déduit de (2.6), d'une part, une estimation de $\nabla_x \psi^\varepsilon$ et, d'autre part, le fait que $\sum_{p \geq 2} \|\phi_p^\varepsilon\|^2 < C_0 \varepsilon^2 / (E_2 - E_1)$, ce qui montre que la fonction d'onde ψ^ε reste concentrée sur le mode fondamental X_1 .

Dans le cas focalisant, une étape supplémentaire est nécessaire afin de borner le terme provenant de la nonlinéarité. Pour cela, on réutilise l'équation de conservation de l'énergie (multipliée par ε^2), qui donne

$$\|\nabla_z \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + \varepsilon^2 \|\nabla_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C - 2\gamma \varepsilon^2 \|\psi^\varepsilon(t)\|_{L^{\alpha+2}}^{\alpha+2}. \quad (2.7)$$

À l'aide de l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg anisotrope dans $\mathbb{R}_x^n \times \mathbb{R}_z^d$ suivante :

$$\|\psi^\varepsilon\|_{L^{\alpha+2}} \leq C \|\psi^\varepsilon\|_{L^2}^{1-(n+d)(\frac{1}{2}-\frac{1}{\alpha+2})} \|\nabla_x \psi^\varepsilon\|_{L^2}^{n(\frac{1}{2}-\frac{1}{\alpha+2})} \|\nabla_z \psi^\varepsilon\|_{L^2}^{d(\frac{1}{2}-\frac{1}{\alpha+2})},$$

de l'équation de conservation de la masse et d'une inégalité de Young, on déduit de (2.7) (sous la condition (2.5)) que

$$\|\nabla_z \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + \frac{\varepsilon^2}{2} \|\nabla_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C + C \varepsilon^2 \|\nabla_z \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^{\frac{2d\alpha}{4-n\alpha}}.$$

Avec un argument de continuité, pour ε assez petit, on obtient ainsi une borne de $\nabla_z \psi^\varepsilon$ et on peut ensuite procéder comme dans le cas défocalisant avec (2.6). \square

Remarque 2.2 Il est intéressant de noter que dans le cas focalisant, pour ε assez petit, nous avons obtenu une estimation globale en temps pour des exposants $\alpha \in (\frac{4}{n+d}, \frac{4}{n})$, qui sont surcritiques vis-à-vis de l'équation de Schrödinger non linéaire (2.2) en dimension $n + d$. Ainsi, sous cette hypothèse de données bien préparées selon le mode fondamental, la limitation sur l'exposant α est donnée par la dimension n de l'équation limite, et non par la dimension $n + d$ de l'équation initiale. Dans un contexte différent, on peut rapprocher ce type de résultat de ceux obtenus dans [RauSe, IfRau], qui montrent que l'équation de Navier-Stokes posée dans un domaine mince présente de meilleures propriétés que lorsqu'elle est posée dans un domaine quelconque tridimensionnel, grâce à un phénomène de réduction de dimensionnalité.

3 Système de Schrödinger-Poisson en domaine ouvert [4]

Cette section aborde une problématique différente : le transport quantique en domaine ouvert. Nous y présentons brièvement les motivations et les résultats de l'article [4]. Dans la pratique, pour des raisons évidentes de faisabilité des expériences numériques, les modèles doivent être posés en domaines bornés. Dans les dispositifs nanoélectroniques, il est naturel d'identifier une région privilégiée où ont lieu à la fois des phénomènes de transport balistique de charges, d'interférences quantiques et de charge d'espace, appelée zone active. Raisonnablement, le transport d'électrons partiellement confinés dans cette zone active peut être modélisé par le système de Schrödinger-Poisson. Ce système a été étudié par de nombreux auteurs (par exemple [BM, IZL, Arn1, Ni1, Ni2, Ni3]), mais ces travaux portent souvent sur des cas où la zone active est isolée. Or, dans les situations physiques qui intéressent les électroniciens, ce domaine d'étude ne doit pas être considéré comme fermé. La zone active est reliée au monde extérieur par des zones d'accès à travers lesquelles ont lieu des échanges de charges. Des conditions aux limites transparentes doivent alors être écrites à l'interface entre ces zones, de telle sorte que des flux entrants et sortants soient permis. Le caractère non local de l'équation de Schrödinger rend cette tâche plus délicate que pour les modèles cinétiques ou fluides issus de la mécanique classique.

L'étude théorique et numérique de conditions aux limites transparentes pour l'équation de Schrödinger dépendante du temps fait l'objet d'une recherche active depuis plusieurs années [BaPo, Arn2, AE, AB]. L'objectif est en général d'obtenir des conditions aux limites qui absorbent les ondes sortant du domaine d'étude, en limitant au maximum les réflexions artificielles à la frontière, et la présence de sources à l'extérieur n'est pas considérée dans ces travaux. Pour pallier ce manque, nous avons étudié dans [4] la possibilité de prendre en compte la présence de sources extérieures

dans l'écriture de conditions aux limites transparentes, en vue d'une application au contexte de l'électronique. La géométrie est multidimensionnelle, la zone active étant reliée à des guides d'ondes cylindriques qui modélisent les zones d'accès. Dans le travail de Nier [Ni4], un puissant formalisme fonctionnel a été développé pour étudier de tels systèmes quantiques ouverts (avec injection de charges à l'infini), mais la question des conditions aux limites au bord de la zone active n'y est pas traitée.

Dans le cas sans source extérieure, l'idée qui permet d'écrire des conditions transparentes exactes est que la solution de l'équation de Schrödinger dans le domaine extérieur est calculable explicitement *via* l'utilisation d'une transformée de Laplace (voir [BaPo, Arn2]). Il suffit alors d'exprimer la dérivée normale de cette fonction à la frontière pour obtenir une condition de type *Dirichlet-to-Neumann* pour le problème intérieur. Cette condition est non locale en temps, car elle fait intervenir des dérivées temporelles fractionnaires.

Afin de généraliser ces conditions pour prendre en compte des sources extérieures, il faut pouvoir employer une stratégie similaire. L'hypothèse essentielle qui permet un calcul explicite dans le domaine extérieur est que les sources sont stationnaires. La fonction d'onde à l'extérieur est alors décomposable en deux parties : l'une, provenant des sources, est explicitement connue, tandis que l'autre partie provient de la zone active et s'exprime à l'aide de la valeur de la fonction inconnue à la frontière (comme dans le cas sans source). La condition aux limites transparente est alors une condition *Dirichlet-to-Neumann* qui s'écrit comme la somme de ces deux contributions, une partie "sortante" similaire à la condition usuelle et faisant intervenir une dérivée fractionnaire en temps, et une partie "entrante" qui est en fait un terme source dans cette équation. Ces conditions aux limites ont été implémentées dans [Pd2] en dimension 1.

Pour décrire ce terme source, nous nous sommes appuyés sur plusieurs travaux concernant l'établissement de conditions aux limites pour l'équation de Schrödinger stationnaire, toujours dans le but de s'appliquer à l'électronique. Cette méthode dite *quantum transmitting boundary method* a été initialement développée dans [LK] puis étudiée mathématiquement dans [BADM, BA1] (voir aussi [BADGa]). La description d'une source thermodynamiquement à l'équilibre impose de considérer une infinité d'équations de Schrödinger indexées par l'énergie d'injection des particules dans la zone active, qui est un paramètre continu dans le système.

Après avoir écrit les conditions aux limites transparentes sur une partie du bord du domaine d'étude, nous avons montré que le système obtenu est bien posé mathématiquement. La preuve repose sur une estimation d'énergie qui s'appuie à la fois sur le caractère répulsif de l'interaction Coulombienne et sur le caractère dissipatif de l'opérateur *Dirichlet-to-Neumann*.

Deuxième partie

Modèles diffusifs quantiques

Cette deuxième partie présente les travaux [5, 6, 7, 8, 9] qui concernent l'établissement et l'étude de modèles macroscopiques (diffusifs) quantiques. L'industrie des semiconducteurs utilise depuis des années des modèles macroscopiques classiques pour simuler le transport des charges dans les dispositifs. On peut citer une grande variété de modèles, en partant du plus anciennement utilisé, le modèle de dérive-diffusion (introduit par [vR]; voir [Moc, Sel, MRS, Je] pour des présentations mathématiques et numériques), pour aller vers les modèles plus précis que sont les modèles d'*energy-transport*, hydrodynamiques ou SHE (voir [De1, BAD] pour une bibliographie et une discussion des approximations sous-jacentes à ces modèles).

Le besoin de rendre compte d'effets quantiques dans le fonctionnement des dispositifs électroniques amène naturellement à rechercher une manière de faire évoluer ces modèles, pour plusieurs raisons. La plus évidente est bien entendu le souci économique de réutiliser un ensemble d'outils bien maîtrisés ou en développement, sachant que les modèles complètement quantiques sont structurellement différents et demandent une remise à plat des méthodes. Par ailleurs, la prise en compte des collisions dans les modèles quantiques est un sujet très délicat et encore assez incompris, tandis que les modèles macroscopiques sont par essence adaptés aux régimes de transport collisionnels, sans toutefois nécessiter une description très fine des collisions. Ces dernières interviennent en général dans les modèles *via* des grandeurs assez heuristiques (mobilités, coefficients de diffusion), sur lesquelles une grande expérience a été acquise au fil des années. Enfin, les effets quantiques interviennent souvent dans une zone réduite, bien identifiée, du dispositif. Il paraît souhaitable de savoir bien coupler spatialement des modèles quantiques avec des modèles classiques, ce qui sera d'autant plus aisé que ces modèles sont structurellement proches.

Il est bien connu qu'une bonne compréhension d'un modèle macroscopique passe par l'explicitation des liens qui existent entre ce modèle et des modèles microscopiques sous-jacents [CIP, DPR, Go]. En ce qui concerne les modèles diffusifs, l'outil qui permet cette compréhension est l'approximation de la diffusion. Introduite initialement dans des contextes différents (transport neutronique [LaKe, BLP, BSS] ou

transfert radiatif [BGP1]), cette méthodologie (aussi appelée limite hydrodynamique parabolique [Go]) a été appliquée pour la première fois aux semiconducteurs dans [GP, Po1] (voir aussi la présentation [Po2]) pour dériver le modèle de dérive-diffusion, puis a permis la dérivation de modèles plus complexes [BADGe, BAD, De1].

Très récemment, Degond et Ringhofer [DR1] ont développé une stratégie permettant de dériver des modèles hydrodynamiques quantiques à partir d’une description microscopique. Il s’agit d’une extension au contexte quantique de la méthode des moments de Levermore [Le], *via* la définition d’équilibres locaux quantiques minimisant une entropie sous contraintes (voir une description plus précise dans la section 4). Ces concepts nous ont permis de généraliser dans [5], puis dans [9], l’asymptotique de la diffusion dans un formalisme quantique et de dériver plusieurs modèles diffusifs quantiques, qui rendent compte de divers régimes collisionnels. Parmi ceux-ci, le plus simple est le modèle de dérive-diffusion quantique (QDD) dont nous présentons la dérivation dans la section 4. Dans [8], nous nous sommes attachés à discrétiser ce modèle QDD et à le simuler numériquement. Cet article [8] est repris dans la section 5 et représente aussi une première étape vers l’étude mathématique de ce modèle. Enfin, la dernière section 6 résume plus brièvement l’établissement d’autres modèles diffusifs : le modèle d’*energy-transport* quantique et des modèles de type SHE quantiques. Pour finir, on signalera l’article [6], où nous avons effectué une synthèse des travaux [DR1], [DR2], [5] et aussi affiné le modèle de dérive-diffusion quantique (en le reformulant et en précisant certaines propriétés).

4 Le modèle de dérive-diffusion quantique [5, 6]

Cette section reprend la partie de l’article [5] –ainsi que la fin de [6]– qui concerne l’obtention du modèle de dérive-diffusion quantique QDD. Les développements présentés dans ces travaux sont formels ; en particulier, aucun cadre fonctionnel n’est précisé.

4.1 Équilibres locaux et opérateur de collision

En dimension d , on considère un système de particules quantiques (pour simplifier, des électrons) en forte interaction avec leur milieu ambiant, à température T donnée. Au niveau microscopique, les électrons sont décrits par leur matrice densité $\varrho(t)$, qui est un opérateur positif, à trace et Hermitien sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, et satisfait une équation de Liouville quantique (ou de von Neumann) dans laquelle on fait intervenir un opérateur de collisions $\mathcal{Q}[\varrho]$:

$$i\hbar\partial_t\varrho = [\mathcal{H},\varrho] + i\hbar\mathcal{Q}[\varrho]. \quad (4.1)$$

Ici, \mathcal{H} désigne le Hamiltonien du système $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V$, le potentiel V étant supposé connu. Le point-clé de ce travail est le choix d’un opérateur de collision \mathcal{Q} pouvant

modéliser de manière raisonnable les interactions entre les électrons et un bain thermique (dans le cas des semiconducteurs, celui-ci est constitué majoritairement des phonons). Par analogie avec la théorie cinétique, nous allons en fait prescrire les propriétés qualitatives d'un tel opérateur, puis choisir un opérateur simple, de type relaxation, qui les satisfait. En règle générale, afin de garantir un comportement physique acceptable pour le système modélisé, on s'attache à identifier les trois propriétés suivantes d'un opérateur de collision : les quantités conservées, les fonctions d'équilibres et une propriété de dissipation d'entropie.

Précisons ces trois points dans le contexte présent. La spécificité ici vient du fait que les concepts fondamentaux du formalisme quantique sont des opérateurs, et non des fonctions de distribution comme en théorie cinétique. Commençons par définir les invariants collisionnels, c'est-à-dire les moments conservés au cours des collisions. Ici, seule la densité locale $n(t,x)$ est conservée. Rappelons que celle-ci se définit de manière faible par

$$\forall \varphi \in L^\infty(\mathbb{R}^d) \quad \int_{\mathbb{R}^d} n(t,x) \varphi(x) dx = \text{Tr} (\varrho(t) \varphi) \quad (4.2)$$

(dans le second membre, φ désigne implicitement l'opérateur de multiplication par φ). D'autre part, dans le cas d'interactions avec un bain thermique, la quantité dissipée est l'énergie libre (voir par exemple [Bal]) :

$$H_T(\varrho) = \text{Tr} \{ \mathcal{H} \varrho + T (\varrho \ln \varrho - \varrho) \}, \quad (4.3)$$

où $\ln \varrho$ désigne le logarithme de l'opérateur ϱ .

Ayant ainsi énoncé ces deux premières propriétés, une définition naturelle s'en déduit pour les équilibres collisionnels. Cette définition rejoint la notion d'équilibre quantique local, qui a été développée dans [DR1] en généralisant la méthode des moments de Levermore [Le]. L'équilibre quantique local associé à une matrice densité donnée ϱ se définit par un principe de Boltzmann-Gibbs [Bal, LL, Go], comme étant la matrice densité qui minimise l'énergie libre, sous contrainte de densité donnée :

$$\min \{ H_T(\sigma) \quad \text{tel que} \quad \forall \varphi \quad \text{Tr} (\sigma \varphi) = \text{Tr} (\varrho \varphi) \}. \quad (4.4)$$

Notons \mathcal{M}_ϱ l'opérateur qui réalise (4.4) – en supposant qu'il existe et est unique. On peut démontrer que \mathcal{M}_ϱ s'écrit nécessairement sous la forme suivante :

$$\mathcal{M}_\varrho = \exp \left(-\frac{1}{T} \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A \right) \right) \quad (4.5)$$

(exp est l'exponentielle au sens des opérateurs). Dans cette équation, $A(x)$ désigne une fonction réelle, que nous appelons *potentiel chimique quantique* associé à ϱ . Nous renvoyons à [5] et [6] pour ces développements, qui se fondent sur le fait que l'on peut réécrire (4.4) sous la forme d'un problème de point-selle, et aussi sur la différentiabilité de H_T (à ce sujet, voir [DR1, Ni2]). Remarquons que (4.5) est la

forme usuelle d'un équilibre statistique quantique [Bal], avec un Hamiltonien modifié dans lequel A joue le rôle du potentiel.

Posons désormais

$$\mathcal{Q}(\varrho) = \frac{1}{\tau}(\mathcal{M}_\varrho - \varrho), \quad (4.6)$$

où $\tau > 0$ désigne un paramètre de relaxation. On peut démontrer (en utilisant une propriété de convexité, voir [5]) que cet opérateur vérifie les trois principes souhaités. Dans [DR2], d'autres opérateurs ont été écrits sous une forme plus proche de l'opérateur de Boltzmann classique et présentant des propriétés analogues à \mathcal{Q} . En choisissant une forme plus simple, notre démarche ici s'apparente à celle qui consiste en théorie cinétique à remplacer l'opérateur de Boltzmann par un opérateur BGK, et qui donne des résultats raisonnables au niveau macroscopique [Cer, Go]. On peut démontrer formellement qu'avec cet opérateur de collision, l'équation de Liouville quantique (4.1) induit la bonne dynamique :

Proposition 4.1 (Formelle) *Soit ϱ_0 une matrice densité. Alors la solution de (4.1) telle que $\varrho(0) = \varrho_0$ est à tout instant un opérateur Hermitien, positif, à trace, et tel que*

$$\mathrm{Tr} \varrho(t) = \int n(t,x) dx = \mathrm{Tr} \varrho_0 \quad ; \quad \frac{d}{dt} H_T(\varrho(t)) \leq \int n \partial_t V dx,$$

où $n(t,x)$ est définie par (4.2).

Remarquer que lorsque V est indépendant du temps, l'énergie libre est exactement dissipée par le système.

4.2 Limite de diffusion et établissement du modèle QDD

Afin d'étudier l'approximation diffusive de (4.1), il est commode de revenir à une description dans l'espace des phases. L'outil qui le permet est la transformée de Wigner W (voir par exemple [Ge1, GMMP, LiPa, Wig]), qui fait correspondre à chaque opérateur son symbole de Weyl (l'inverse de W , noté W^{-1} , est la transformée de Weyl). Si ϱ désigne le noyau d'un opérateur de Hilbert-Schmidt Hermitien ϱ , sa transformée de Wigner est la fonction réelle de (x,p) définie par

$$W(\varrho)(x,p) = \int_{\mathbb{R}^d} \varrho \left(x - \frac{1}{2}\eta, x + \frac{1}{2}\eta \right) e^{i\eta \cdot p/\hbar} d\eta.$$

En appliquant W à l'équation de Liouville quantique avec opérateur de collision (4.1), et en posant $f(t,x,p) = W(\varrho(t))$, on obtient l'équation de Wigner-BGK. Après avoir introduit un petit paramètre ε , relié au libre parcours moyen, et effectué des changements d'échelle sur l'opérateur de collision et sur la variable temps pour se placer dans l'asymptotique de la diffusion (voir par exemple [GP, Po1]), on peut écrire cette équation ainsi :

$$\varepsilon \partial_t f^\varepsilon + \Lambda f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} (M_{f^\varepsilon} - f^\varepsilon), \quad (4.7)$$

où $\Lambda = p \cdot \nabla - \Theta[V]$ désigne l'opérateur de transport quantique, sachant que $\Theta[V]$ est l'opérateur pseudodifférentiel

$$\Theta[V]f^\varepsilon = \frac{i}{(2\pi)^d} \iint_{\mathbb{R}^{2d}} \frac{V(t, x + \frac{\hbar}{2}\eta) - V(t, x - \frac{\hbar}{2}\eta)}{\hbar} f^\varepsilon(x, p') e^{i(p-p') \cdot \eta} d\eta dp'. \quad (4.8)$$

Pour définir la fonction M_{f^ε} , introduisons une notation. Pour toute fonction $h(x, p)$, on pose $\mathcal{E}xp h = W(\exp(W^{-1}(h)))$ (dans cette expression, $\exp(W^{-1}(h))$ désigne l'exponentielle de l'opérateur $W^{-1}(h)$). Avec cette notation, on déduit par une simple application de la transformée de Wigner à (4.5) que la fonction d'équilibre associée à une fonction de Wigner $f(x, p)$ est la "Maxwellienne quantique" définie par

$$\left\{ \begin{array}{l} M_f = \mathcal{E}xp \left(-\frac{|p|^2}{2T} - \frac{A(x)}{T} \right), \\ \text{où } A(x) \text{ est telle que } \forall x \in \mathbb{R}^d \int_{\mathbb{R}^d} M_f(x, p) dp = \int_{\mathbb{R}^d} f(x, p) dp. \end{array} \right. \quad (4.9)$$

Comme ci-dessus, nous faisons l'hypothèse forte que ce problème (4.9) est bien posé (signalons cependant que dans [8], nous avons résolu un analogue discret de ce problème, sujet que nous ne développons pas dans ce mémoire).

Le modèle de dérive-diffusion quantique (QDD) s'obtient en faisant tendre ε vers 0 dans (4.7). Si l'on suppose que f^ε converge vers une certaine fonction $f(t, x, p)$, alors il est clair d'après (4.7) que f est une Maxwellienne quantique, c'est-à-dire qu'il existe une fonction $A(t, x)$ telle que $f = M_f$, définie par (4.9). Afin d'écrire une équation d'évolution sur A , il convient alors d'effectuer un développement de Chapman-Enskog, en posant $f^\varepsilon = M_{f^\varepsilon} + \varepsilon g^\varepsilon$. À l'aide de (4.7), on obtient formellement que $g^\varepsilon = -\Lambda f^\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon)$, puis il vient par un calcul direct :

$$\partial_t f - \Lambda \Lambda f = \frac{1}{\varepsilon^2} (M_{f^\varepsilon} - f^\varepsilon) - \frac{1}{\varepsilon} \Lambda M_{f^\varepsilon} + \mathcal{O}(\varepsilon).$$

Le point crucial est que, lorsque l'on intègre cette équation par rapport à la variable p , les deux termes singuliers du second membre disparaissent. Cette propriété est évidente pour le premier terme, par construction de M_{f^ε} (voir (4.9)). Pour le second terme, cette annulation est moins claire et provient de propriétés de la transformée de Wigner et de l'exponentielle d'opérateurs, qui entraînent que $\Lambda M_{f^\varepsilon}$ est impaire. En fin de compte, après passage à la limite nous obtenons

$$\partial_t \int \mathcal{E}xp \left(-\frac{|p|^2}{2T} - \frac{A(t, x)}{T} \right) dp - \int \Lambda \Lambda \mathcal{E}xp \left(-\frac{|p|^2}{2T} - \frac{A(t, x)}{T} \right) dp = 0.$$

C'est la forme du modèle QDD que nous avons écrite dans [5]. En fait, par un certain nombre de manipulations qui utilisent l'expression $\Lambda(\cdot) = \frac{i}{\hbar} W[\mathcal{H}, W^{-1}(\cdot)]$ et des propriétés de commutations, on peut simplifier cette équation [6]. Nous résumons

tout ceci dans le théorème suivant :

Théorème 4.2 (Formel) *Lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, la solution f^ε de l'équation de Wigner-BGK converge formellement vers l'exponentielle quantique*

$$f(t,x,p) = \mathcal{E}\text{xp} \left(-\frac{|p|^2}{2T} - \frac{A(t,x)}{T} \right). \quad (4.10)$$

De plus, la densité correspondante $n(t,x) = \int f(t,x,p) dp$ et le potentiel chimique quantique $A(t,x)$ satisfont l'équation suivante :

$$\partial_t n + \text{div} (n \nabla (A - V)) = 0. \quad (4.11)$$

Remarque 4.3 Cette équation (4.11) est très simple, mais une équation plus complexe se cache derrière. Il s'agit de la relation constitutive entre n et A :

$$\forall(t,x) \quad n(t,x) = \int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{E}\text{xp} \left(-\frac{|p|^2}{2T} - \frac{A(t,x)}{T} \right) dp, \quad (4.12)$$

qui est non locale en espace : le caractère quantique du modèle repose sur cette relation. Par ailleurs, en reprenant une à une les étapes de l'établissement de ce modèle, on s'aperçoit que dans le cas où l'équation initiale (4.7) est remplacée par son équivalent classique (l'équation de Vlasov-BGK), on obtient à la limite les mêmes équations (4.11), (4.12), à ceci près que l'exponentielle "quantique" $\mathcal{E}\text{xp}$ est remplacée par l'exponentielle usuelle exp . En conséquence, un calcul direct montre que, dans ce cas, on a $A = -T \ln n$ et (4.11) devient l'équation de dérive-diffusion classique

$$\partial_t n - \text{div} (T \nabla n + n \nabla V) = 0. \quad (4.13)$$

Ceci justifie le nom de dérive-diffusion quantique que nous donnons à ce modèle.

4.3 Propriétés formelles du modèle QDD

Dans ce paragraphe, afin de valoriser ce modèle QDD (4.11), (4.12) dont nous ne savons pas construire une solution, nous en présentons plusieurs propriétés formelles en insistant sur leur intérêt physique.

Caractère entropique. Ce modèle macroscopique étant obtenu comme limite d'un modèle microscopique qui dissipe une énergie libre, il n'est pas étonnant de retrouver une trace de cette propriété. Des calculs directs montrent qu'en effet, en combinant (4.3), (4.10) et la Proposition 4.1, on obtient en passant à la limite une inégalité de dissipation d'entropie (son équivalent discret sera exploité pour étudier le comportement en temps long d'un schéma numérique, voir le paragraphe 5.2) :

$$\frac{d}{dt} \int n (V - A) dx \leq \int n \partial_t V dx. \quad (4.14)$$

Équilibres globaux. L'équation d'advection (4.11) est sous forme conservative. Il est donc naturel d'introduire la densité de courant $j = n \nabla (A - V)$. Le système est à l'équilibre global lorsque ce vecteur est nul en tout point de l'espace, ce qui entraîne (sous l'hypothèse usuelle que du vide ne se crée pas) l'existence d'une constante ϵ_F telles que $A = V - \epsilon_F$. Il découle alors de (4.5) que les états d'équilibre du système sont les équilibres statistiques quantiques au sens habituel [Bal] et ϵ_F peut être interprété comme un quasi-niveau de Fermi.

Asymptotique semiclassique. En appliquant les règles du calcul pseudo-différentiel semiclassique [AG, Hörn, R], et en utilisant le formalisme dit des équations de Bloch, nous avons calculé dans [5] les premiers termes du développement de l'exponentielle quantique $\mathcal{E}xp$ en puissances de \hbar , lorsque ce paramètre devient petit. À l'ordre 0, on retrouve bien l'exponentielle classique exp , ce qui montre avec la Remarque 4.3 que, formellement, la limite semiclassique du modèle QDD est le modèle de dérive-diffusion classique (4.13). De façon plus intéressante, examinons le terme suivant du développement de $\mathcal{E}xp$, qui est d'ordre \hbar^2 . En intégrant ce terme par rapport à la variable p , on obtient avec (4.12) l'expression suivante (à une constante additive près) :

$$A = -T \ln n + \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} + \mathcal{O}(\hbar^4).$$

En injectant cette expression dans (4.11), on obtient le modèle approché suivant, aux termes d'ordre 4 près :

$$\partial_t n - \operatorname{div} \left(T \nabla n + n \nabla \left(V - \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) \right) = 0. \quad (4.15)$$

On retrouve ici en fait un modèle bien connu : il s'agit du modèle de *density-gradient* (souvent aussi appelé "dérive-diffusion quantique") introduit heuristiquement par Ancona et Iafrate [Anc, AI] pour inclure les effets quantiques dans les systèmes classiques, puis étudié par de nombreux auteurs (par exemple [AYDVCV, BAU, Jü, JP, Pu, PuU]). Ces calculs fournissent ainsi, à notre connaissance, la première justification de ce modèle de *density-gradient*.

5 Discrétisation(s) et simulations numériques [7, 8]

Cette section présente les résultats obtenus dans [7, 8], concernant le modèle QDD posé sur un domaine borné. Dans une première étape vers l'étude complète de ce système, nous en avons résolu une version semi-discrète en temps, qui s'avère être équivalente à un problème de minimisation convexe bien posé (voir paragraphe 5.1). Puis nous avons construit un schéma numérique présentant de bonnes propriétés : positivité, dissipation d'entropie, convergence en temps long (voir le paragraphe 5.2), et avons illustré ces résultats par des simulations numériques.

Commençons par réécrire ce système QDD dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (ici $d \leq 3$), en incluant une description des interactions entre électrons par champ moyen. La première équation s'écrit toujours

$$\partial_t n + \operatorname{div} (n \nabla (A - V)) = 0, \quad (5.1)$$

le potentiel V désignant ici la solution de l'équation de Poisson

$$-\alpha \Delta V = n. \quad (5.2)$$

Rappelons que, si l'on pose $\mathcal{H}[A] = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + A + V^{ext}$, la matrice densité du système est de la forme $\varrho = \exp(-\mathcal{H}[A])$ (par un changement d'échelle, on peut s'arranger pour avoir $T = 1$; par ailleurs, pour des raisons techniques, nous avons fait le choix d'inclure un potentiel extérieur dans ce Hamiltonien plutôt que dans (5.1)). Si l'on munit le Hamiltonien $\mathcal{H}[A]$ d'un domaine prenant en compte des conditions aux limites de Dirichlet ou Neumann (cela revient à mettre un mur infini sur la frontière), sa résolvante est compacte et on peut le diagonaliser en base orthonormée. Soit $(\lambda_p[A])_{p \geq 1}$ la suite croissante (au sens large) de valeurs propres de $\mathcal{H}[A]$ et $(\chi_p[A])_{p \geq 1}$ la base de fonction propres associée. Des calculs simples montrent –sans faire appel à la transformée de Wigner, qui n'est pas applicable en domaine borné– que l'équation constitutive (4.12) prend la forme plus simple suivante :

$$n[A] = \sum_{p \geq 1} e^{-\lambda_p[A]} |\chi_p[A]|^2. \quad (5.3)$$

Dans ce système, α et \hbar sont deux paramètres sans dimension qui mesurent respectivement les effets de charge d'espace et le caractère “quantique” du système.

5.1 Un système semi-discrétisé en temps

Faisons le choix des conditions aux limites suivantes sur le bord $\partial\Omega$ du domaine Ω (la normale unitaire sortante est notée $\nu(x)$) :

$$V = 0 \quad ; \quad \nabla_x(A - V) \cdot \nu = 0 \quad ; \quad \nabla_x \chi_p \cdot \nu = 0 \quad (\forall p \geq 1) \quad (5.4)$$

(la condition de Neumann sur les fonctions propres évite les problèmes d'annulation de la densité au bord). Soit $\Delta t > 0$ et $t^k = k \Delta t$ pour $k \in \mathbb{N}^*$. On introduit le système semi-discrétisé implicite suivant, dans lequel les inconnues à l'instant t^k sont notées avec l'exposant k :

$$\frac{n^{k+1} - n^k}{\Delta t} + \operatorname{div} (n^k \nabla (A^{k+1} - V^{k+1})) = 0, \quad (5.5)$$

$$-\alpha \Delta V^{k+1} = n^{k+1}, \quad (5.6)$$

$$n^{k+1} = \sum_p e^{-\lambda_p[A^{k+1}]} |\chi_p[A^{k+1}]|^2. \quad (5.7)$$

Le point-clé ici est que (5.5), (5.6) et (5.7) sont exactement les équations d'Euler-Lagrange d'une fonctionnelle strictement convexe. Soit n^k une fonction continue et strictement positive sur $\bar{\Omega}$. Pour tout $A \in H^1(\Omega)$, $V \in H_0^1(\Omega)$, on pose

$$J(A, V) = \frac{\Delta t}{2} \int n^k |\nabla(A - V)|^2 dx + \frac{\alpha}{2} \int |\nabla V|^2 dx + \text{Tr} (e^{-\mathcal{H}[A]}) + \int n^k (A - V) dx,$$

en rappelant que $\mathcal{H}[A] = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + A + V^{ext}$. D'après le travail de Nier [Ni2], si par exemple le potentiel extérieur V^{ext} est dans $L^\infty(\Omega)$, on sait que la fonctionnelle $F[A] = \text{Tr} (\exp(-\mathcal{H}[A]))$ est convexe, infiniment différentiable, et que sa différentielle première s'écrit, en reprenant la notation (5.3), $d_A F \cdot \delta A = -\int n[A] \delta A dx$. Il en résulte d'une part que J est strictement convexe, et d'autre part que sa différentielle prend la forme :

$$\begin{aligned} d_{A,V} J \cdot (\delta A, \delta V) = & \Delta t \int n^k \nabla(A - V) \cdot \nabla(\delta A - \delta V) dx + \alpha \int \nabla V \cdot \nabla \delta V dx \\ & - \int \sum_p e^{-\lambda_p[A]} |\chi_p[A]|^2 \delta A dx + \int n^k (\delta A - \delta V) dx. \end{aligned}$$

Quelques calculs montrent alors que les points critiques de J satisfont le système (5.5), (5.6), (5.7) avec les conditions aux limites (5.4). En montrant la coercivité de cette fonctionnelle sur $H^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$, nous avons prouvé dans [8] que J admet un unique couple minimiseur, donc que l'on peut passer de manière unique de l'instant t^k à t^{k+1} . Nous avons aussi démontré que ce système semi-discret vérifie la même propriété de dissipation d'entropie que le modèle continu (5.1)–(5.3). Ces résultats sont énoncés dans le

Théorème 5.1 ([8]) *Soit une donnée initiale $n^0 \in C(\bar{\Omega})$ strictement positive. Alors, pour tout $k \in \mathbb{N}$, le système (5.4)–(5.6) admet une unique solution $(n^{k+1}, A^{k+1}, V^{k+1}) \in C(\bar{\Omega}) \times H^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$. De plus, la densité n^k est toujours strictement positive sur Ω , la charge totale $\int n^k dx$ est constante au cours du temps et l'énergie libre S^k définie ci-dessous est une suite décroissante :*

$$S^k = - \int n^k (A^k + 1) dx + \frac{\alpha}{2} \int |\nabla V^k|^2 dx. \quad (5.8)$$

Remarque 5.2 Les états stationnaires de ce système (5.1), (5.2), (5.3) sont déjà connus : ce sont les solutions du système de Schrödinger-Poisson étudiées par Nier dans [Ni1, Ni2]. Pour le voir, il suffit de remarquer que, par la première équation (5.1) (avec les conditions aux limites (5.4)), les fonctions A et V doivent nécessairement coïncider à une constante près : le quasi-niveau de Fermi $\epsilon_F = V - A$. Plus précisément, étant donnée la charge totale $\int n^0 dx > 0$, alors il existe un unique état stationnaire $(n^\infty, A^\infty, V^\infty)$ tel que $\int n^\infty(x) dx = \int n^0 dx$. Introduisons alors l'entropie relative entre la solution de (5.5)–(5.7) et cette solution stationnaire :

$$\Sigma^k = - \int (n^k (A^k - A^\infty) + n^k - n^\infty) dx + \frac{\alpha}{2} \int |\nabla(V^k - V^\infty)|^2. \quad (5.9)$$

Chacune des deux intégrales est positive et la suite Σ^k est décroissante. Ceci tend à montrer que la solution du problème instationnaire (5.5), (5.6), (5.7) converge vers l'unique état d'équilibre. Cette question reste ouverte ici dans le cas présent d'une variable x continue, mais nous l'avons résolue dans le cas complètement discrétisé (voir le paragraphe suivant).

5.2 Schéma numérique et illustrations

En discrétisant la variable d'espace (en dimension 1) dans le système semi-discret (5.5), (5.6), (5.7), nous avons construit un schéma numérique implicite aux différences finies pour le modèle QDD (5.1)–(5.3). Pour cela, il a été nécessaire en particulier d'écrire une version discrète (matricielle) du problème aux valeurs propres $\mathcal{H}[A] \chi_p[A] = \lambda_p[A] \chi_p[A]$. Nous renvoyons à [8] pour tous les détails concernant ce schéma. Toutefois, plusieurs points importants sont à souligner.

1. Nous avons effectué une analyse numérique de ce schéma et démontré les propriétés suivantes :
 - la stricte positivité de la densité est garantie pour tout temps ;
 - la charge totale dans le domaine est conservée ;
 - une énergie libre discrète analogue à (5.8) est décroissante au cours du temps.
2. En utilisant les inégalités fournies par la dissipation de l'énergie libre, nous avons ensuite pu démontrer que la solution numérique converge en temps long vers l'unique solution d'un système de Schrödinger-Poisson stationnaire discrétisé.
3. Comme pour le système semi-discret en temps (5.5)–(5.7), ce schéma numérique est complètement équivalent à la résolution d'un problème de minimisation convexe. Nous nous sommes appuyés sur ce caractère pour l'implémenter, *via* une méthode de Newton qui, de fait, présente de bonnes propriétés de convergence.
4. L'implémentation de ce schéma passe par la résolution de problèmes aux valeurs propres, dont la taille des matrices est la même que la grille spatiale. En réalité, il n'est pas nécessaire de calculer tous les éléments propres (sinon les coûts de calculs seraient prohibitifs) . Ceci peut se voir sur la formule (5.3) : grâce au terme exponentiel, seules les valeurs propres les plus petites ont une contribution significative à la densité. Dans le programme, nous évaluons le nombre de valeurs propres à calculer (grâce à la formule de Weyl), et contrôlons *a posteriori* les approximations faites ainsi.

Illustrons ces propriétés par quelques résultats numériques. On représente le passage d'un flot d'électrons à travers une double barrière créée par une hétérostructure. Sur les Fig. 3.1 et 3.2–gauche sont représentées, à l'instant initial, après 20 itérations

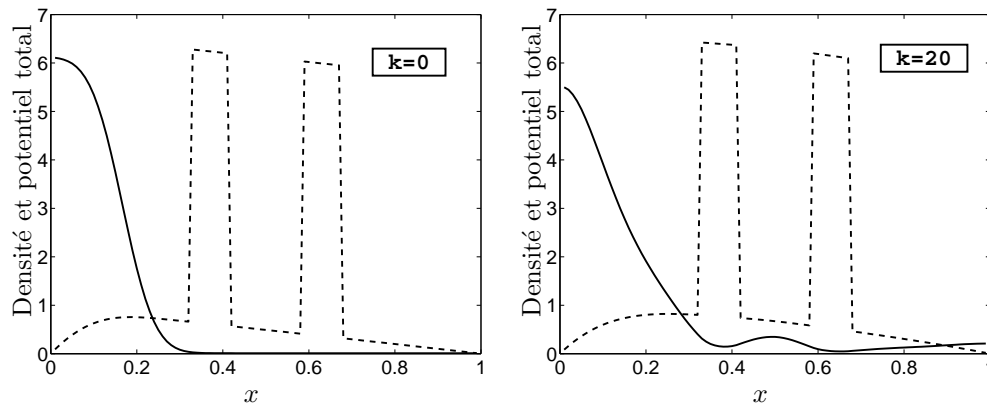


FIG. 3.1 – Densité $n(x)$ (trait plein) et potentiel total $(V + V^{ext})(x)$ (tirets) à l'instant initial et après 20 itérations.

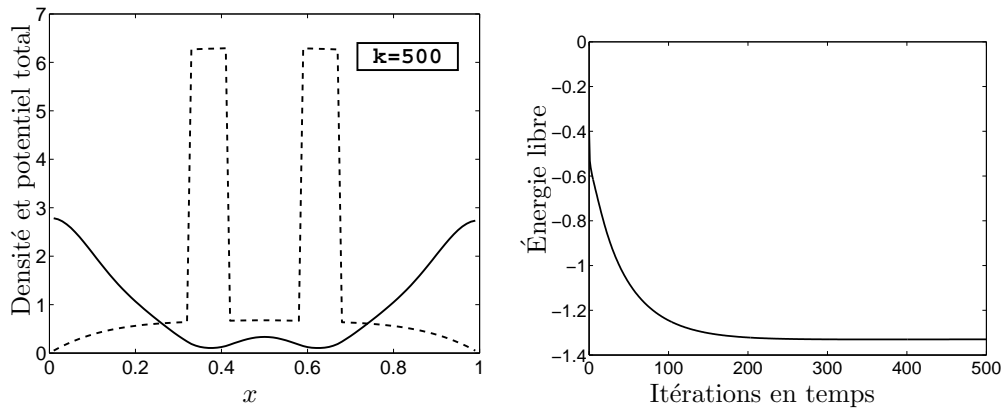


FIG. 3.2 – Gauche : Densité et potentiel total après 500 itérations. Droite : énergie libre S^k en fonction du temps.

et après 500 itérations, les grandeurs suivantes : la densité n et le potentiel total $V + V^{ext}$. Le potentiel extérieur V^{ext} représente la double barrière. Les charges sont initialement entièrement à gauche de la double barrière et, au cours du temps, une partie de la population la traverse pour peupler finalement principalement les zones de plus basse énergie potentielle. La Fig. 3.2–droite représente l'énergie libre qui est bien une fonction décroissante du temps. Après 500 itérations, l'état d'équilibre est atteint, comme le montre par ailleurs le tracé du potentiel électrochimique, c'est-à-dire la fonction $A - V$ qui est devenue constante (voir [8]). On vérifie aussi la parfaite conservation de la charge totale au cours des itérations. Ces résultats numériques sont encourageants et nous travaillons actuellement sur la prise en compte de conditions aux limites permettant l'injection d'un courant dans le dispositif (afin de simuler des situations hors équilibre).

6 Autres modèles diffusifs quantiques [5, 9]

Résumons les étapes qui nous ont permis dans la Section 4 d'établir un modèle QDD présentant de bonnes propriétés physiques :

- identification des quantités conservées au cours des interactions avec le milieu ;
- définition d'une matrice densité d'équilibre local, à partir d'un principe de Boltzmann-Gibbs, satisfaisant un théorème H quantique ;
- passage à une description dans l'espace des phases par transformée de Wigner et approximation de diffusion.

Dans les semiconducteurs, les mécanismes de collision sont multiples (imperfections du cristal, vibrations du réseau, impuretés, collisions entre électrons eux-mêmes, . . .) et les phénomènes de relaxation n'opèrent pas tous à la même échelle temporelle. Classiquement, entre le modèle de dérive-diffusion et l'équation de Boltzmann, on rencontre une grande variété de modèles intermédiaires, construits en hiérarchisant les phénomènes de collisions prépondérants [De1, BAD]. La stratégie décrite ci-dessus permet d'envisager une réécriture de ces modèles intermédiaires dans le formalisme quantique. Cette section présente rapidement deux travaux qui vont dans ce sens. L'étude numérique de ces modèles fera l'objet de futurs travaux, dans la suite de [8].

Le modèle d'*energy-transport* classique est constitué d'un système d'équations de diffusions pour la densité et la température des électrons. Introduit par [Stra], il a depuis été beaucoup utilisé pour les calculs numériques (par ex. [HMM, RVV, SOTG]) et a été dérivé mathématiquement dans [BADGe, BAD] (voir aussi [De1, Jü]) et analysé dans [DGJ1, DGJ2]. Il revient à se placer à une échelle où dominant à la fois les collisions élastiques avec les phonons et les collisions électrons-électrons. Les quantités conservées au cours de ces interactions sont la densité de charge et la densité d'énergie cinétique des électrons. Dans [5], nous avons effectué la dérivation formelle d'un modèle *energy-transport* quantique. Afin de formuler un principe de Gibbs adéquat, comme la température des électrons ne s'ajuste pas avec la température du réseau, l'énergie libre utilisée au paragraphe 4.1 doit être remplacée par l'entropie

$$S(\varrho) = \text{Tr} (\varrho \ln \varrho - \varrho).$$

Pour exprimer localement l'énergie cinétique (comme les autres moments [DR1]), il est plus aisé de se placer dans la description "espace des phases", où une simple intégration par rapport à p joue le rôle d'une formulation faible pour la description "opérateurs". Le principe de minimisation d'entropie s'exprime donc dans la formulation mixte suivante : pour tout $f(x,p)$, on recherche le

$$\min \left\{ S(W^{-1}(g)) \quad \text{tel que} \quad \int g dp = \int_{\mathbb{R}^d} f dp \quad \text{et} \quad \int_{\mathbb{R}^d} |p|^2 g dp = \int_{\mathbb{R}^d} |p|^2 f dp \right\} \quad (6.1)$$

En résolvant ce problème contraint, on voit apparaître deux fonctions-multiplicateurs de Lagrange $A(x)$ et $C(x)$ et, en utilisant la notation $\mathcal{E}\text{xp}$ introduite dans le paragraphe 4.2, la fonction réalisant l'équilibre est définie par

$$\begin{cases} \widetilde{M}_f = \mathcal{E}\text{xp} (A(x) + C |p|^2), & \text{où } A(x) \text{ et } C(x) \text{ sont telles que} \\ \forall x \in \mathbb{R}^d \quad \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{1}{|p|^2} \right) \widetilde{M}_f(x,p) dp = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{1}{|p|^2} \right) f(x,p) dp. \end{cases} \quad (6.2)$$

Si l'on utilise cette Maxwellienne modifiée dans (4.7), l'asymptotique de diffusion produit deux équations conservatives (voir [5, 6]) :

$$\partial_t n + \text{div } J^n = 0, \quad (6.3)$$

$$\partial_t \mathcal{W} + \text{div } J^w + J^n \cdot \nabla_x V = 0, \quad (6.4)$$

où les inconnues sont les densités de charge et d'énergie définies par

$$\begin{pmatrix} n[A,C] \\ 2\mathcal{W}[A,C] \end{pmatrix} = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{1}{|p|^2} \right) \mathcal{E}\text{xp}(A + C|p|^2) dp, \quad (6.5)$$

et les flux de masse et d'énergie s'expriment ainsi :

$$J^n = -\nabla \cdot \Pi - n \nabla V, \quad (6.6)$$

$$J^w = -\nabla \cdot \mathcal{Q} - \mathcal{W} \nabla V - \Pi \nabla V + \frac{\hbar^2}{8} n \nabla_x \Delta_x V, \quad (6.7)$$

sachant que les tenseurs de pression et de flux de chaleur sont des fonctions non locales de n et \mathcal{W} *via* l'inversion (supposée possible) des équations constitutives (6.5) :

$$\begin{pmatrix} \Pi[A,C] \\ 2\mathcal{Q}[A,C] \end{pmatrix} = \int_{\mathbb{R}^d} \begin{pmatrix} p \otimes p \\ |p|^2 p \otimes p \end{pmatrix} \mathcal{E}\text{xp}(A + C|p|^2) dp. \quad (6.8)$$

Le modèle d'*energy-transport* quantique est formé par l'ensemble de ces équations (6.3)–(6.8) (ici encore, on retrouve sa version classique –locale en espace– en remplaçant formellement $\mathcal{E}\text{xp}$ par l'exponentielle usuelle exp). Nous sommes loin de savoir donner un sens mathématique à sa solution, mais il est intéressant de noter que la quantité suivante, que l'on peut interpréter comme l'entropie macroscopique, est formellement une fonction décroissante du temps (lorsque V est constant) :

$$S(n, \mathcal{W}) = \int (A n + 2C \mathcal{W}) dx.$$

Plus proches encore d'une description complètement cinétique, les modèles SHE (pour Spherical Harmonics Expansions) décrivent l'évolution d'une fonction de la position et de l'énergie. Ils ont été utilisés récemment dans le contexte des semiconducteurs [GVBO, Br1, Br2] ; pour une présentation mathématique et leur justification, on

pourra se référer à [BAD, De1, De2] et à la bibliographie incluse. Au niveau microscopique, l'hypothèse est que les mécanismes dominants sont les collisions élastiques avec les phonons. Dans [9], en suivant l'approche que Degond et Ringhofer ont adopté dans [DR2] pour généraliser l'opérateur de Boltzmann, nous avons tout d'abord proposé un opérateur "quantique" de collisions avec les phonons, qui généralise l'opérateur classique [Maj] et qui vérifie un théorème H (dissipation d'entropie quantique). Puis, en considérant que les collisions élastiques sont prépondérantes, nous avons établi un modèle SHE quantique consistant avec la dissipation de l'entropie, en reprenant la stratégie ci-dessus. La forme de ce modèle est cependant très implicite et, pour une utilisation pratique, il nous a semblé préférable d'en calculer des approximations lorsque le transport est quasiment semiclassique (selon la même idée que pour le modèle QDD, vue au paragraphe 4.3).

Troisième partie

Modélisation hybride quantique et classique

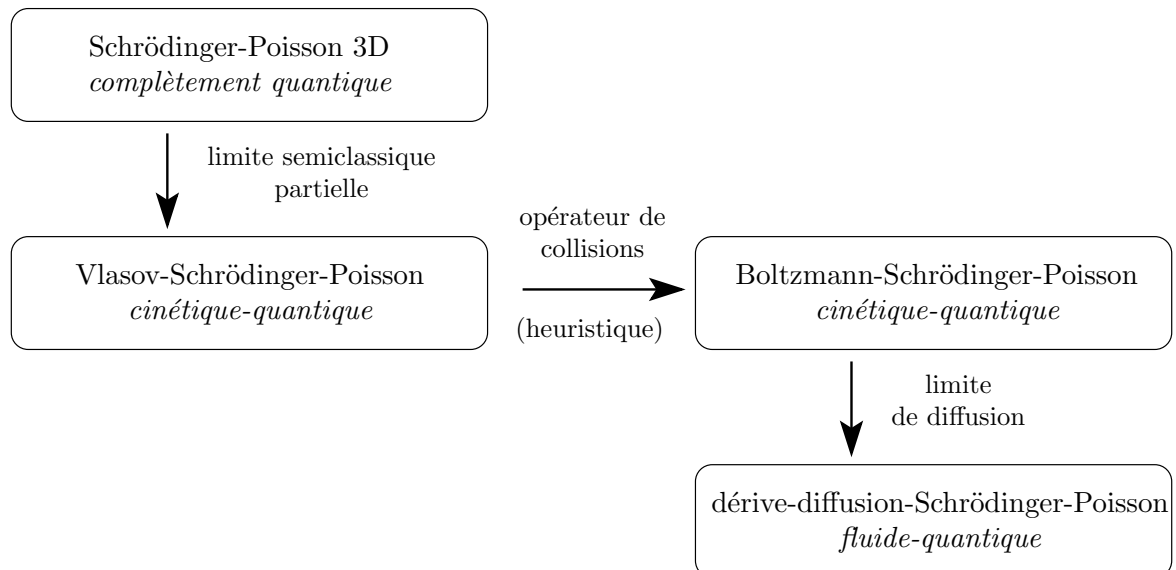
Coupler des modèles de natures différentes est une approche souvent recherchée pour réduire les coûts numériques dans les situations physiques où des phénomènes complexes mettent en jeu plusieurs échelles. Dans le contexte de la nanoélectronique, la modélisation hybride quantique-classique permet de tirer parti des avantages de chacune des descriptions. Les effets ondulatoires et les petites dimensions sont bien décrits dans le formalisme quantique tandis que les modèles classiques permettent d'atteindre les grandes échelles spatiales et de prendre en compte plus facilement les effets collisionnels. Une telle stratégie a ainsi été appliquée par plusieurs auteurs pour le couplage spatial de l'équation de Schrödinger avec des modèles issus de la mécanique classique, qu'il soient cinétiques ou diffusifs [BA2, BADGa, Bie, DEA, EAJ].

Dans cette partie, nous présentons une stratégie de couplage différente : le couplage directionnel. Dans certaines configurations, comme par exemple lorsque le transport des charges se concentre à l'interface entre deux matériaux différents (Silicium-Oxyde pour un transistor MOS ou GaAs-AlGaAs pour un transistor à modulation de dopage), les ordres de grandeurs ne sont pas les mêmes dans toutes les directions. Une modélisation quantique est nécessaire pour décrire les effets de confinement dans la direction transverse au transport (que nous noterons z), tandis que les dimensions caractéristiques dans les autres directions (notées x), dites parallèles, autorisent encore une description classique.

Comme nous le verrons, l'une des conditions pour permettre un tel couplage des descriptions est que le temps ne se déroule pas de la même manière dans les directions transverses et parallèles. Les phénomènes quantiques ont lieu de façon quasistatique par rapport au temps (ainsi que par rapport à la variable x). Cette vision d'un transport classique avec des degrés de liberté quantiques permet un rapprochement avec l'approximation de Born-Oppenheimer utilisée en dynamique moléculaire. Cette idée ancienne [BO], qui a été très étudiée [CDS, HJ, KMSW, ST, T], consiste à effectuer une séparation d'échelle entre les électrons et les noyaux d'une molécule, du fait de leur

grande différence de masses. Les noyaux évoluent dans un potentiel effectif généré par un niveau d'énergie des électrons, tandis que les électrons s'ajustent instantanément dans un état propre du Hamiltonien lié à la configuration des noyaux.

Dans les situations que nous examinons ici, la différence d'échelle entre x et z joue le même rôle qu'une différence de masses. La première section de cette partie présente l'article [10], où nous avons étudié une limite semiclassique partielle dans des cas où le potentiel est une donnée de problème, ce qui permet d'obtenir le prototype de modèle hybride couplé en direction : le modèle de sous-bandes cinétique-quantique. Nous avons ensuite enrichi ce prototype graduellement en prenant en compte des interactions supplémentaires, spécifiques au contexte du transport de particules chargées (remarquons, en particulier, que les effets non-linéaires ne sont pas inclus dans les travaux cités ci-dessus sur l'approximation de Born-Oppenheimer). Tout d'abord, les interactions électrostatiques sont traduites *via* le potentiel autoconsistant de Poisson (ce dernier induit un couplage supplémentaire, non linéaire, entre les directions x et z). Ce modèle Vlasov-Schrödinger-Poisson est étudié dans la Section 8 qui résume les articles [11] et [12]. Ensuite, une description des collisions avec le milieu nous a amené dans [13, 14] à remplacer le modèle mésoscopique dans la direction x par un modèle macroscopique (dérive-diffusion-Schrödinger-Poisson), présenté dans la section 10. Les liens entre les modèles rencontrés dans cette partie sont représentés schématiquement sur le diagramme suivant :



7 Dérivation de modèles de sous-bandes [10]

On considère le transport d'électrons sous l'effet d'un potentiel donné. Les variables longitudinales $x \in \mathbb{R}^2$ sont supposées semiclassiques, tandis que la variable transverse $z \in \mathbb{R}$ reste quantique. En introduisant le paramètre ε mesurant le rapport des ordres de grandeurs spatiaux selon z et selon x , et après un changement d'échelle adéquat (voir la Remarque 7.3), ce système est modélisé par l'équation de Schrödinger linéaire suivante :

$$i\varepsilon\partial_t\psi^\varepsilon = -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta_x\psi^\varepsilon - \frac{1}{2}\partial_z^2\psi^\varepsilon + V^{ext}\psi^\varepsilon. \quad (7.1)$$

Deux types de conditions sont nécessaires pour permettre un découplage adiabatique des directions z et x . Tout d'abord, le potentiel $V^{ext}(t,x,z)$ doit présenter des variations lentes selon les variables t et x . Nous supposons qu'il est suffisamment régulier selon ces variables, uniformément par rapport au paramètre $\varepsilon \in [0,1]$. Pour simplifier, dans ce mémoire, nous supposerons aussi qu'il est indépendant de ε . En second lieu, le système doit être quantifié, dans la direction z , selon des niveaux d'énergie bien séparés. Pour tout (t,x) , le Hamiltonien partiel $-\frac{1}{2}\partial_z^2 + V^{ext}$ doit présenter un spectre discret. Ceci se réalise si les particules sont confinées selon cette direction z . On peut par exemple supposer que ce confinement est réalisé par le potentiel, qui tend vers $+\infty$ lorsque z tend vers $\pm\infty$. Plus simplement, nous supposerons ici, comme dans [10], qu'il est réalisé par un mur infini en $z = 0$ et en $z = 1$. Le domaine spatial est par conséquent $\Omega = \mathbb{R}^2 \times (0,1) \ni (x,z)$ (le cas d'un domaine de largeur variable est aussi traité dans [10]).

Ce cadre de travail étant précisé, introduisons quelques outils. Formellement, à l'ordre 0 en ε , l'équation (7.1) devient une équation de Schrödinger stationnaire dans la direction z . Naturellement, on est donc amené à considérer les sous-espaces propres de ce Hamiltonien partiel, usuellement appelés *sous-bandes* dans la littérature physique [AFS, Bas, Dav, FG] :

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\partial_z^2\chi_p + V^{ext}\chi_p = \epsilon_p\chi_p, \\ \chi_p(t,x,\cdot) \in H_0^1(0,1), \quad \int_0^1 \chi_p\chi_q dz = \delta_{pq}. \end{cases} \quad (7.2)$$

Dépendant de manière paramétrique de t et x , les valeurs propres $(\epsilon_p)_{p \geq 1}$ ne se croisent pas : c'est une conséquence du fait que (7.2) est un problème de Sturm-Liouville en dimension 1. Il en résulte que ces éléments propres héritent de la régularité de V^{ext} dans les variables t et x . Les sous-bandes ont déjà été introduites au paragraphe 1.2 pour étudier le transport quantique d'un gaz fortement confiné, afin de séparer les variables z et x . Rappelons que si l'on décompose ψ^ε sur la base des fonctions propres en écrivant $\psi^\varepsilon = \sum_p \phi_p^\varepsilon \chi_p$, alors on obtient une collection d'équations de la forme (1.13), indexées par le numéro p de la sous-bande considérée,

que nous réécrivons ainsi :

$$i\varepsilon\partial_t\phi_p^\varepsilon = -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta_x\phi_p^\varepsilon + \epsilon_p\phi_p^\varepsilon + \sum_q r_{p,q}^\varepsilon. \quad (7.3)$$

Ces équations sont toutes couplées entre elles par les termes de restes $r_{p,q}^\varepsilon$. Dans le cas du paragraphe 1.2, ces restes étaient négligeables pour un confinement suffisamment fort. Ici, c'est le caractère semiclassique du transport qui va permettre ce découplage.

Le deuxième outil est la transformée de Wigner qui, introduite en 1932 [Wig], a permis dans la dernière décennie d'étudier mathématiquement plusieurs problèmes où intervient une limite semiclassique [Be, BePo, BMP, FeGe, Ge1, GMMP, LiPa, MM, MMP, Mil, PR, ZZM]. Ici, seule la variable x étant semiclassique, on construit une transformée de Wigner partielle. On forme donc la quantité suivante, qui est une matrice densité selon la variable z , paramétrée par t et dans l'espace des phase $(x,v) \in \mathbb{R}^4$:

$$w^\varepsilon(t,x,v,z,z') = (2\pi)^{-2} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\eta \cdot v} \psi^\varepsilon\left(x - \varepsilon\frac{\eta}{2}, z\right) \overline{\psi^\varepsilon}\left(x + \varepsilon\frac{\eta}{2}, z'\right) d\eta. \quad (7.4)$$

Dans [10], le théorème suivant est démontré (énoncé ici de façon imprécise) :

Théorème 7.1 *Lorsque ε tend vers 0, w^ε converge faiblement vers la fonction suivante, à valeurs mesures :*

$$w^0 = \sum_{p \geq 1} f_p(t,x,v) \chi_p(t,x,z) \chi_p(t,x,z'),$$

sachant que les $f_p \geq 0$ vérifient les équations de Vlasov suivantes :

$$\partial_t f_p + v \cdot \nabla_x f_p - \nabla_x \epsilon_p \cdot \nabla_v f_p = 0. \quad (7.5)$$

On retrouve donc le fait que les équations du transport sur les sous-bandes se découpent à la limite. Par ailleurs, la dynamique de chaque équation de Vlasov est régie par le champ de force $-\nabla_x \epsilon_p$, qui est bien calculé à partir d'un niveau d'énergie. Noter qu'une différence notable avec l'asymptotique de confinement étudiée dans la première partie de ce mémoire est qu'ici le découplage adiabatique et la limite semiclassique opèrent en même temps (cette idée est discutée dans [ST, T]). Enfin, le système d'électrons est décrit à la limite par w^0 , qui a la forme d'un mélange d'états quantiques. Les quantités macroscopiques peuvent toutes être calculées à partir de w^0 en prenant des moments par rapport à p et en appliquant des observables pour la variable quantique z . Par exemple, pour la densité, on prend l'intégrale de w^0 selon p et la trace selon z (on pose $z = z'$) :

$$n(t,x,z) = \sum_{p \geq 1} \left(\int_{\mathbb{R}^2} f_p(t,x,v) dv \right) |\chi_p(t,x,z)|^2. \quad (7.6)$$

La densité d'énergie cinétique a une composante selon x et une composante selon z :

$$e_{kin} = \sum_{p \geq 1} \left(\int_{\mathbb{R}^2} \frac{|v|^2}{2} f_p dv \right) |\chi_p|^2 + \sum_{p \geq 1} \left(\int_{\mathbb{R}^2} f_p dv \right) \frac{1}{2} |\partial_z \chi_p|^2. \quad (7.7)$$

Remarque 7.2 En réalité, la structure particulière du Hamiltonien partiel qui agit dans la variable transverse n'a pas une très grande importance. Seul importe le non-croisement de ses valeurs propres. Dans [10], nous avons donc traité un cas, plus général que celui-ci, d'équations de Schrödinger à valeurs dans un espace de Hilbert (qui joue le rôle de $L^2(0,1)_z$ ici). Ceci permet d'envisager une plus large classe d'applications, comme par exemple le transport de spins.

Idée de la Preuve. La fonction w^ε définie par (7.4) se décompose sous la forme $w^\varepsilon = \sum_{p,q} w_{p,q}^\varepsilon$ dans la base $(\chi_p, \chi_q)_{(p,q) \in (\mathbb{N}^*)^2}$. On peut alors borner chaque $w_{p,q}^\varepsilon$ dans des topologies faibles, en utilisant des techniques développées dans [GMMP, LiPa] et sous la condition que la donnée initiale est ε -oscillante dans la direction x et d'énergie transverse bornée :

$$\text{à } t = 0 \text{ on a } \int_{\Omega} (|\psi^\varepsilon|^2 + \varepsilon^2 |\nabla_x \psi^\varepsilon|^2 + |\partial_z \psi^\varepsilon|^2) dx dz \leq C \quad (7.8)$$

(l'équation (7.1) préserve cette propriété aux temps ultérieurs). En projetant l'équation de Wigner satisfaite par w^ε et en utilisant ces bornes, on obtient que chaque $w_{p,q}^\varepsilon$ vérifie

$$(\epsilon_p - \epsilon_q) w_{p,q}^\varepsilon \rightarrow 0 \text{ lorsque } \varepsilon \rightarrow 0.$$

C'est ici que l'on utilise la séparation des valeurs propres, qui implique, pour tous $p \neq q$, que $w_{p,q}^\varepsilon \rightarrow 0$. Ayant ainsi montré que les termes non-diagonaux de la matrice densité w^ε s'annulent à la limite, on examine les équations de Wigner satisfaites par les termes diagonaux $w_{p,p}^\varepsilon$ et on s'aperçoit que les termes de couplage disparaissent à la limite. Il ne reste plus qu'à traiter chaque équation de Wigner de façon isolée, et à démontrer par des techniques usuelles qu'elle converge vers l'équation de Vlasov correspondante. Tout au long de cette preuve, il faut accorder une attention particulière à étudier la sommabilité des séries rencontrées. Ceci est possible grâce à (7.8), qui entraîne

$$\sum_p \int \epsilon_p |\phi_p^\varepsilon|^2 dx \leq C,$$

et, *via* la croissance $\epsilon_p \rightarrow +\infty$ lorsque $p \rightarrow +\infty$, permet de déduire une propriété de compacité par rapport à l'indice de sommation p . \square

Remarque 7.3 (Prise en compte d'un potentiel non linéaire)

Le modèle hybride obtenu à la limite est donc constitué des équations (7.2), (7.5), sachant que la densité n prend la forme (7.6). Dans les sections suivantes, nous prenons en compte *a posteriori* les interactions électrostatiques en posant $-\Delta_{x,z} V = n$ et en

ajoutant ce potentiel supplémentaire V à V^{ext} dans (7.2). C'est le modèle "Vlasov-Schrödinger-Poisson" étudié au paragraphe 8. Il serait plus consistant de considérer ce terme non linéaire dès le début de l'étude. Discutons de la façon de procéder (c'est un travail en cours). Pour cela, revenons au système antérieur à (7.1), dans lequel les variables d'espace, notées X et Z , sont à la même échelle. En tenant compte du potentiel autoconsistant \mathcal{V}^ε , on écrit le système de Schrödinger-Poisson (avec un état pur quantique, bien que l'utilisation de mélanges d'états soit vraisemblablement nécessaire pour des preuves rigoureuses, voir [Be, BMP, LiPa, MM]) :

$$\begin{aligned} i\varepsilon\partial_t\Psi^\varepsilon &= -\frac{\varepsilon^2}{2}\Delta_X\Psi^\varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{2}\partial_Z^2\Psi^\varepsilon + \left(V^{ext}\left(t,X,\frac{Z}{\varepsilon}\right) + \mathcal{V}^\varepsilon\right)\Psi^\varepsilon \\ &\quad -\Delta_X\mathcal{V}^\varepsilon - \partial_Z^2\mathcal{V}^\varepsilon = |\Psi^\varepsilon|^2. \end{aligned}$$

Effectuons le changement de variables $x = X$, $z = Z/\varepsilon$ et introduisons la nouvelle fonction $V^\varepsilon(t,x,z) = \mathcal{V}^\varepsilon(t,X,Z)$. La nouvelle équation de Schrödinger est bien (7.1) avec le potentiel V^ε en plus. Concentrons-nous sur l'équation de Poisson.

Asymptotique à forte densité. Si l'on pose $\psi^\varepsilon(t,x,z) = \varepsilon\Psi^\varepsilon(t,X,Z)$, alors l'équation de Poisson devient $-\varepsilon^2\Delta_x V^\varepsilon - \partial_z^2 V^\varepsilon = |\psi^\varepsilon|^2$ et le potentiel autoconsistant varie *effectivement* à l'échelle z . Notons que, puisque par hypothèse ψ^ε est d'ordre 1 en norme L^2 , cela signifie que $|\Psi|^2$ était d'ordre $\frac{1}{\varepsilon}$ (la densité initiale est donc très grande). Dans ce cas, en passant formellement à la limite, il vient une équation de Poisson selon z seulement : $-\partial_z^2 V = n$, qui n'opère plus à aucune régularisation selon la variable x . Le système complet, qui prend la forme d'équations de Vlasov (7.5) selon x couplées à un système de Schrödinger-Poisson selon z , semble donc très singulier et il n'est pas clair qu'il soit bien posé mathématiquement. De plus, ce modèle utilisé par les physiciens électroniciens dans les simulations numériques ne donne pas des résultats satisfaisants.

Asymptotique à faible densité. Si, au contraire, on pose $\psi^\varepsilon(t,x,z) = \sqrt{\varepsilon}\Psi^\varepsilon(t,X,Z)$, (la densité avant changement d'échelle est maintenant d'ordre 1), l'équation de Poisson s'écrit $-\varepsilon^2\Delta_x V^\varepsilon - \partial_z^2 V^\varepsilon = \varepsilon|\psi^\varepsilon|^2$. Il apparaît donc formellement que V^ε varie lentement selon la variable z . Pour mieux le voir, réécrivons cette équation (sur \mathbb{R}^3) avec son noyau de Green :

$$V^\varepsilon(t,x,z) = \int \frac{1}{4\pi(|x-x'|^2 + \varepsilon^2(z-z')^2)^{1/2}} |\psi^\varepsilon(t,x',z')|^2 dx' dz'. \quad (7.9)$$

Au vu de résultats que nous avons obtenus dans [1], il est raisonnable de penser que cette fonction est asymptotiquement proche de $W^\varepsilon = \frac{1}{4\pi|x|} *_x \int |\psi^\varepsilon|^2 dz$, qui ne dépend plus de z . Les sous-bandes définies par $-\frac{1}{2}\partial_z^2\chi_p + (V^{ext} + W^\varepsilon)\chi_p = \epsilon_p\chi_p$ ne voient plus ce potentiel que comme un décalage uniforme des valeurs propres (les fonctions propres ne dépendent pas de W^ε). Le modèle-limite attendu s'écrit donc comme un système d'équations de Vlasov 2D couplées à une équation de Poisson modifiée, avec le noyau de convolution $\frac{1}{4\pi|x|}$ (au paragraphe 1.1 nous avons rencontré un modèle similaire Schrödinger-Poisson à densité surfacique). Pour finir, en suivant exactement

la même démarche qu'au paragraphe 1.2, on peut écrire un modèle intermédiaire, moins singulier que ce modèle limite, en gardant une extension spatiale selon z dans l'équation de Poisson (7.9) : c'est le modèle Vlasov-Schrödinger-Poisson. Par analogie avec le modèle de sous-bandes quantiques, on peut raisonnablement supposer que ce modèle asymptotique est une meilleure approximation du modèle de départ que le système limite (et, surtout, qu'il est plus stable numériquement). C'est ce modèle que nous étudions dans la section suivante.

8 Le système Vlasov-Schrödinger-Poisson

On s'intéresse ici à l'analyse du modèle de sous-bandes quantique-cinétique incluant les interactions électrostatiques entre électrons. Il s'agit du système Vlasov-Schrödinger-Poisson introduit dans la section 7 (Remarque 7.3) et qui peut s'écrire ainsi :

$$\partial_t f_p + v \cdot \nabla_x f_p - \nabla_x \epsilon_p \cdot \nabla_v f_p = 0, \quad (8.1)$$

$$-\frac{1}{2} \partial_z^2 \chi_p + (V^{ext} + V) \chi_p = \epsilon_p \chi_p, \quad (8.2)$$

$$-\Delta_{x,z} V = \sum_{p=1}^{+\infty} \rho_p |\chi_p|^2, \quad (8.3)$$

où l'on a posé $\rho_p = \int_{\mathbb{R}^2} f_p dv$. Rappelons que l'indice p parcourt \mathbb{N}^* , que la variable z est monodimensionnelle, tandis que x et v sont bidimensionnelles. Implicitement, pour tous t, x fixés, la suite croissante $(\epsilon_p(t, x))_{p \geq 1}$ définie par (8.2) est constituée de toutes les valeurs propres. Les fonctions propres associées $(\chi_p(t, x, \cdot))_{p \geq 1}$ forment une base orthonormée de $L^2(\mathbb{R})$. Nous avons étudié ce système dans deux types de configurations, qui font l'objet des paragraphes suivants.

8.1 Solutions faibles sur un domaine borné [11]

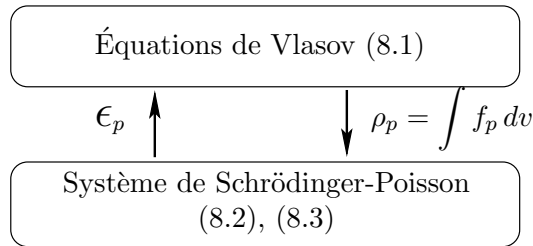
La configuration est la suivante. Le domaine spatial est le cylindre $\Omega = \omega \times (0, 1) \ni (x, z)$, où ω est un domaine régulier et borné de \mathbb{R}^2 . Les fonctions propres définies par (8.2) sont soumises à des conditions de Dirichlet : $\chi_p(t, x, 0) = \chi_p(t, x, 1) = 0$. On adjoint à l'équation de Poisson des conditions aux limites adéquates garantissant les théorèmes de régularité elliptique, comme par exemple $V = 0$ sur $\partial\omega \times (0, 1)$ et $\partial_z V = 0$ sur $\omega \times \{0, 1\}$. Enfin, pour tout p , la fonction de distribution f_p est soumise à une condition entrante au bord du domaine $\partial\omega \times \mathbb{R}^2$ (écrite plus précisément dans [11]) et à une donnée initiale $f_{p,0}$.

Théorème 8.1 ([11]) *Soient des données initiales positives satisfaisant¹ $((1 + |v|^2 + p^2) f_{p,0})_{p \geq 1} \in \ell^1(L^1(\omega \times \mathbb{R}^2))$ et $(f_{p,0})_{p \geq 1} \in \ell^1(L^\infty(\omega \times \mathbb{R}^2))$. Les données entrantes*

1. On note $\ell^1(E)$ l'ensemble des suites $(h_p)_{p \in \mathbb{N}^*}$ telles que $\sum_p \|h_p\|_E < +\infty$

au bord $\partial\omega \times \mathbb{R}^2$ sont supposées satisfaire des conditions analogues. Alors, sous la condition que les données sur les sous-bandes strictement supérieures à 1 sont suffisamment petites, le système (8.1), (8.2), (8.3) admet au moins une solution faible.

Éléments de Preuve. Si l'on se réfère aux travaux classiques concernant les solutions faibles pour le système de Vlasov-Poisson (en domaine borné ou non) [Ale, BA3, BADO, DPL, HH, Mis1, Mis2], cet énoncé n'est pas surprenant, exception faite de la condition de données petites pour $p \geq 2$. Nous ne nous attarderons pas ici sur les détails techniques de la preuve, qui utilise des outils usuels en théorie cinétique sans collisions (voir par exemple la présentation faite dans [Bou]) : lemmes d'interpolation, régularisations, résultats de compacité en moyenne [DPLM, GLPS, GPS]... Expliquons simplement la stratégie de la preuve. Elle consiste à regrouper en un bloc les deux équations quasistatiques (8.2), (8.3), et à considérer le système complet comme une collection d'équations de Vlasov (8.1) couplées à ce système quasistatique de Schrödinger-Poisson. Comme on le voit sur le diagramme suivant, le bloc "quasistatique" reçoit à tout instant l'information des $\rho_p = \int_{\mathbb{R}^2} f_p dv$ de la part des équations de Vlasov, et transmet en retour les ϵ_p , qui génèrent la dynamique de l'évolution.



La résolution, basée sur ce diagramme, repose essentiellement sur les deux points cruciaux suivants : (i) le caractère bien posé du système Schrödinger-Poisson lorsque la suite $(\rho_p)_{p \geq 1}$ est donnée, (ii) une estimation qui permet de construire une solution globale en temps.

C'est un contrôle de l'énergie qui permet ce point (ii). Posons $\mathcal{E}_{tot}(t) = \mathcal{E}_{kin}(t) + \mathcal{E}_{pot}(t)$, où l'énergie cinétique est l'intégrale de (7.7)

$$\mathcal{E}_{kin}(t) = \sum_{p \geq 1} \iint \frac{|v|^2}{2} f_p dx dv + \sum_{p \geq 1} \iiint \frac{1}{2} |\partial_z \chi_p|^2 f_p dx dz dv,$$

et l'énergie potentielle est la somme de l'énergie électrostatique appliquée et de l'énergie d'interaction

$$\mathcal{E}_{pot}(t) = \iiint \sum_{p \geq 1} f_p |\chi_p|^2 V^{ext} dx dz dv + \iint \frac{1}{2} |\nabla_{x,z} V|^2 dx dz.$$

Le fait remarquable est que cette quantité \mathcal{E}_{tot} est contrôlée, au cours du temps, par les données du problème (noter que les hypothèses du théorème permettent qu'elle soit finie à l'instant initial).

La restriction énoncée dans le théorème ne provient donc pas d'un manque d'estimation, mais du point (i). La section 9 est consacrée spécifiquement à l'étude de ce type de systèmes Schrödinger-Poisson. Nous y expliquons notamment que la question de l'unicité reste ouverte pour une suite $(\rho_p)_{p \geq 1}$ quelconque (cas (a) du Théorème 9.1). En revanche, cette question est résolue sous la condition que $\sum_{p \geq 2} \|\rho_p\|$ est assez petit, sans aucune restriction sur ρ_1 (voir la Remarque 9.2). \square

8.2 Solutions classiques dans tout l'espace [12]

Dans l'étude du système Vlasov-Schrödinger-Poisson, le cadre de solutions faibles en domaine borné était une première étape. Nous nous sommes ensuite posé la question naturelle de l'existence et unicité de solutions classiques dans tout l'espace. Un modèle important dans la pratique, appelé "limite électrique quantique" (et raisonnable à basse température, voir [Bas, Dav, FG]), correspond au cas où seule la première sous-bande ($p = 1$) est peuplée et les autres sont vides. Ce cas où les coefficients d'occupation seront, de fait, toujours décroissants par rapport à p est favorable à l'analyse : dans le cas (b) du Théorème 9.1, le système de Schrödinger-Poisson est bien posé. Nous avons choisi ce cadre pour l'étude de solutions classiques.

Le domaine spatial est maintenant \mathbb{R}^3 . Le potentiel extérieur (ne dépendant que de z pour simplifier) est tel que $V^{ext}(z) \rightarrow +\infty$ lorsque $|z| \rightarrow +\infty$. Ceci garantit le fait que la résolvante de $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + V^{ext} + V$ est compacte (et les fonctions propres exponentiellement décroissantes à l'infini, voir par exemple [RS]) et que (8.2) est bien un problème discret en p . Le potentiel V est décroissant à l'infini et l'équation (8.3) est réécrite $V = \frac{1}{4\pi r} * \sum (\int_{\mathbb{R}^2} f_p dv) |\chi_p|^2$. Le résultat principal de [12] est le suivant :

Théorème 8.2 ([12]) *Si la donnée initiale $f_{1,0}$ est de classe C^1 et suffisamment décroissante à l'infini, et si $f_{p,0} \equiv 0$ pour tout $p \geq 2$, alors le système (8.1), (8.2), (8.3) admet une unique solution classique.*

Éléments de Preuve. Les techniques utilisées reposent toujours sur l'analogie de structure entre ce problème et le système de Vlasov-Poisson (diagramme du paragraphe 8.1). Dans ce cas précis où seule la première sous-bande est peuplée, la résolution de la partie quasistatique Schrödinger-Poisson est toujours possible (Théorème 9.1 (b)) et le point crucial consiste désormais à obtenir des estimations L^∞ du champ électrique effectif $-\nabla_x \epsilon_1$. Ce couplage "2.5D" entre l'équation de Vlasov 2D et un système Schrödinger-Poisson 3D non-linéaire a pu être étudié en s'inspirant de la technique de démonstration de Ukai et Okabe [UO] pour le système de Vlasov-Poisson 2D, avec néanmoins des complications techniques pour obtenir cette estimation L^∞ . Signalons toutefois que cette estimation reste plus simple à obtenir que dans le cas du système de Vlasov-Poisson 3D, pour lequel on pourra se référer à [Bat, Bou, BaDe, Hors, LiPe, Pf, Sch, Wol]. \square

9 Systèmes de Schrödinger-Poisson quasistatiques

Cette section a le rôle transversal de présenter l'analyse de systèmes quasistatiques de type Schrödinger-Poisson, qui interviennent dans plusieurs modèles de sous-bandes que nous étudions dans ce mémoire. Nous regroupons ici, pour éviter les redondances, des résultats qui ont été obtenus dans [11, 12, 14, 2] comme résultats intermédiaires. Le système de Schrödinger-Poisson est constitué d'un problème aux valeurs propres couplé à une équation elliptique :

$$-\frac{1}{2}\partial_z^2\chi_p + (V^{ext} + V)\chi_p = \epsilon_p\chi_p, \quad (9.1)$$

$$-\Delta_{x,z}V = \sum_{p \geq 1} \rho_p |\chi_p|^2. \quad (9.2)$$

Rappelons que la suite croissante $(\epsilon_p)_{p \geq 1}$ est constituée de toutes les valeurs propres et que $\int \chi_p \chi_q dz = \delta_{pq}$. Il faut noter que cette formulation pour un système de Schrödinger-Poisson stationnaire est inhabituelle à deux égards : la dimensionnalité n'est pas la même pour les deux équations (1D pour Schrödinger et 3D pour Poisson) et la suite des facteurs d'occupation $\rho = (\rho_p(x))_{p \geq 1}$ est ici une donnée (dans ce paragraphe, on peut omettre une éventuelle dépendance en la variable temps) au lieu d'être prescrite comme une fonction décroissante des énergies. Pour être complet, le modèle doit fournir par ailleurs les équations qui permettent de calculer ces ρ_p . Elles peuvent être de nature quantique (paragraphe 1.2), cinétique (section 8) ou encore macroscopique (section 10). Sous sa formulation usuelle (à l'équilibre thermodynamique), le système de Schrödinger-Poisson stationnaire a été résolu par Nier [Ni1, Ni2, Ni3] (voir aussi [KR]). Concernant les versions "ouvertes" de ce système (lorsqu'il est relié à des réservoirs extérieurs), on pourra consulter la section 3.

Afin de pouvoir résoudre ce système, il faut préciser le domaine spatial d'étude et les conditions aux limites. En particulier, il faut garantir que le Hamiltonien $-\frac{1}{2}\partial_z^2 + (V^{ext} + V)$ a un spectre discret. Dans les articles cités plus haut, nous avons travaillé avec deux types de configurations : en domaine borné cylindrique ou sur \mathbb{R}^3 . Nous renvoyons aux débuts des paragraphes 8.1 et 8.2, où ces configurations ont été détaillées. Pour simplifier, le théorème énoncé ci-dessous ne concerne que le cas du domaine borné étudié dans [11] et [14] ; si le système est posé sur \mathbb{R}^3 (voir [12] et [2]), il est possible d'obtenir des résultats sensiblement analogues, moyennant quelques adaptations spécifiques liées au domaine non borné.

Théorème 9.1 • *Cas (a) (Systèmes loin de l'équilibre). On suppose $\rho_p(x) \geq 0$ pour tout x, p et que $\rho \in \ell^1(L^q(\mathbb{R}^2))$, avec $q > 4/3$. Alors le système (9.1), (9.2) admet au moins une solution V , qui est estimée dans $W^{2,q}(\Omega)$.*

• *Cas (b). (Systèmes stables). On suppose que, pour presque tout x et pour tout p , on a $\rho_p(x) \geq \rho_{p+1}(x) \geq 0$, et que $\rho \in \ell^1(L^{4/3}(\mathbb{R}^2))$. Alors (9.1), (9.2) admet une unique solution V , qui appartient à $W^{2,4/3}(\Omega)$, et l'application $\rho \mapsto V$ est localement Lipschitzienne.*

• *Cas (c).* (Systèmes à l'équilibre partiel). On se donne la densité surfacique $n_s(x) \geq 0$ dans $L^{4/3}(\Omega)$ et on prescrit les facteurs d'occupations ainsi :

$$\rho_p(x) = n_s(x) \frac{e^{-\epsilon_p(x)}}{\sum_{q \geq 1} e^{-\epsilon_q(x)}}.$$

Alors (9.1), (9.2) admet une unique solution V , qui appartient à $W^{2,4/3}(\Omega)$, et l'application $n_s \mapsto V$ est localement Lipschitzienne.

Éléments de Preuve. Cette preuve s'appuie sur un argument variationnel. En s'inspirant des travaux de Nier [Ni1, Ni2, Ni3], on peut vérifier que (9.1), (9.2) sont les équations d'Euler-Lagrange associées à une certaine fonctionnelle. Insistons seulement sur la question de l'unicité, qui est liée à la (stricte) convexité de cette fonctionnelle. On retrouve ici la même problématique que pour le prototype classique $-\Delta V = f(V)$ qui, associé à la fonctionnelle $J(V) = \frac{1}{2} \int |\nabla V|^2 dx + \int F(V) dx$ (où $F' = -f$), est connu pour être bien posé lorsque f est décroissante.

Pour toute fonction $U \in L_z^\infty(0,1)$, notons $\epsilon_p[U]$ et $\chi_p[U]$ les éléments propres de $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + (V^{ext} + U)$. En appliquant la théorie des perturbations du spectre des opérateurs à résolvante compacte [K, RS] (voir aussi [PT] pour un point de vue différent basé sur les problèmes de Sturm-Liouville), on peut différentier² $\epsilon_p[\cdot]$ et $\chi_p[\cdot]$:

$$d_V \epsilon_p \cdot W = \langle |\chi_p[V]|^2 W \rangle \quad ; \quad d_V \chi_p \cdot W = \sum_{q \neq p} \frac{\langle \chi_p[V] \chi_q[V] W \rangle}{\epsilon_p[V] - \epsilon_q[V]} \chi_q[V]. \quad (9.3)$$

Lorsque que les ρ_p sont les données du problème (cas (a) et (b)), introduisons la fonctionnelle

$$J_1(V) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} |\nabla_{x,z} V|^2 dx dz + \sum_{p \geq 1} \int_{\omega} \rho_p (\epsilon_p[0] - \epsilon_p[V]) dx.$$

Des calculs directs [11] utilisant (9.3) montrent que les points critiques de J_1 sur l'espace des fonctions $H^1(\Omega)$ qui s'annulent sur $\partial\omega \times (0,1)$ satisfont (9.1), (9.2). De plus, sa différentielle seconde s'écrit :

$$d_V^2 J_1 \cdot W \cdot W = \iint_{\Omega} |\nabla_{x,z} W|^2 dx dz - \sum_p \sum_{q \neq p} \int_{\omega} \frac{\rho_p - \rho_q}{\epsilon_p - \epsilon_q} \langle \chi_p \chi_q W \rangle^2 dx.$$

En conséquence, dans le cas (b), la décroissance des ρ_p selon p assure la positivité de cette expression et la stricte convexité de J_1 . Dans le cas général (a), on ne peut rien en dire.

2. On utilise la même notation $\langle \cdot \rangle = \int \cdot dz$ que dans la première partie de ce mémoire

Dans le cas (c), la donnée est la densité surfacique $n_s(x) \geq 0$ et les ρ_p dépendent de la solution elle-même, de façon à ce qu'on ait $n_s(x) = \langle n(x) \rangle$. On doit alors remplacer J_1 par

$$J_2(V) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} |\nabla_{x,z} V|^2 dx dz + \int_{\omega} u \ln \left(\sum_{p \geq 1} e^{-\epsilon_p[V]} \right) dx.$$

Des calculs plus longs, développées dans [14], permettent aussi de démontrer que cette fonctionnelle est strictement convexe et que son minimiseur résout le problème. \square

Remarque 9.2 (Deux cas particuliers) Par une analyse perturbative, on peut tout de même démontrer l'unicité de la solution dans deux cas particuliers du (a). Tout d'abord, dans [11], nous avons traité le cas où les sous-bandes supérieures à $p = 1$ sont très peu occupées ($\sum_{p \geq 2} \|\rho_p\|$ est petit), qui peut être vu comme une perturbation du cas bien posé où seule la première sous-bande est occupée. Le second exemple [2] concerne le "fort confinement partiel" (on a $V^{ext} = V_c^\varepsilon$, avec les notations de la section 1), où la partie non convexe de J_1 s'avère être petite lorsque ε est petit.

10 Transport diffusif partiellement quantifié [14, 13, 15]

Une étape supplémentaire du point de vue de la modélisation consiste à enrichir la description hybride quantique-cinétique précédente par la prise en compte des collisions. L'objectif ici est d'établir (brièvement) et surtout d'étudier un modèle macroscopique de transport présentant toujours un degré de liberté quantique. Ces travaux font l'objet de [14] (annoncé par [13]).

Les vibrations du réseau cristallin que sont les phonons interagissent de manière inélastique avec les électrons et induisent à la fois des transitions intra- et inter-sous-bandes. Selon l'approximation dite de la règle d'or de Fermi [AFS, Bas, Dav], on introduit un opérateur de Boltzmann linéaire dans le second membre des équations de Vlasov (8.1). En changeant les échelles pour se placer dans une asymptotique de diffusion (on cherche à décrire un régime très collisionnel), on écrit

$$\eta \partial_t f_p + v \cdot \nabla_x f_p - \nabla_x \epsilon_p \cdot \nabla_v f_p = \frac{1}{\eta} (Q(f))_p, \quad (10.1)$$

(η est un libre parcours moyen adimensionné). L'opérateur de collision vectoriel appliqué à $f = (f_p)_{p \geq 1}$ est défini par

$$Q(f)_p = \sum_{p'} \int_{\mathbb{R}^2} \alpha_{p,p'}(v,v') (\mathcal{M}_p(v) f_{p'}(v') - \mathcal{M}_{p'}(v') f_p(v)) dv'. \quad (10.2)$$

Les taux de transition $\alpha_{p,p'}(v,v')$ dépendent du système et la fonction $\mathcal{M}_p(v)$ est la Maxwellienne normalisée :

$$\mathcal{M}_p(t,x,v) = \frac{1}{2\pi\mathcal{Z}(t,x)} e^{-\left(\frac{1}{2}v^2 + \epsilon_p(t,x)\right)},$$

où l'on a introduit la fonction de répartition

$$\mathcal{Z}(t,x) = \sum_{p=1}^{+\infty} e^{-\epsilon_p(t,x)}.$$

Cet opérateur Q peut être vu comme l'opérateur de Boltzmann usuel des semi-conducteurs [Po1] dans lequel on remplace la variable d'impulsion selon z par son équivalent quantifié, l'entier p . Noter que l'énergie microscopique est bien l'argument $\frac{1}{2}v^2 + \epsilon_p(t,x)$ de la Maxwellienne.

En admettant que la solution de (10.1) admet une limite (f_p^0) lorsque $\eta \rightarrow 0$, cette dernière doit être dans le noyau de Q , qui est engendré par la Maxwellienne (voir [Po1]). On pose

$$f_p(t,x,v) = n_s(t,x) \mathcal{M}_p(t,x,v). \quad (10.3)$$

Noter que $n_s(t,x) = \sum_p \int f_p(t,x,v) dv = \langle n(t,x,z) \rangle$ est la densité surfacique de particules. En identifiant les termes dans (10.1), on obtient formellement une équation d'évolution de dérive-diffusion sur n_s (après quelques hypothèses simplificatrices) :

$$\partial_t n_s - \operatorname{div}_x (\nabla_x n_s + n_s \nabla_x V_s) = 0 \quad (10.4)$$

où le terme de dérive est créé par le champ dérivant du potentiel effectif

$$V_s(t,x) = -\ln \sum_{p \geq 1} e^{-\epsilon_p(t,x)}. \quad (10.5)$$

Le modèle hybride dérive-diffusion Schrödinger-Poisson (DDSP) est constitué de cette équation d'évolution (10.4) sur la densité surfacique, couplée aux équations que nous avons déjà, définissant les sous-bandes et le potentiel d'interaction électrostatiques :

$$-\frac{1}{2} \partial_z^2 \chi_p + (V^{ext} + V) \chi_p = \epsilon_p \chi_p, \quad (10.6)$$

$$-\Delta_{x,z} V = n = \sum_{p \geq 1} \rho_p |\chi_p|^2. \quad (10.7)$$

Enfin le modèle est complet si l'on calcule les facteurs d'occupation grâce à (10.3) :

$$\rho_p(t,x) = \frac{n_s(t,x)}{\mathcal{Z}(t,x)} e^{-\epsilon_p(t,x)}. \quad (10.8)$$

Remarque 10.1 Comme le modèle QDD (5.1), (5.2), (5.3) qui a été étudié dans la deuxième partie de ce mémoire, ce modèle DDSP couple une équation de dérive-diffusion à une équation de Schrödinger stationnaire. Une différence notable est qu'ici

l'équation de Schrödinger est posée en 1D selon z et l'équation de transport est posée en 2D selon x , tandis que dans le modèle QDD toutes ces équations sont posées en 3D et leur couplage est davantage "non local". Il serait intéressant de chercher à faire le lien entre ces modèles DDSP et QDD, par exemple à l'aide d'une limite semiclassique partielle.

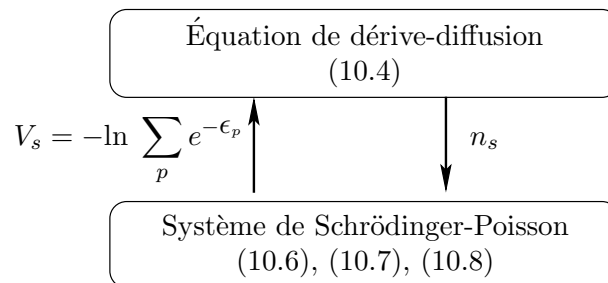
Considérons le système DDSP (10.4)–(10.8) dans le domaine cylindrique $\Omega = \omega \times (0,1)$ introduit au paragraphe 8.1. Outre le potentiel extérieur V^{ext} , les données du problème sont une donnée de Cauchy $n_s(0,x) = n_s^0(x)$, et des données au bord $\partial\omega \times (0,1) : n_s(t,x) = n_b(x)$, $V(t,x,z) = V_b(x,z)$. Rappelons que sur les frontières supérieure et inférieure du domaine $\omega \times \{0,1\}$ on impose $\chi_p(t,x,z) = \partial_z V(t,x,z) = 0$.

Dans [14], nous avons démontré deux principaux résultats pour ce système DDSP : l'existence et unicité de solutions pour des données très générales, et la convergence exponentielle en temps long vers l'unique état stationnaire pour des données au bord particulières, dites *globalement à l'équilibre*, que nous ne définissons pas ici. Afin de tracer plus facilement une perspective, dans ce mémoire nous ne considérerons que le cas de données globalement à l'équilibre. Nous résumons les résultats obtenus ainsi :

Théorème 10.2 ([14]) *Si les données au bord sont globalement à l'équilibre alors le système (10.4)–(10.8) admet une unique solution stationnaire (n_s^∞, V^∞) . De plus, pour toute donnée de Cauchy positive $n_s^0 \in L^2(\omega)$, le système instationnaire (10.4)–(10.8) admet une unique solution (n_s, V) . Enfin, il existe deux constantes $C > 0$ et $\lambda > 0$ telles que*

$$\forall t \geq 0 \quad \|n_s - n_s^\infty\|_{L^2(\omega)}(t) + \|V - V^\infty\|_{H^1(\Omega)}(t) \leq C e^{-\lambda t}.$$

Plan de la Preuve. Laissons de côté la première partie du théorème (le modèle stationnaire) et attardons-nous sur le problème instationnaire. La résolution de ce système non linéaire (10.4)–(10.8) peut être faite en s'appuyant sur une analogie structurelle avec le système dérive-diffusion-Poisson, étudié depuis longtemps (nous ne citerons que [Gaj, Moc, MRS]). La structure du système DDSP est illustrée sur le diagramme suivant :



Comme pour de nombreux systèmes de la sorte, la preuve se fait en deux étapes : existence locale en temps, puis globale. Pour la preuve d'existence locale, une méthode de point fixe utilisant une représentation de Duhamel de l'équation parabolique (10.4)

convient bien, sous une condition fondamentale : il faut que le second bloc du diagramme, le système (10.6), (10.7), (10.8), définisse une application régulière (localement Lipschitzienne) entre n_s et V_s . En fait, nous avons déjà analysé cette question dans la section 9. Nous sommes en effet dans les conditions du cas (c) du Théorème 9.1, qui permet de répondre positivement à la question (car on peut en fait remplacer V par V_s dans la conclusion de ce théorème).

Le passage à des solutions globales en temps se fait grâce à deux séries d'estimations *a priori*. Les premières estimations sont obtenues grâce à une propriété physique du système (qui est une version dissipative de l'estimation d'énergie du paragraphe 8.1). Commençons par introduire quelques notations. Le quasi-niveau de Fermi du système est défini par

$$\epsilon_F = \ln \frac{n_s}{\mathcal{Z}} = V_s + \ln n_s$$

et l'entropie relative entre la solution du problème instationnaire et la solution stationnaire (notée $^\infty$) est

$$\begin{aligned} W = & \sum_p \int_\omega (\rho_p \ln (\rho_p / \rho_p^\infty) - \rho_p + \rho_p^\infty) dx + \frac{1}{2} \iint_\Omega |\nabla_{x,z}(V - V^\infty)|^2 dx dz \\ & + \int_\omega \sum_p e^{\epsilon_F - \epsilon_p} (\epsilon_p - \epsilon_p^\infty - \langle |\chi_p|^2 (V - V^\infty) \rangle) dx. \end{aligned} \quad (10.9)$$

Les deux premières intégrales formant W sont clairement positives et mesurent des distances. On peut par ailleurs prouver que la troisième intégrale est aussi positive. La propriété intéressante est que W décroît au cours du temps :

$$\frac{d}{dt} W(t) = - \int e^{\epsilon_F - V_s} |\nabla_x \epsilon_F|^2 dx. \quad (10.10)$$

En particulier, à partir de $W(t) \leq W(0)$ on obtient la première série d'estimations. Malheureusement, la borne de n_s dans $L \log L$ qui s'en déduit est insuffisante (le Théorème 9.1, (c), requiert une borne $L^{4/3}$ sur n_s). Nous avons donc dans un second temps amélioré ces estimations en montrant que n_s est bornée dans $L_{loc}^\infty(\mathbb{R}_+, L^q(\omega))$, pour tout q . Nous ne développerons pas ici cette partie très technique et calculatoire.

Pour étudier le comportement en temps long de la solution ainsi construite, l'outil de base est cette même entropie relative, grâce à (10.10) qui fournit une information précieuse : le taux de dissipation d'entropie. Une première étape consiste à démontrer, à l'aide de (10.10) et en utilisant l'unicité de la solution stationnaire du problème, que (n_s, V) converge vers (n_s^∞, V^∞) lorsque $t \rightarrow \infty$. Pour cela, on adapte l'argument de Gajewski [Gaj] à notre contexte (plusieurs difficultés techniques apparaissent cependant), en utilisant une inégalité de type Csiszár-Kullback [Csi, Ku].

La seconde étape concerne l'obtention d'un taux de convergence exponentielle. Des travaux récents [AMT, AMTU, BiDo, BDM] étudient de façon très précise la convergence exponentielle de solutions de systèmes non linéaires de dérive-diffusion. Cependant, les conditions aux limites de Dirichlet non homogènes comme celles considérées

ici semblent poser des difficultés spécifiques, non traitées dans ces travaux, et nous avons développé une méthode bien adaptée pour cette question. Cette méthode nous semble nouvelle dans ce contexte, c'est pourquoi nous l'avons appliquée aussi au système classique dérive-diffusion-Poisson dans la Note [15]. Présentons-la plutôt dans ce contexte plus simple. On considère la solution (n, V) de

$$\begin{cases} \partial_t n - \operatorname{div} (\nabla n + n \nabla V) = 0 \\ -\Delta V = n, \end{cases} \quad (10.11)$$

dans un domaine borné, avec des conditions au bord telles que $n e^V = e^{\epsilon_F^\infty}$ y est une constante. Alors l'unique solution stationnaire du système se définit *via* la résolution de $-\Delta V^\infty = e^{\epsilon_F^\infty - V^\infty}$, et l'entropie relative par rapport à cette solution s'écrit

$$\widetilde{W}(t) = \int (n \ln (n/n^\infty) - n + n^\infty) dx + \frac{1}{2} \int |\nabla(V - V^\infty)|^2 dx$$

L'idée consiste à utiliser le premier terme $\widetilde{L}(t)$ du développement limité de cette entropie relative, qui est quadratique (un argument analogue est parfois utilisé pour étudier le trou spectral associé à un opérateur linéaire comme celui de (10.4) [AMTU]):

$$\widetilde{L}(t) = \frac{1}{2} \int \frac{(n - n^\infty)^2}{n^\infty} dx + \frac{1}{2} \int |\nabla(V - V^\infty)|^2 dx.$$

On peut démontrer une inégalité du type :

$$\frac{d}{dt} \widetilde{L}(t) \leq -C_0 \widetilde{L}(t) + C \widetilde{L}(t) \widetilde{W}(t)^\alpha (1 + \|\nabla \sqrt{n}\|_{L^2}^2),$$

qui permet de conclure grâce à un lemme de Gronwall. On utilise pour cela des estimations obtenues préalablement et le fait que $\widetilde{W}(t)$ converge vers 0 en temps grand (montré au cours de la première étape). Cet argument s'adapte dans le contexte du modèle hybride DDSP. \square

Remarque 10.3 On peut trouver une écriture plus compacte pour l'entropie relative définie par (10.9). On a en effet

$$W = \iint_{\Omega} \{n(\epsilon_F - V - (\epsilon_F^\infty - V^\infty)) - n + n^\infty\} dx dz + \frac{1}{2} \iint_{\Omega} |\nabla_{x,z}(V - V^\infty)|^2 dx dz.$$

Il est remarquable que cette expression soit exactement la même que pour le modèle de dérive-diffusion-Poisson classique (10.11) (poser $n e^V = e^{\epsilon_F}$ et transformer \widetilde{W}). Enfin, il est intéressant de constater que la même formule avait été trouvée pour le modèle QDD des Sections 4 et 5 (poser $-A^k = \epsilon_F - V^k$ et $\alpha = 1$ dans (5.9)).

Liste de Publications

Première partie.

Transport quantique partiellement confiné

- [1] N. Ben Abdallah, F. Méhats, O. Pinaud, *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement*, à paraître dans SIAM J. Math. Anal.
- [2] F. Méhats, *Analysis of a quantum subband model for the transport of partially confined charged particles*, soumis.
- [3] N. Ben Abdallah, R. M. Bombosi, F. Méhats, C. Schmeiser, *The nonlinear Schrödinger equation with a strongly anisotropic harmonic potential*, soumis.
- [4] N. Ben Abdallah, F. Méhats, O. Pinaud, *On an open transient Schrödinger-Poisson system*, à paraître dans Math. Models Methods Appl. Sci.

Deuxième partie.

Modèles diffusifs quantiques

- [5] P. Degond, F. Méhats, C. Ringhofer, *Quantum Energy-Transport and Drift-Diffusion models*, à paraître dans J. Stat. Phys.
- [6] P. Degond, F. Méhats, C. Ringhofer, *Quantum hydrodynamic models derived from the entropy principle*, à paraître dans Contemp. Math.
- [7] S. Gallego, F. Méhats, *Numerical approximation of a quantum drift-diffusion model*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I **339** (2004), 519–524. Cette note annonce les résultats développés dans [8].
- [8] S. Gallego, F. Méhats, *Entropic discretization of a quantum drift-diffusion model*, soumis.
- [9] J.P. Bourgade, P. Degond, F. Méhats, C. Ringhofer, *Phonon collision operators consistent with quantum entropy relaxation and quantum Spherical Harmonics Expansion models*, en préparation.

Troisième partie.**Modélisation hybride quantique et classique**

- [10] N. Ben Abdallah, F. Méhats, *Semiclassical Analysis of the Schrödinger equation with a partially confining potential*, à paraître dans J. Math. Pures Appl.
- [11] N. Ben Abdallah, F. Méhats, *On a Vlasov-Schrödinger-Poisson model*, Comm. Partial Differential Equations **29** (2004), no. 1-2, 173–206.
- [12] N. Ben Abdallah, F. Méhats, G. Quinio, *Global existence of classical solutions for a Vlasov-Schrödinger-Poisson system*, à paraître dans Indiana Univ. Math. Journal.
- [13] N. Ben Abdallah, F. Méhats, N. Vauchelet, *Analysis of a Drift-Diffusion-Schrödinger-Poisson model*, C. R. Math. Acad. Sci. Paris **335** (2002), no. 12, 1007–1012. Cette note annonce partiellement les résultats de [14].
- [14] N. Ben Abdallah, F. Méhats, N. Vauchelet, *Diffusive transport of partially quantized particles : Existence, uniqueness and long time behaviour*, soumis.
- [15] N. Ben Abdallah, F. Méhats, N. Vauchelet, *A note on the long time behavior for the Drift-Diffusion-Poisson system*, à paraître dans les Comptes rendus de l'Académie des sciences - Mathématique. Cette note est un travail à part entière qui sera pas développé dans une publication ultérieure.

Publications antérieures, liées à la thèse de l'auteur.

- [16] F. Méhats, *Convergence of a numerical scheme for a nonlinear oblique derivative boundary value problem*, M2AN Math. Model. Numer. Anal. **36** (2002), no. 6, 1111–1132.
- [17] A. Ambroso, F. Méhats, P.-A. Raviart, *On singular perturbation problems for the nonlinear Poisson equation*, Asymptot. Anal. **25** (2001), no. 1, 39–91
- [18] F. Méhats, J.-M. Roquejoffre, *A nonlinear oblique derivative boundary value problem for the heat equation. Part 2: Singular selfsimilar solutions*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire **16** (1999), no. 6, 691–724.
- [19] F. Méhats, J.-M. Roquejoffre, *A nonlinear oblique derivative boundary value problem for the heat equation. Part 1: Basic results*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire **16** (1999), no. 2, 221–253.
- [20] N. Ben Abdallah, P. Degond, F. Méhats, *The Child-Langmuir asymptotics for magnetized flows*, Asymptot. Anal. **20** (1999), no. 2, 97–132.
- [21] N. Ben Abdallah, P. Degond, F. Méhats, *Mathematical models for magnetic insulation*, Phys. Plasmas **5** (1998), no. 5, 1522–1534.
- [22] F. Méhats, *The Child-Langmuir asymptotics applied to a bipolar diode*, Math. Methods Appl. Sci. **21** (1998), no. 12, 1115–1148.
- [23] F. Méhats, J.-M. Roquejoffre, *Un problème d'évolution avec condition aux limites non linéaire*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math. **321** (1995), no. 10, 1319–1322.

Bibliographie

- [Ale] R. Alexandre, *Weak solutions of the Vlasov-Poisson initial-boundary value problem*, Math. Methods Appl. Sci. **16** (1993), no. 8, 587–607.
- [Anc] M. G. Ancona, *Diffusion-Drift modeling of strong inversion layers*, COMPEL **6** (1987), 11–18.
- [AI] M. G. Ancona, G. J. Iafrate, *Quantum correction of the equation of state of an electron gas in a semiconductor*, Phys. Rev. B **39** (1989), 9536–9540.
- [AYDVCV] M. G. Ancona, Z. Yu, R. W. Dutton, P. J. Voorde, M. Cao, D. Vook, *Density-gradient analysis of MOS tunneling*, IEEE Trans. Electron. Dev. **47** (2000), 2310–2319.
- [AG] S. Alinhac, P. Gérard, *Opérateurs pseudo-différentiels et théorème de Nash-Moser*, Savoirs Actuels, InterEditions, Paris, Éd. du CNRS, Meudon, 1991.
- [AFS] T. Ando, B. Fowler, F. Stern, *Electronic properties of two-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys. **54** (1982), no. 2, 437–672.
- [AB] X. Antoine, C. Besse, *Construction, structure and asymptotic approximations of a microdifferential transparent boundary condition for the linear Schrödinger equation*, J. Math. Pures Appl. (9) **80** (2001), no. 7, 701–738.
- [Arn1] A. Arnold, *Self-consistent relaxation-time models in quantum mechanics*, Comm. Partial Differential Equations **21** (1996), no. 3-4, 473–506.
- [Arn2] A. Arnold, *Numerical absorbing boundary conditions for quantum evolution equation*, VLSI Design **6** (1998), 313–319.
- [AE] A. Arnold, M. Ehrhardt, *Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation*, Riv. Mat. Univ. Parma **6** (2001), no. 4, 57–108.
- [ALMS] A. Arnold, J.L. Lopez, P.A. Markowich, J. Soler, *An Analysis of Quantum Fokker-Planck Models: A Wigner Function Approach*, à paraître dans Rev. Mat. Iberoamericana.
- [AMT] A. Arnold, P. A. Markowich, G. Toscani, *On Large Time Asymptotics for Drift-Diffusion-Poisson Systems*, Transport Theory Statist. Phys. **29** (2000), no. 3-5, 571–581.
- [AMTU] A. Arnold, P. A. Markowich, G. Toscani, A. Unterreiter, *On generalized Csiszár-Kullback inequalities*, Monatsh. Math. **131** (2000), no. 3, 235–253.
- [AS] A. Arnold, C. Sparber, *Quantum dynamical semigroups for diffusion models with Hartree interaction*, à paraître dans Comm. Math. Phys.
- [Bal] R. Balian, *From microphysics to macrophysics*, Springer, 1982.
- [BaDe] C. Bardos, P. Degond, *Global existence for the Vlasov-Poisson equation in 3 space variables with small initial data*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire **2** (1985), no. 2, 101–118.
- [BEGMY] C. Bardos, L. Erdős, F. Golse, N. Mauser, H.-T. Yau, *Derivation of the Schrödinger-Poisson equation from the quantum N -body problem*, C. R. Acad. Sci. Paris **334** (2002), no. 6, 515–520.
- [BGM] C. Bardos, F. Golse, N. Mauser, *Weak coupling limit of the N -particle Schrödinger equation*, Methods Appl. Anal. **7** (2000), no. 2, 275–293.

- [BGP1] C. Bardos, F. Golse and B. Perthame, *The Rosseland approximation for the radiative transfer equations*, Comm. Pure Appl. Math. **40** (1987), no. 6, 691–721.
- [BSS] C. Bardos, R. Santos and R. Sentis, *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. Amer. Math. Soc. **284** (1984), no. 2, 617–649.
- [BaPo] V. A. Baskakov, A. V. Popov, *Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation*, Wave motion **14** (1991), 123–128.
- [Bas] G. Bastard, Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, Les éditions de physique (1996).
- [Bat] J. Batt, *Global symmetric solutions of the initial value problem of stellar dynamics*, J. Differential Equations **25** (1977), no. 3, 342–364.
- [BA1] N. Ben Abdallah, *On a multidimensional Schrödinger-Poisson Scattering Model for semiconductors*, J. Math. Phys. **41** (2000), no. 7, 4241–4261.
- [BA2] N. Ben Abdallah, *A hybrid kinetic-quantum model for stationary electron transport*, J. Statist. Phys. **90** (1998), no. 3-4, 627–662.
- [BA3] N. Ben Abdallah, *Weak solutions of the initial-boundary value problem for the Vlasov-Poisson system*, Math. Methods Appl. Sci. **17** (1994), no. 6, 451–476.
- [BAD] N. Ben Abdallah, P. Degond, *On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors*, J. Math. Phys. **37** (1996), no. 7, 3306–3333.
- [BADGa] N. Ben Abdallah, P. Degond, I. Gamba, *Coupling one-dimensional time-dependent classical and quantum transport models*, J. Math. Phys. **43** (2002), no. 1, 1–24.
- [BADGe] N. Ben Abdallah, P. Degond, S. Génieys, *An energy-transport model for semiconductors derived from the Boltzmann equation*, J. Stat. Phys. **84** (1996), 205–231.
- [BADM] N. Ben Abdallah, P. Degond and P. A. Markowich, *On a one-dimensional Schrödinger-Poisson Scattering Model*, Z. Angew. Math. Phys. **48** (1997), no. 1, 135–155.
- [BADo] N. Ben Abdallah, J. Dolbeault, *Relative entropies for kinetic equations in bounded domains (irreversibility, stationary solutions, uniqueness)*, Arch. Ration. Mech. Anal. **168** (2003), 253–298.
- [BAP1] N. Ben Abdallah, E. Polizzi, *Self-consistent three-dimensional models for quantum ballistic transport in open systems*, Phys. Rev. B **66** (2002), 245301.
- [BAP2] N. Ben Abdallah, E. Polizzi, *Subband decomposition approach for the simulation of quantum electron transport in nanostructures*, à paraître dans in J. Comp. Phys.
- [BAU] N. Ben Abdallah, A. Unterreiter, *On the stationary quantum drift-diffusion model*, Z. Angew. Math. Phys. **49** (1998), no.2, 251–275.
- [Bie] B. Biegel, *Simulation of ultra-small electronic devices: the classical-quantum transition regime*, NASA Technical Report 97-028, 1997.
- [BiDo] P. Biler, J. Dolbeault, *Long time behavior of solutions of Nernst-Planck and Debye-Hückel drift-diffusion systems*, Ann. Henri Poincaré **1** (2000), no. 3, 461–472.
- [BDM] P. Biler, J. Dolbeault, P. A. Markowich, *Large time asymptotics of nonlinear drift-diffusion systems with Poisson coupling*, Transport Theory Statist. Phys. **30** (2001), no. 4-6, 521–536.
- [Be] P. Béchouche, *Semiclassical limits in a crystal with a Coulombian self-consistent potential: effective mass theorem*, Asympt. Anal **19** (1999), 95–116.
- [BMP] P. Béchouche, N. Mauser, F. Poupaud, *Semiclassical limit for the Schrödinger-Poisson equation in a crystal*, Comm. Pure Appl. Math. **54** (2001), 851–890.
- [BePo] P. Béchouche, F. Poupaud, *Semiclassical limit of a Schrödinger equation for a stratified material*, Monatsh. Math. **129** (2000), 281–301.
- [BLP] A. Bensoussan, J. L. Lions and G. Papanicolaou, *Boundary layers and homogenization of transport processes*, Publ. Res. Inst. Math. Sci. **15** (1979), no. 1, 53–157.
- [BO] M. Born, R. Oppenheimer, *Zur Quantentheorie der Molekeln*, Ann. Phys. **84** (1927), 457–484.
- [Bou] F. Bouchut, *Introduction à la théorie mathématique des équations cinétiques*, in Kinetic equations and asymptotic theory, B. Perthame, L. Desvillettes Eds, Series in Appl. Maths. **4**, Gauthier-Villars (2000).

- [BM] F. Brezzi, P. A. Markowich, *The three dimensional Wigner-Poisson Problem : existence, uniqueness and approximation*, Math. Methods Appl. Sci. **14** (1991), no. 1, 35–61.
- [Br1] E. Bringuier, *Kinetic theory of high-field transport in semiconductors*, Phys. Rev. B **57** (1998), 2280–2285.
- [Br2] E. Bringuier, *Nonequilibrium statistical mechanics of drifting particles*, Phys. Rev. E **61** (2000), 6351–6358.
- [Car] R. Carles, *Nonlinear Schrödinger equations with repulsive harmonic potential and applications*, SIAM J. Math. Anal. **35** (2003), no. 4, 823–843.
- [Cas] F. Castella, *L^2 solutions to the Schrödinger-Poisson system: existence, uniqueness, time behaviour, and smoothing effects*, Math. Models Methods Appl. Sci. **7** (1997), no. 8, 1051–1083.
- [Caz] T. Cazenave, *An Introduction of Nonlinear Schrödinger Equations*, Textos de Métodos Matemáticos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1996, third edition.
- [Cer] C. Cercignani, *Mathematical methods in kinetic theory*, Plenum Press, New York, 1990.
- [CIP] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti, *The mathematical theory of dilute gases*, Springer, New York, 1994.
- [CDS] J.-M. Combes, P. Duclos, R. Seiler, *The Born-Oppenheimer approximation*, in *Rigorous Atomic and Molecular Physics*, G. Velo, A. Wightman Eds, New York, Plenum (1981), 185–212.
- [Csi] I. Csiszár, *Information-type measures of difference of probability distributions*, Stud. Sc. Math. Hung. **2** (1967), 299–318.
- [dC] R. C. T. da Costa, *Quantum mechanics for a constraint particle*, Phys. Rev. A **23** (1981), no. 4, 1982–1987.
- [DGPS] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71** (1999), no. 3, 463–512.
- [Dat] S. Datta, *Nanoscale device modeling: the Green's function method*, Superlattices and Microstructures **28** (2000), no. 4, 253–278.
- [Dav] J. H. Davies, *The physics of low dimensional semiconductors*, Cambridge Univ. press (1998).
- [De1] P. Degond, *Mathematical modelling of microelectronics semiconductor devices*, Proceedings of the Morningside Mathematical Center, Beijing, AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, AMS Society and International Press, 2000, 77–109.
- [De2] P. Degond, *An infinite system of diffusion equations arising in transport theory: the coupled Spherical Harmonics Expansions model*, Math. Models Methods Appl. Sci. **11** (2001), no. 5, 903–932.
- [De3] P. Degond, *Transport of trapped particles in a surface potential*, Nonlinear partial differential equations and their applications, Collège de France Seminar, Vol. XIV (Paris, 1997/1998), 273–296, Stud. Math. Appl., 31, North-Holland, Amsterdam, 2002.
- [DEA] P. Degond, A. El Ayyadi, *A coupled Schrödinger Drift-Diffusion model for quantum semiconductor device simulations*, J. Comput. Phys. **181** (2002), 222–259.
- [DGJ1] P. Degond, S. Génieys et A. Jüngel, *A system of parabolic equations in nonequilibrium thermodynamics including thermal and electrical effects*, J. Math. Pures Appl. (9) **76** (1997), no. 10, 991–1015.
- [DGJ2] P. Degond, S. Génieys, A. Jüngel, *A steady-state system in non-equilibrium thermodynamics including thermal and electrical effects*, Math. Methods Appl. Sci. **21** (1998), no. 15, 1399–1413.
- [DPR] P. Degond, L. Pareschi, G. Russo, *Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations*, Springer-Verlag, 2004.
- [DPV] P. Degond, C. Parzani, M.-H. Vignal, *Confinement of charged particles by a surface potential*, en préparation.
- [DR1] P. Degond, C. Ringhofer, *Quantum moment hydrodynamics and the entropy principle*, J. Stat. Phys. **112** (2003), 587–628.
- [DR2] P. Degond, C. Ringhofer, *Binary quantum collision operators conserving mass momentum and energy*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser I **336** (2003), 785–790.

- [DPL] R. J. DiPerna, P.-L. Lions, *Ordinary differential equations, transport theory and Sobolev spaces*, Invent. Math. **98** (1989), no. 3, 511–547.
- [DPLM] R. J. DiPerna, P.-L. Lions, Y. Meyer, *L^p regularity of velocity averages*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire **8** (1991), no. 3-4, 271–287.
- [ES] Yu. V. Egorov, M. A. Shubin, *Linear partial differential equations. Foundations of the classical theory*, Partial differential equations I, 1–259, Encyclopaedia Math. Sci., 30, Springer, Berlin, 1992.
- [EAJ] A. El Ayyadi, A. Jüngel, *Semiconductor simulations using a coupled quantum drift-diffusion Schrödinger-Poisson model*, preprint HYKE no. 2004-129, www.hyke.org, 2004.
- [EY] L. Erdős, H.-T. Yau, *Derivation of the nonlinear Schrödinger equation from a many body Coulomb system*, Adv. Theor. Math. Phys. **5** (2001), no. 6, 1169–1205.
- [FeGe] C. Fermanian Kammerer, P. Gérard, *Mesures semi-classiques et croisement de modes*, Bull. Soc. Math. France **130** (2002), no. 1, 123–168.
- [FG] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, Transport in nanostructures, Cambridge Univ. Press (1997).
- [Fis] M. V. Fischetti, *Theory of electron transport in small semiconductor devices using the Pauli Master equation*, J. Appl. Phys. **83** (1998), 270–291.
- [Fre] W. R. Frensley, *Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium*, Rev. Mod. Phys. **62** (1990), 745–791.
- [FH] R. Froese, I. Herbst, *Realizing Holonomic Constraints in Classical and Quantum Mechanics*, Comm. Math. Phys. **220** (2001), no. 3, 489–535.
- [FMR] F. Frommlet, P. A. Markowich, C. A. Ringhofer, *A Wigner Function Approach to Phonon Scattering*, IEEE-VLSI Design **9** (1999), no. 4, 339–350.
- [Gaj] H. Gajewski, *On Existence, Uniqueness and Asymptotic Behavior of Solutions of the Basic Equations for Carrier Transport in Semiconductors*, Z. Angew. Math. Mech. **65** (1985), no. 2, 101–108.
- [Gar] C. Gardner, *The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices*, SIAM J. Appl. Math. **54** (1994), no. 2, 409–427.
- [GR1] C. Gardner and C. Ringhofer, *The smooth quantum potential for the hydrodynamic model*, Phys. Rev. E **53** (1996), 157–167.
- [GR2] C. Gardner and C. Ringhofer, *The Chapman-Enskog Expansion and the Quantum Hydrodynamic Model for Semiconductor Devices*, VLSI Design **10** (2000), 415–435.
- [GJ] I. Gasser and A. Jüngel, *The quantum hydrodynamic model for semiconductors in thermal equilibrium*, Z. Angew. Math. Phys. **48** (1997), no. 1, 45–59.
- [GM] I. Gasser and P. A. Markowich, *Quantum hydrodynamics, Wigner transforms and the classical limit*, Asymptot. Anal. **14** (1997), no. 2, 97–116.
- [GMR] I. Gasser, P. Markowich and C. Ringhofer, *Closure conditions for classical and quantum moment hierarchies in the small temperature limit*, Transport Theory Statist. Phys. **25** (1996), no. 3-5, 409–423.
- [Ge1] P. Gérard, *Mesures semi-classiques et ondes de Bloch*, Sem. École polytechnique **XVI** (1991), 1–19.
- [Ge2] P. Gérard, *Équations de champ moyen pour la dynamique quantique d'un grand nombre de particules*, séminaire Bourbaki 2003-2004, no. 930.
- [GMMP] P. Gérard, P. A. Markowich, N. J. Mauser, F. Poupaud, *Homogenization Limits and Wigner Transforms*, Comm. Pure Appl. Math. **50** (1997), 323–379.
- [GV] J. Ginibre, G. Velo, *The global Cauchy problem for the nonlinear Schrödinger equation revisited*, Ann. Inst. H. Poincaré, Analyse non linéaire **2** (1985), no. 4, 309–327.
- [Go] F. Golse, *From kinetic to macroscopic models*, in Kinetic equations and asymptotic theory, B. Perthame, L. Desvillettes Eds, Series in Appl. Maths. **4**, Gauthier-Villars (2000), 41–126.
- [GLPS] F. Golse, P.-L. Lions, B. Perthame, R. Sentis, *Regularity of moments of the solution of a transport equation*, J. Funct. Anal. **76** (1988), no. 1, 110–125.

- [GPS] F. Golse, B. Perthame, R. Sentis, *Un résultat de compacité pour les équations de transport et application au calcul de la limite de la valeur propre principale d'un opérateur de transport*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math. **301** (1985), no. 7, 341–344.
- [GP] F. Golse and F. Poupaud, *Limite fluide des équations de Boltzmann des semiconducteurs pour une statistique de Fermi-Dirac*, Asymptotic Anal. **6** (1992), no. 2, 135–160.
- [GVBO] A. Gnudi, D. Ventura, G. Baccarani, F. Odeh, *Two-dimensional MOSFET simulation by means of a multidimensional spherical harmonic expansion of the Boltzmann transport equation*, Solid State Electron. **36** (1993), pp. 575–581.
- [Ha] G. A. Hagedorn, *A time dependent Born-Oppenheimer approximation*, Comm. Math. Phys. **77** (1980), 1–19.
- [HJ] G. A. Hagedorn, A. Joye, *A time-dependent Born-Oppenheimer approximation with exponentially small error estimates*, Comm. Math. Phys. **223** (2001), no. 3, 583–626.
- [HMM] W. Hänsch, M. Miura-Mattausch, *The hot-electron problem in small semiconductor devices*, J. Appl. Phys. **60** (1986), 650–656.
- [Hörm] L. Hörmander, *The analysis of linear partial differential operators*, Vol. III, Ch. 18, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften, 274. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [Hors] E. Horst, *On the classical solutions of the initial value problem for the unmodified nonlinear Vlasov equation. I. General theory*, Math. Methods Appl. Sci. **3** (1981), no. 2, 229–248.
- [HH] E. Hörst, R. Hunze, *Weak solutions of the initial value problem for the unmodified nonlinear Vlasov equation*, Math. Methods Appl. Sci. **6** (1984), no. 2, 262–279.
- [IfRau] D. Iftimie, G. Raugel, *Some results on the Navier-Stokes equations in thin 3D domains*, J. Differential Equations **169** (2001), no. 2, 281–331.
- [IZL] R. Illner, P. F. Zweifel, H. Lange, *Global Existence, Uniqueness and Asymptotic Behaviour of Solutions of the Wigner-Poisson and Schrödinger-Poisson Systems*, Math. Methods Appl. Sci. **17** (1994), no. 5, 349–376.
- [Je] J. Jerome, *Analysis of charge transport. A mathematical study of semiconductor devices*, Springer, Berlin, New York, 1996.
- [Jü] A. Jüngel, *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations*, Progress in Nonlinear Differential Equations, Birkhäuser, 2001.
- [JP] A. Jüngel, R. Pinnau, *A positivity preserving numerical scheme for a fourth-order parabolic equation*, SIAM J. Num. Anal. **39** (2001), no. 2, 385–406.
- [KR] H.-C. Kaiser, J. Rehberg, *About a stationary Schrödinger-Poisson system with Kohn-Sham potential in a bounded two- or three-dimensional domain*, Nonlinear Analysis **41** (2000), 33–72.
- [K] T. Kato, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1966.
- [KMSW] M. Klein, A. Martinez, R. Seiler, X. P. Wang, *On the Born-Oppenheimer expansion for polyatomic molecules*, Comm. Math. Phys. **143** (1992), 607–639.
- [KKFR] N. C. Kluksdahl, A. M. Krivan, D. K. Ferry, and C. Ringhofer, *Self-consistent study of the resonant-tunneling diode*, Phys. Rev. B **39** (1989), 7720–7735.
- [Ku] S. Kullback, *Information Theory and Statistics*, John Wiley, 1959.
- [LL] L. Landau, E. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics. Vol. 5: Statistical Physics*, Pergamon Press, Oxford, Edinburgh, New York, 1968.
- [LaKe] E. W. Larsen and J. B. Keller, *Asymptotic solution of neutron transport problems for small mean free paths*, J. Math. Phys. **15** (1974), 75.
- [LK] C. S. Lent, D. J. Kirkner, *The quantum transmitting boundary method*, J. Appl. Phys. **67** (1990), no. 10, 6353–6359.
- [Le] C. D. Levermore, *Moment closure hierarchies for kinetic theories*, J. Stat. Phys. **83** (1996), no. 5–6, 1021–1065.
- [LiPa] P.-L. Lions, T. Paul, *Sur les mesures de Wigner*, Rev. Mat. Iberoamericana, **9** (1993), no. 3, 553–618.
- [LiPe] P.-L. Lions, B. Perthame, *Propagation of moments and regularity for the 3 dimensional Vlasov-Poisson system*, Invent. Math. **105** (1991), no. 2, 415–430.

- [Maj] A. Majorana, *Space homogeneous solutions of the Boltzmann equation describing electron-phonon interactions in semiconductors*, *Transport Theory Statist. Phys.* **20** (1991), no. 4, 261–279.
- [MM] P. Markowich, N. Mauser, *The classical limit of a self-consistent quantum-Vlasov equation in 3-D*, *Math. Meth. Mod. Appl. Sci.* **3** (1993), 109–124.
- [MMP] P. Markowich, N. Mauser, F. Poupaud, *A Wigner function approach to semiclassical limits: electrons in a periodic potential*, *J. Math. Phys.* **35** (1994), 1066–1094.
- [MRS] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer, C. Schmeiser, *Semiconductor equations*, Springer-Verlag, Vienna, 1990.
- [Mil] L. Miller, *Refraction of high-frequency waves density by sharp interfaces and semiclassical measures at the boundary*, *J. Math. Pures Appl.* (9) **79** (2000), no. 3, 227–269.
- [Mis1] S. Mischler, *On the trace problem for the solutions of the Vlasov equation*, *Comm. Partial Differential Equations* **25** (2000), no. 7-8, 1415–1443.
- [Mis2] S. Mischler, *On the initial boundary value problem for the Vlasov-Poisson-Boltzmann system*, *Comm. Math. Phys.* **210** (2000), no. 2, 447–466.
- [Mit] K. A. Mitchell, *Geometric phase, curvature, and Extrapotentials in Constrained Quantum Systems*, preprint arXiv:quant-ph/0001059, 18 Jan 2000.
- [Moc] M. S. Mock, *Analysis of mathematical models of semiconductor devices*, *Advances in Numerical Computation Series 3*, Boole Press, 1983.
- [MVL] P. Mounaix, O. Vanbésien and D. Lippens, *Effect of cathode spacer layer on the current voltage characteristics of resonant tunneling diodes*, *App. Phys. Lett.* **57** (1990), no. 15, 1517–1519.
- [Ni1] F. Nier, *A Stationary Schrödinger-Poisson System Arising from the Modelling of Electronic Devices*, *Forum Math.* **2** (1990), no. 5, 489–510.
- [Ni2] F. Nier, *Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$: the whole-space case*, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A* **123** (1993), no. 6, 1179–1201.
- [Ni3] F. Nier, *A variational formulation of Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$* , *Comm. Partial Differential Equations* **18** (1993), no. 7-8, 1125–1147.
- [Ni4] F. Nier, *The dynamics of some quantum open systems with short-range nonlinearities*, *Nonlinearity* **11** (1998), 1127–1172.
- [Oh] Y. G. Oh, *Cauchy Problem and Ehrenfest's Law of Nonlinear Schrödinger Equations with Potentials*, *J. Differential Equations* **81** (1989), no. 2, 255–274.
- [Pa] A. Pazy, *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*, *Applied Mathematical Sciences*, 44. Springer-Verlag, New York, 1983.
- [Pf] K. Pfaffmoser, *Global classical solutions of the Vlasov-Poisson system in three dimensions for general initial data*, *J. Differential Equations* **95** (1992), no. 2, 281–303.
- [Pd1] O. Pinaud, *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement: the stationary case*, *J. Math. Phys.* **45** (2004), no. 5, 2029–2050.
- [Pd2] O. Pinaud, *Analyse mathématique et numérique de quelques problèmes de transport dans les nanostructures*, thèse de doctorat, Université Paul Sabatier Toulouse III (2003).
- [Pu] R. Pinnau, *The linearized transient quantum drift diffusion model—stability of stationary states*, *ZAMM Z. Angew. Math. Mech.* **80** (2000), no. 5, 327–344.
- [PuU] R. Pinnau, A. Unterreiter, *The Stationary Current-Voltage Characteristics of the Quantum Drift Diffusion Model*, *SIAM J. Numer. Anal.* **37** (1999), no. 1, 211–245.
- [Poli] E. Polizzi, *Modélisation et simulations numériques du transport quantique balistique dans les nanostructures semi-conductrices*, thèse de doctorat, INSA Toulouse (2001).
- [PT] J. Pöschel, E. Trubowitz, *Inverse spectral theory*, Academic Press, 1987.
- [Pol] F. Poupaud, *Diffusion approximation of the linear semiconductor Boltzmann equation: analysis of boundary layers*, *Asymptotic Analysis* **4** (1991), 293–317.

- [Po2] F. Poupaud, *Mathematical theory of kinetic equations for transport modelling in semiconductors*, in *Advances in kinetic theory and computing*, Ser. Adv. Math. Appl. Sci. **22**, World Sci. Publishing, River Edge (1994), 141–168.
- [PR] F. Poupaud, C. Ringhofer, *Semiclassical limits in a crystal with external potentials and effective mass theorems*, *Comm. Partial Differential Equations* **21** (1996), no. 11-12, 1897–1918.
- [RauSe] G. Raugel, G. R. Sell, *Navier-Stokes equations on thin 3D domains. I. Global attractors and global regularity of solutions*, *J. Amer. Math. Soc.* **6** (1993), no. 3, 503–568.
- [RS] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, Academic Press, New York, San Francisco and London, 1975.
- [R] D. Robert, *Autour de l'Approximation Semi-Classique*, Birkhäuser, Boston, 1987.
- [RVV] M. Rudan, M. C. Vecchi, D. Ventura, *The hydrodynamic model in semiconductors – coefficient calculation for the conduction band of silicon*, in *Mathematical Problems in Semiconductors*, P. Marcati, P. A. Markowich, R. Natalini Eds., Pitman Res. Notes, Longman (1995), 186–214.
- [Sch] J. Schaeffer, *Global existence of smooth solutions to the Vlasov-Poisson system in three dimensions*, *Comm. Partial Differential Equations* **16** (1991), no. 8-9, 1313–1335.
- [Sel] S. Selberherr, *Analysis and simulation of semiconductor devices*, Springer, 1984.
- [SOTG] K. Souissi, F. Odeh, H. H. K. Tang, A. Gnudi, *Comparative studies of hydrodynamic and energy transport model*, *COMPEL* **13** (1994), no. 2, 439–453.
- [ST] H. Spohn, S. Teufel, *Adiabatic decoupling and time-dependent Born-Oppenheimer theory*, *Comm. Math. Phys.* **224** (2001), no. 1, 113–132.
- [Stra] R. Stratton, *Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers*, *Phys. Rev.* **126** (1962), 2002–2014.
- [Stri] R. S. Strichartz, *Restriction of Fourier transform to quadratic surfaces and decay of solutions of wave equations*, *Duke Math. J.* **44** (1977), no. 3, 705–714.
- [T] S. Teufel, *Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics*, Lecture Notes in Mathematics 1821, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2003.
- [UO] S. Ukai, T. Okabe, *On the classical solution in the large in time of the two dimensional Vlasov equation*, *Osaka J. Math.* **15** (1978), no. 2, 245–261.
- [vR] W. V. Van Roosbroeck, *Theory of flow of electrons and holes in Germanium and other semiconductors*, *Bell. Syst. Techn. J.* **29** (1950), 560–607.
- [VPGDL] R. Venugopal, M. Paulsson, S. Goasgen, S. Datta, M. S. Lundstrom, *A simple quantum mechanical treatment of scattering in nanoscale transistors*, *J. Appl. Phys.* **93** (2003), no. 9, 5613–5625.
- [VRDL] R. Venugopal, Z. Ren, S. Datta, M. S. Lundstrom, *Simulating quantum transport in nanoscale transistors: Real versus mode-space approaches*, *J. Appl. Phys.* **92** (2002), no. 7, 3730–3729
- [VW] B. Vinter, C. Weisbuch, *Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals & Applications*, Academic Press, 1991.
- [Wig] E. Wigner, *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, *Phys. Rev.* **40** (1932), 749–759.
- [Wol] S. Wollman, *Global-in-time solutions of the three-dimensional Vlasov-Poisson system*, *J. Math. Anal. Appl.* **176** (1993), no. 1, 76–91.
- [Y] K. Yajima, *Existence of solutions for Schrödinger Evolution Equations*, *Comm. Math. Phys.* **110** (1987), no. 3, 415–426.
- [ZZM] P. Zhang, Y. Zheng, N. Mauser, *The limit from the Schrödinger-Poisson to the Vlasov-Poisson Equation with General Data in One Dimension*, *Comm. Pure Appl. Math.* **55** (2002), 582–632.
- [ZF] J. R. Zhou, D. Ferry, *Modeling of quantum effects in ultrasmall HEMT devices*, *IEEE Trans. Electron. Dev.* **40** (1993), no. 2, 421–427.