



THÈSE / UNIVERSITÉ DE RENNES 1
sous le sceau de l'Université Européenne de Bretagne

pour le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE RENNES 1

Mention : Mathématiques et Applications

Ecole doctorale Matisse

présentée par

Fanny Delebecque

préparée à l'unité de recherche UMR 6625 IRMAR
Institut de recherche mathématique de Rennes
UFR de Mathématiques

**Modélisation mathématique
et numérique du transport
de gaz quantique dans des
situations de fort confinement**

**Thèse soutenue à Rennes
le 3 décembre 2009**

devant le jury composé de :

François ALOUGES

Professeur CMAP Polytechnique / rapporteur

Rémi CARLES

Chargé de recherches CNRS Montpellier / rapporteur

Naoufel BEN ABDALLAH

Professeur Inst. math. de Toulouse / examinateur

François CASTELLA

Professeur IRMAR / examinateur

Grégory VIAL

Agrégé préparateur ENS Cachan / examinateur

Florian MÉHATS

Professeur IRMAR / directeur de thèse

*Prépare-toi petit garçon,
elle s'ra longue l'expédition .*

les cowboys fringants.

Remerciements

Pour la première fois depuis le début de cette longue aventure, l'angoisse de la page blanche me prend... Ces quelques lignes sont mes dernières, vos premières, et, étrangement, ce ne sont pas les plus simples à écrire... J'en appelle donc à votre indulgence, m'excuse d'avance pour le foisonnement de points de suspension (j'ai du me contenir par la suite pour adopter une ponctuation plus conventionnelle, et ceux qui me connaissent imagineront le sacrifice que cela représente à mes yeux!)

L'heure du bilan a sonné, l'aventure est terminée, laissez-moi vous en faire le "making-off", en planter les décors, en présenter les protagonistes, les figurants, vous en faire écouter la bande-son...

L'histoire commence il y a quatre ans, jeune étudiante tout juste agrégée, je frappe timidement à la porte d'un jeune professeur que je ne connais pas pour lui demander s'il serait d'accord pour encadrer une "thèse d'analyse fonctionnelle théorique"...

Si j'en souris aujourd'hui, c'est parce que je mesure le chemin parcouru durant ces trois années, et je ne remercierai jamais assez Florian Méhats, mon directeur de thèse, d'avoir su me faire apprécier la beauté toute particulière des mathématiques appliquées à la physique et de m'y avoir totalement convertie. Directeur de thèse passionné, motivant, et toujours très disponible, il a réussi à trouver l'équilibre idéal d'un encadrement assez proche mais qui laisse suffisamment d'indépendance. Toujours à l'écoute et compréhensif dans les moments difficiles, tant mathématiques que personnels, il a fait preuve de ses grandes qualités humaines et c'est sans conteste sa vision si conviviale de la recherche qui m'a poussée à vouloir continuer dans cette voie.

Quatre ans plus tard, me voici arrivée à la dernière scène, la soutenance de thèse. Je tiens donc ici à remercier François Alouges et Rémi Carles d'avoir rapporté ma thèse. C'est un honneur pour moi qu'ils aient relu mon travail avec tant d'attention et d'enthousiasme.

Naoufel Ben Abdallah, François Castella et Grégory Vial ont accepté de faire partie de mon jury à mon grand bonheur. Un grand merci tout d'abord à Naoufel d'avoir suivi avec intérêt mes travaux depuis Toulouse. J'ai beaucoup apprécié discuter avec lui lors de conférences, de réunions de travail, et je tenais à le remercier pour sa disponibilité, sa gentillesse, son enthousiasme communicatif et ses idées précieuses!

Je remercie François Castella pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail, son soutien, sa sensibilité, ainsi que pour l'inspiration que j'ai puisée dans ses articles toujours si remarquablement rédigés.

Enfin, un grand merci à Grégory. Tour à tour moniteur dynamique, très bon pédagogue et préparateur précieux pour l'agrégation, il a su se rendre indispensable au fil des années. Il a toujours été présent pour répondre à tout genre de question,

rassurer, orienter les choix. Au cours de cette thèse, il a réussi la tâche difficile de m'apprendre de nouveaux langages de programmation, il a fait preuve d'une patience et d'une disponibilité à toute épreuve. Il a finalement réussi à me transmettre un certain goût pour la programmation et j'ai connu grâce à lui la joie que l'on ressent lorsqu'une simulation numérique difficilement obtenue finit par aboutir. Je lui dois beaucoup... Merci Greg...

Au cours de ces trois années de thèse à l'IRMAR, j'ai eu le plaisir de travailler avec son personnel administratif disponible, efficace et si agréable. Merci à eux. Au cours des journées JEANs ou des repas participatifs organisés par Monique ainsi que pendant le CANUM 2006, j'ai évolué au sein d'une équipe soudée, dynamique, ouverte... Un merci particulier à Daniel Martin pour ses dépannages informatiques, son introduction à Mélina et ses messages d'erreur si... personnels.

Mon monitorat à l'antenne Ker Lannaise de l'ENS Cachan a été pour moi une réserve d'oxygène dans les coups durs. Je remercie Arnaud et Michel de me l'avoir proposé, Rozenn pour ses petits mots, Erwan pour son écoute et ses conseils avisés, Benoît, Yanick, et bien sur Virginie... merci de me laisser maltraiter ton ordinateur ! Merci enfin à mes élèves, source intarissable de sourires, d'énergie, d'évasion, pour leur présence, pour leur générosité. Un merci particulier à Camille, il sait tout ce que je lui dois, à Mathieu-Bertrand, éternel Kerlannais, à Gael, garde du corps attentif, à Julien... Merci à toi Mika...

Et puis il y a les figurants, ceux que l'on croise un jour, au hasard d'une conf, que l'on aime retrouver... Cristobal, merci de m'avoir donné des ailes. Thomas, Élie, c'est toujours un plaisir de vous revoir...

Il y a ceux qui m'ont un jour donné l'envie de faire des maths, de voir plus loin. Merci Mme François, Merci Pcro, Merci Jacques Camus pour cette introduction à la recherche...

Il y a ceux avec qui j'ai grandi mathématiquement... les amis de promo que j'aurai toujours autant de plaisir à revoir... Merci Ludovic, Jean-Phi, Erwan, Adrien, Gilles², Matthieu, Jacques, Michel², Sophie, Aurélien, François, Stéphanie.

Merci Keven, tu es quelqu'un d'exceptionnel et je suis vraiment heureuse de te revoir le plus souvent possible... Merci Gwenola d'être si particulière à mes yeux... Merci Jimmy d'avoir eu autant de rôles. Merci à vous d'être là...

Il y a ceux qui aident sans le savoir... Merci Michel Métaireau, ma source d'évasion, merci Noir Désir, Vincent Delerm, Les cowboys fringants, Louise Attaque, Tryo avec qui j'ai passé tant de temps cet été !

Il y a ceux bien sûr que l'on croise tous les jours au labo... Merci à tous les voisins de bureau que j'ai pu avoir (il y en a quelques uns...) en particulier à Anne-Claire et Pierre. Ludo, je ne serais pas Mélinator sans toi... Merci pour cette belle épopée mélinesque...

« L'amour c'est le grand sujet, la grande préoccupation, de sept à quatre-vingt-

dix-neuf ans... On en parle, on en parle, quand ça ne va pas, sinon, on n'en parle pas. » Pendant cette thèse, il y a eu des hauts et des bas, merci à ceux qui ont été là pour me faire remonter la pente...

Mathilde (parce qu'elle le vaut bien), Clément, Sébastien, merci pour ce long retour de champagne... Yann, merci pour tout... Merci Aurélien, Viktoria, Marie, Lionel, Gweltaz, Jérémie, Coko, Mikael, Polynice... Merci Colas de m'avoir offert un "TOI"... Merci Karel, pour ces danses, pour ton écoute, pour ta fragilité... Merci François Xavier pour ces promenades étoilées... Merci Sébastien pour tous ces rocks, pour ces longues soirées si courtes... Merci Christine, ma conseillère en tout... Merci Michelle, Cécile grâce à vous j'ai compris que « Même les plus beaux plumages peuvent être une cage » ...

Jean-Romain, tu sais combien ton amitié m'est précieuse... Merci de me comprendre si bien, de toujours trouver les bons mots... Merci d'être là depuis 10 ans déjà!!!

« L'indifférence n'est pas naturelle. Elle est un apprentissage tristement nécessaire. » Merci à ceux qui, aux pires moments, se sont chargés de cet apprentissage...

Merci aux "amis par alliance", à tous ceux qui sont là aujourd'hui pour la fin de cette aventure...

Merci Charles, les années passées avec toi m'ont apporté beaucoup de bonheur, je m'en voudrai toujours de ne pas avoir été celle qu'il te fallait.

Merci à ma nouvelle belle famille de m'avoir acceptée tout de suite avec la gentillesse qui lui est naturelle. Votre présence aujourd'hui me touche.

Merci enfin à mes grands parents qui ont suivi de loin mon travail sans trop toujours comprendre, à Henri, Christine, Jean-Louis et Bruno merci pour vos petits mots, vos dessins, nos week-ends et votre soutien constant.

Merci à mes frères et soeurs, à mes parents. Les mots ne suffisent pas à exprimer tout ce que je leur dois... Je sais que vous ne comprenez pas toujours mes choix. Merci d'être là et de me faire confiance.

Richard, tu es incontestablement ma plus belle découverte au cours de cette thèse, le rayon de soleil de ces deux dernières années. Merci d'être là... Merci pour ton soutien indefectible, ta foi en moi, ta patience... Merci de souvent prendre sur toi pour supporter tous mes défauts, merci de me comprendre, de me deviner... Merci pour ces "2 minutes" supplémentaires que tu m'accordes toujours... Tu as le pouvoir de m'apaiser, de me donner confiance et de rendre magique chaque instant à tes côtés.

Merci de me rendre si forte, et de faire de moi celle que je vois dans tes yeux.

« La plupart d'entre nous préfèrent être celui qui aime. Car la stricte vérité, c'est que d'une façon profondément secrète, pour la plupart d'entre nous, être aimé est insupportable (C. Mc Cullers). »

Table des matières

Introduction Générale	13
I Quelques modèles asymptotiques pour le transport de gaz quantiques confinés	41
1 Un problème modèle	43
1.1 Mise en équation du problème physique et remise à l'échelle	45
1.2 Asymptotique formelle	47
1.3 Intérêt du modèle (1.2.11)-(1.2.12)	49
1.4 Énoncé du résultat principal et schéma de la preuve	50
1.5 Analyse des nonlinéarités V^ε et W	51
1.6 Preuve de la convergence	52
1.7 Les principales différences avec les modèles étudiés par la suite	53
2 Modélisation du transport quantique dans un nanofil	61
2.1 Introduction	63
2.1.1 The physical problem and the singularly perturbed system	63
2.1.2 Scaling of the initial data and formal limit	64
2.1.3 Statement of the main result	66
2.2 Approximation of the Poisson kernel	67
2.3 Proof of the main theorem	71
2.3.1 Energy estimate for well-prepared data	71
2.3.2 The convergence theorem	72
2.3.3 Towards a more precise approximation	74
3 Résultat de masse effective pour le transport d'un gaz quantique bidimensionnel soumis à un champ magnétique fort	77
3.1 Introduction	79
3.1.1 The singularly perturbed problem	79
3.1.2 The physical scaling	80
3.1.3 Heuristics in a simplified case	81
3.1.4 Main result	83

3.1.5	Scheme of the proof	89
3.2	The nonlinear analysis	92
3.2.1	Preliminaries	94
3.2.2	A priori estimates	94
3.2.3	Proof of Proposition 3.2.1	97
3.3	Second order averaging	101
3.3.1	Well-posedness of the limit system	102
3.3.2	Proof of Proposition 3.3.2	104
3.4	Proof of the main theorem	107
3.A	Appendix A	109
3.B	Appendix B	111
3.C	Appendix C	115
3.D	Appendix D	118
4	Modélisation du transport d'un gaz d'électrons dans une plaque fine	127
4.1	Introduction	129
4.1.1	The singular perturbation problem	129
4.1.2	From the physical problem to the singular perturbation problem.	131
4.1.3	Heuristic approach of the asymptotic model	133
4.1.4	Statement of the main results and sketch of the proof	137
4.2	Approximation by the intermediate system	139
4.2.1	Preliminaries : the functional framework	140
4.2.2	A priori estimates	143
4.2.3	Convergence towards the intermediate system	146
4.3	Time averaging of the intermediate system	150
4.4	Proof of the main theorem	164
4.A	Proof of Lemma 4.2.4	167
II	Simulation numérique du transport d'un gaz quantique stationnaire dans un nanofil	173
5	Modélisation du transport d'un gaz quantique stationnaire dans un nanofil	175
5.1	Description du dispositif à deux guides d'onde	177
5.1.1	Principe général des dispositifs à guides d'onde	177
5.1.2	Principe des systèmes ouverts	178
5.1.3	Présentation du dispositif	179
5.2	Modèle de transport quantique	181
5.2.1	Modèle de transport quantique stationnaire	181
5.2.2	Modélisation des effets électrostatiques	182
5.2.3	Calcul de densité	183

5.3	Mise en équations du problème	184
5.3.1	Équation de Schrödinger dans les guides, conditions entrantes	184
5.3.2	Équation de Schrödinger dans la zone active	187
5.3.3	Calculs de densité et de courant	189
6	Simulation numérique des guides d'ondes	191
6.1	Modélisation des guides et mise en équations	194
6.2	Méthodes numériques pour la simulation de l'équilibre thermodynamique dans les guides	197
6.2.1	Procédure générale	197
6.2.2	Méthodes numériques utilisées	197
6.2.3	Maillages	198
6.2.4	Organigramme de l'algorithme complet	201
6.3	Résultats numériques après convergence de l'algorithme	202
7	Simulation numérique de la zone active	207
7.1	Rappel des équations à résoudre et leur adimensionnement	210
7.1.1	Principe de l'algorithme, rappel des équations	210
7.1.2	Adimensionnement des équations	213
7.2	Mise en œuvre numérique	216
7.2.1	Organigramme général	216
7.2.2	Procédure de calcul de la densité et du courant	216
7.2.3	Maillages	218
7.2.4	Organigramme récapitulatif de l'algorithme	220
7.3	Résultats numériques	221
7.4	Perspectives : Résolution numérique du système de Schrödinger-Poisson	229

Introduction Générale

Ces dernières décennies, le domaine de l'électronique a été guidé par une volonté constante de réduire la taille des composants électroniques tout en accroissant leur efficacité. Obtenir des composants plus fiables, plus petits, diminuer leur consommation, leur temps de réponse, telles ont été les préoccupations des électroniciens depuis le milieu du 20^{ème} siècle. Cette volonté d'accroître leurs performances et de repousser les limites de la miniaturisation a ainsi permis l'apparition des photo-diodes, diodes laser, diodes à effet tunnel, transistors à effet de champ et autres nanocomposants électroniques. Dans cette démarche longue et coûteuse de fabrication et de tests de nouveaux composants, la modélisation mathématique et la simulation numérique tiennent une place de toute première importance. En effet, elles permettent tout d'abord de procéder à des tests "grandeur nature" à volonté afin de déterminer les jeux de paramètres optimaux : taille, température, type de semi-conducteur, dopage, potentiel appliqué, avant de lancer la production coûteuse des nanocomposants. De plus, elles améliorent la compréhension des phénomènes physiques prépondérants qui prennent place au sein de ces composants et permettent ainsi de prévoir d'éventuels comportements singuliers. De nombreux ouvrages d'électronique peuvent être consultés [24, 34, 9] à ce sujet.

Pour que ces simulations numériques remplissent pleinement leur rôle, elles doivent correspondre au mieux à la réalité et donc décrire avec une certaine exactitude les phénomènes complexes qui ont lieu. Si la phénoménologie de composants micro-électroniques tels que le transistor des années 50 se satisfait d'une description purement classique, le développement de la nanoélectronique a poussé les électroniciens à adopter une description quantique du transport électronique. La complexité des phénomènes mis en œuvre nous conduit en effet à devoir faire des choix : en premier lieu quant aux phénomènes physiques prépondérants, à prendre en compte, puis quant aux modèles mathématiques les plus adéquats pour leur analyse.

Une différence fondamentale entre la microélectronique et la nanoélectronique (dispositifs de taille inférieure à 100 nm) se situe au niveau des modèles physiques mis en jeu. Dans les composants micro-métriques, le transport des électrons peut être simulé de manière classique ou semi-classique. Dans ce cadre, l'électron est assimilé à une particule dont on connaît la trajectoire de manière exacte et les modèles raisonnables pour son analyse sont des modèles cinétiques basés sur l'équation de Boltzmann, ou encore des modèles asymptotiques tels que les modèles de dérive-

diffusion, les modèles hydrodynamiques.

Ces modèles, raisonnables jusqu'à des tailles de composants de l'ordre du micron, ne sont plus valables pour des composants plus petits, car, dès lors, les dimensions sont telles que les effets ondulatoires ne peuvent plus être négligés et la description cinétique, alors erronée, doit laisser place à une description *quantique* du transport électronique. Dans le cadre d'une telle description physique, on peut tout d'abord modéliser mathématiquement le transport des charges comme un transport *ballistique* par le couplage d'une équation de *Schrödinger* et d'une équation de *Poisson*. Cette description quantique peut, de manière équivalente, s'écrire mathématiquement par l'intermédiaire de *l'équation de Wigner*, de *l'équation de Liouville*. Ce qui différencie ces quatre modèles n'est pas la phénoménologie physique du transport de charges mais plutôt la manière de le représenter par une fonction mathématique. Ainsi, dans le cas de l'équation de Schrödinger, qui nous intéressera dans cette thèse, la quantité fondamentale est la *fonction d'onde* $\Psi(t, x)$, solution de l'équation de Schrödinger écrite sous sa forme la plus générale :

$$i\hbar\partial_t\Psi = \mathcal{H}\Psi$$

où \mathcal{H} , appelé le *Hamiltonien* est l'opérateur associé à l'énergie du système physique. En toute généralité, il s'écrit sous la forme

$$\mathcal{H} := \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V \quad (0.0.1)$$

où V est un potentiel dépendant du temps qui contient les informations liées à la physique du problème : géométrie, potentiel appliqué, interactions des électrons entre eux et avec le semi-conducteur. Il est à noter que, dans cette description, la fonction d'onde n'a pas d'interprétation physique directe, mais $|\Psi(t, x)|^2 dx$ représente la probabilité de trouver une particule au temps t dans le volume dx autour du point x .

Dans l'approche par l'équation de Wigner [46], la fonction de distribution de Wigner $W(t, x, v)$, solution de :

$$\begin{aligned} \partial_t W + v \cdot \nabla_x W + \Theta_{\hbar}[V] *_v W &= 0 \\ \Theta_{\hbar}[V] &= \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-ivy} \left(V(t, x + \frac{\hbar y}{2}) - V(t, x - \frac{\hbar y}{2}) \right) dy \end{aligned}$$

garantit un accès simple aux grandeurs physiques du système. En effet, la densité et le courant électrique par exemple sont donnés par les moments de W . Cependant, la fonction n'étant pas toujours positive, elle peut générer des difficultés sur le plan de la simulation numérique. La transformée de Wigner apparaît néanmoins enfin comme l'outil fondamental des limites semi-classiques : l'équation de Wigner peut en effet être vue comme un lien entre la mécanique classique autour de l'équation de Vlasov et la mécanique quantique [26, 31, 32, 33].

Dans le formalisme de Liouville, la quantité étudiée est la matrice de densité $\rho(t, x, y)$ qui satisfait l'équation de Liouville :

$$i\hbar \partial_t \rho = [\mathcal{H}, \rho]$$

où $[\mathcal{H}, \rho]$ représente le commutateur entre le Hamiltonien \mathcal{H} décrit par (0.0.1) et la matrice de densité ρ . Elle est reliée à la fonction d'onde solution de Schrödinger $\Psi(t, x)$ par :

$$\rho(t, x, y) = \Psi^*(t, x)\Psi(t, y)$$

et à la fonction de Wigner $W(t, x, v)$ par :

$$W(t, x, v) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-iv \cdot y} \left(\rho(t, x + \frac{\hbar y}{2}), \rho(t, x - \frac{\hbar y}{2}) \right).$$

L'inconvénient majeur de cette description balistique est double. En effet, les systèmes mis en jeu dans des conditions physiques sont complexes et coûteux numériquement, et, de plus, cette classe de modèles néglige les collisions que les charges subissent lors de leur transport. Une stratégie possible pour prendre en compte ces collisions est la mise en place de modèles qui combinent une vision classique des phénomènes physiques à laquelle on ajoute une contribution quantique qui tient compte des phénomènes ondulatoires. Ainsi, on peut définir une classe de modèles en ajoutant à des modèles classiques des termes "correctifs" quantiques, comme c'est le cas par exemple pour les modèles de dérive-diffusion quantique et certains modèles d'hydrodynamique quantique, ou encore l'équation de Wigner collisionnelle, mais on s'intéressera dans ce travail à des modèles sans collision.

Cette thèse se place dans le cadre de la modélisation du transport électronique balistique dans des nanostructures, c'est-à-dire dans des semi-conducteurs où les nuages d'électrons sont fortement confinés dans une ou plusieurs directions. On adopte pour cela une approche de type "Schrödinger-Poisson". Le transport des électrons est supposé balistique et représenté par une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger où le potentiel V d'interaction électrostatique est modélisé par l'équation de Poisson. Les nanostructures auxquelles on s'intéresse dans cette thèse (par exemple les dispositifs issus de la technologie "split-gate", voir [40]) sont constitués d'un empilement de couches d'hétérostructures semi-conductrices. Le confinement électronique est obtenu par la superposition de matériaux de bandes de conduction différentes (par exemple GaAs et AlGaAs). En effet, le saut dans les bandes de conduction agit dans ce cas sur les électrons comme un *potentiel de confinement*. L'intérêt de tels dispositifs en dimensions réduites est d'accroître fortement la mobilité des électrons et d'améliorer les performances des composants. Au passage, cela légitime la modélisation qui néglige les effets de collision des électrons. En conséquence, dans les dispositifs nanométriques qui nous intéressent dans cette thèse, les différentes directions de l'espace ne jouent pas toutes le même rôle. Ainsi, le transport des charges se fait dans une ou des directions privilégiées (par exemple dans le canal d'un transistor MOS), et le gaz est confiné dans la ou les autres directions. Il devient alors

un gaz quasiment monodimensionnel ou bidimensionnel. Le coût et la complexité numérique des problèmes tridimensionnels liés à l'équation de Schrödinger-Poisson nous poussent alors à exploiter la dissymétrie des directions spatiales pour représenter le transport des électrons confinés par des modèles à dimensionnalité réduite. Néanmoins, même si le confinement des électrons dans une (ou deux) direction(s) privilégiée(s) donne au transport un caractère quasi bidimensionnel (ou monodimensionnel), le potentiel d'interaction électrostatique induit quant à lui un potentiel qui reste tridimensionnel. En effet, la densité électronique génère par le biais de l'équation de Poisson un potentiel auto-consistant tridimensionnel. L'enjeu des travaux que nous présentons ici tient donc principalement dans l'analyse asymptotique du potentiel d'interaction électrostatique et dans l'obtention de modèles de transport à dimensionnalité réduite.

On présente dans la première partie l'analyse asymptotique du transport d'un gaz d'électrons fortement confiné dans un nanofil (confiné dans deux directions). La deuxième partie de cette thèse s'attache à l'analyse asymptotique du transport d'électrons confinés sur un plan et soumis à un champ magnétique fort uniforme dont la direction est portée par le plan de transport des électrons. Dans la troisième partie, on présente une deuxième approche de l'analyse asymptotique du confinement d'un gaz d'électrons sur un plan. Dans ce but, on travaille dans un domaine borné dans la direction du confinement et infini dans les directions de transport en introduisant de conditions de Dirichlet homogènes. Finalement, on s'intéresse au problème de la simulation numérique du transport d'un gaz d'électrons dans un nanofil. Pour ces simulations, on est amené à se restreindre à un domaine d'étude et de calcul qui est *borné*. Afin de pouvoir prendre en compte d'éventuels flux entrants et sortants de la zone de calcul, on met en place des conditions transparentes aux bords du domaine de calcul. Dans le même esprit que pour les études asymptotiques des chapitres précédents, on exploite au niveau du schéma numérique le fait que le gaz est fortement confiné dans le fil. Ainsi, on utilise une méthode de décomposition en sous-bandes [10, 18, 16] (analogue à l'approche multimodale utilisée en acoustique ou en électromagnétisme [27]).

Partie 1 : Quelques modèles asymptotiques pour le transport de gaz quantiques confinés

Chapitre 1 : Un problème modèle

On présente ici un problème modèle dont l'étude est basée sur deux idées principales qui constituent un fil conducteur pour la première partie de cette thèse. On cherche à modéliser le transport d'un gaz d'électrons bidimensionnel, c'est-à-dire fortement confiné dans une direction. Pour cela, on adopte la représentation du transport de charges par le couple fonction d'onde, potentiel d'interaction électrostatique, qui est solution du système de Schrödinger-Poisson. On modélise le confinement monodimensionnel par un potentiel de confinement qui prend des valeurs importantes en dehors du plan de transport. Dans ce cas, le transport électronique est typiquement bidimensionnel, c'est-à-dire que la densité des électrons est concentrée sur le plan de transport. Le potentiel d'interaction électrostatique, quant à lui, conserve une structure effectivement tridimensionnelle en tant que solution de l'équation de Poisson.

Dans cette section, on revient sur l'analyse d'un modèle asymptotique bidimensionnel qui approche raisonnablement, dans un cadre fonctionnel qui sera précisé, la solution du problème de Schrödinger-Poisson 3D perturbé singulièrement par le potentiel de confinement. Un tel modèle est présenté et implémenté dans [40] avec des résultats numériques en bon accord avec les simulations 3D pour un coût numérique global moindre. Une analyse asymptotique rigoureuse de ce modèle est donnée dans [14] où une hiérarchie de modèles est présentée, ainsi que la quantification de leurs erreurs. Notons par ailleurs que des résultats similaires sont démontrés dans un cas stationnaire pour un domaine borné avec des conditions entrantes dans [39].

Dans le cas de ce premier modèle, on s'intéresse au système de Schrödinger-Poisson posé dans tout l'espace. On y ajoute un potentiel de confinement qui constitue une *perturbation singulière* de l'équation de Schrödinger. Les principaux phénomènes physiques ici en jeu sont le confinement dans la variable z , le transport longitudinal et transversal ainsi que l'interaction électrostatique. Les hypothèses de confinement et un choix d'échelles adaptées à ces phénomènes sont expliqués dans le chapitre introductif de cette première partie. Ils nous amènent à étudier le système écrit dans des variables adimensionnées sous la forme suivante :

$$i\partial_t\psi^\varepsilon = -\Delta_x\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_c(z))\psi^\varepsilon + V^\varepsilon\psi^\varepsilon \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3, t > 0 \quad (0.0.2a)$$

$$\psi^\varepsilon(0, x, z) = \Psi_0(x, z) \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3 \quad (0.0.2b)$$

$$V^\varepsilon(t, x, z) = \frac{1}{4\pi r} * |\psi^\varepsilon|^2, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3, t > 0 \quad (0.0.2c)$$

où l'on a écrit l'équation de Poisson dans \mathbb{R}^3 comme la convolution avec le noyau de

Poisson 3D : $\frac{1}{4\pi r}$ avec $r(x, z) = \sqrt{|x|^2 + z^2}$.

Ici, z représente la direction de confinement, $V_c(z)$ est une fonction positive, régulière, qui tend vers l'infini quand z tend vers l'infini, et ε est un petit paramètre strictement positif qui caractérise l'extension spatiale verticale du gaz.

La donnée initiale Ψ_0 est supposée être dans l'espace d'énergie \mathcal{H} défini par :

$$\mathcal{H} := \left\{ u \in H^2(\mathbb{R}^3) \cap H_0^1(\mathbb{R}^3), \sqrt{V_c}u \in L^2(\mathbb{R}^3) \right\}$$

Dans [14], les auteurs font l'hypothèse que la donnée initiale Ψ_0 est polarisée sur un unique mode propre de l'opérateur transverse $H_z := -\partial_z^2 + V_c(z)$. Dans ce cas, ils montrent que le système (0.0.2) admet une unique solution $\psi^\varepsilon(t, x, z)$ qui peut être approchée, quand ε tend vers 0, par $e^{itH_z/\varepsilon^2}\phi(t, x, z)$ où ϕ est solution d'un modèle bidimensionnel qui couple une équation de Schrödinger 2D avec un noyau de Green modifié :

$$i\partial_t\phi = -\Delta_x\phi + W\phi, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0 \quad (0.0.3a)$$

$$W = \frac{1}{4\pi|x|} *_x (|\phi|^2), \quad x \in \mathbb{R}^2, \quad t > 0. \quad (0.0.3b)$$

La méthode utilisée consiste principalement en la projection sur les modes propres de l'opérateur de confinement H_z . Il a en effet un spectre discret grâce à l'hypothèse de comportement à l'infini du potentiel de confinement ([42] pour une preuve). Cette méthode par projection fournit une preuve de convergence globale en temps dans le cas d'une donnée initiale bien préparée. Néanmoins, dans le cas d'une donnée initiale quelconque dans l'espace d'énergie, elle ne donne qu'un résultat de convergence local en temps.

En préliminaire (Chapitre 1), afin de mettre en place les techniques qui serviront pour les chapitres suivants, nous reprenons la preuve de la convergence de (0.0.2) vers (0.0.3) dans le but de démontrer un résultat de convergence global en temps pour une donnée initiale quelconque dans l'espace d'énergie. Pour cela, on estime la différence $V^\varepsilon - W$, dans l'espace d'énergie, entre le potentiel de Poisson (0.0.2c) et son asymptotique (0.0.3b). On réécrit alors le modèle tridimensionnel de départ comme une perturbation du modèle asymptotique par la différence $V^\varepsilon - W$. Par ailleurs, on utilise des estimations sur la convolution par le noyau de Green modifié, démontrées dans [14] (annexe B). Enfin, des techniques classiques d'estimations a priori permettent d'obtenir la convergence dans le cas d'une donnée initiale quelconque dans l'espace d'énergie.

La combinaison de cette analyse asymptotique du potentiel de Poisson et d'une analyse poussée de type stabilité du modèle asymptotique attendu apparaît comme un fil conducteur dans les différents travaux effectués au cours de cette thèse. L'obtention d'estimations indépendantes de ε dans les espaces appropriés sera un deuxième point-clef des études de modèles asymptotiques conduites au cours de cette thèse. Ces arguments permettent en effet d'obtenir et d'analyser des modèles asymptotiques

pour le transport de gaz quantiques confinés dans une ou plusieurs directions (dans le cas d'un confinement en deux dimensions par exemple).

Chapitre 2 : Transport d'un gaz quantique dans un nanofil

Dans cette première partie, on s'intéresse au transport d'un gaz quantique confiné dans un nanofil, c'est-à-dire dans deux directions. On veut obtenir un modèle asymptotique à dimensionnalité réduite pour décrire le transport d'un tel gaz. Pour cela, on adapte le travail préliminaire accompli dans le cas d'un confinement monodimensionnel (confinement sur un plan) au cas présent d'un confinement bidimensionnel. On choisit de même que précédemment de représenter ce gaz d'électrons par le couple "fonction d'onde/potentiel d'interaction électrostatique" solution du système de Schrödinger-Poisson posé dans tout l'espace tridimensionnel. On modélise le confinement en perturbant ce système par un potentiel de confinement singulier, qui a la forme $\frac{1}{\varepsilon^2}V_c(\frac{z}{\varepsilon})$, où $z \in \mathbb{R}^2$. De même que dans la modélisation précédente, on suppose que la fonction V_c tend vers l'infini à l'infini ; plus précisément, on formule l'hypothèse de confinement suivante :

Hypothèse 0.0.1. *La fonction $V_c : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ appartient à $L^2_{loc}(\mathbb{R}^2)$ et il existe $\alpha > 0$ et $C > 0$ tels que*

$$V_c(z) \geq Cz^\alpha.$$

On cherche dès lors à approcher le modèle suivant :

$$i\partial_t \Psi^\varepsilon = -\Delta_{x,z} \Psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} V_c\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) \Psi^\varepsilon + \mathbb{V}^\varepsilon \Psi^\varepsilon, \quad (x, z) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2, \quad t > 0 \quad (0.0.4a)$$

$$\mathbb{V}^\varepsilon = \frac{1}{4\pi r} * (|\Psi^\varepsilon|^2), \quad (x, z) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2, \quad t > 0, \quad (0.0.4b)$$

où $r(x, z) = \sqrt{x^2 + |z|^2}$.

Dans cette situation, du fait du caractère typiquement monodimensionnel du transport, on a pour but de montrer la convergence de (0.0.4) vers un modèle qui fasse intervenir une équation de Schrödinger monodimensionnelle. En effet, le terme singulier de confinement $\frac{1}{\varepsilon^2}V_c(\frac{z}{\varepsilon})$ dans (0.0.4a) induit une concentration de la densité sur l'axe $z = 0$. On s'attend donc, lorsque que le paramètre ε tend vers zéro, à ce que la densité prenne la forme d'une densité linéique multipliée par $\delta_{z=0}$:

$$|\Psi(t, x, z)|^2 \sim \int_{\mathbb{R}^2} |\Psi(t, x, z')|^2 dz' \delta_{z=0}.$$

Néanmoins, la différence cruciale avec le phénomène de transport sur le plan étudié en préliminaire est le comportement du potentiel de Poisson. En effet, dans le cas du transport sur un plan (bidimensionnel), le potentiel de Poisson avait un comportement régulier lorsque ε tendait vers zéro. Dans le cas présent du transport dans un fil (monodimensionnel dans la direction x), des problèmes d'intégrabilité

surviennent du fait que $x \in \mathbb{R}$. Le noyau de Poisson modifié a alors le comportement asymptotique suivant :

$$\mathbb{V}^\varepsilon(t, x, z) \sim -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |\Psi(t, x, z')|^2 dz' \log(\varepsilon).$$

Ce comportement nous incite à faire des choix d'échelles différents pour les fonctions inconnues et modifie considérablement les raisonnements en jeu. Un changement d'échelle et de fonction inconnue adapté nous amène à étudier le système suivant :

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = -\partial_x^2 \psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} H_z \psi^\varepsilon + \frac{1}{|\log \varepsilon|} V^\varepsilon \psi^\varepsilon, \quad (0.0.5a)$$

$$V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} * |\psi^\varepsilon|^2, \quad (0.0.5b)$$

$$\psi^\varepsilon(0, x, z) = \psi_0^\varepsilon(x, z), \quad (0.0.5c)$$

où $r^\varepsilon(x, z) = \sqrt{x^2 + \varepsilon^2 |z|^2}$.

Les estimations classiques d'énergie et de conservation de la masse pour l'équation de Schrödinger ne suffisent pas ici à fournir toutes les estimations nécessaires pour démontrer la convergence de la non-linéarité de Poisson vers son asymptotique dans l'espace d'énergie

$$\mathcal{H} := \{u \in H^1(\mathbb{R}^3), \sqrt{V_c(z)}u \in L^2(\mathbb{R}^3)\}. \quad (0.0.6)$$

Dans le cas d'un potentiel de confinement vérifiant l'hypothèse 0.0.1, il est connu que le spectre de l'opérateur de confinement $H_z = -\partial_z^2 + V_c(z)$ est alors discret, et l'on peut noter $(\chi_m)_{m \geq 1}$ la collection de ses fonctions propres associées aux valeurs propres $(E_m)_{m \geq 1}$. Dans le cas général, on n'a pas dans ce problème d'accès à des estimations a priori dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ pour $\partial_x \psi^\varepsilon$, contrairement au cas du problème modèle. Néanmoins, dans le cas particulier où la donnée initiale est concentrée sur le premier mode propre de l'opérateur de confinement H_z , l'estimation de $\partial_x \Psi^\varepsilon$ dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ qui nous faisait défaut est vérifiée. On peut alors établir un résultat de convergence vers un modèle qui prend la forme d'une équation de Schrödinger monodimensionnelle nonlinéaire. Il est à noter que la nonlinéarité asymptotique prend la forme d'une nonlinéarité cubique, et devient par conséquent *locale*. On démontre ainsi le résultat suivant :

Théorème 0.0.2. *Considérons une famille $(\psi_0^\varepsilon)_{\varepsilon > 0}$ uniformément bornée dans l'espace d'énergie \mathcal{H} défini par (0.0.6) et qui converge dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ vers ψ_0 . Si de plus les fonctions ψ_0^ε sont polarisées sur le premier mode propre χ_1 , associé à la valeur propre E_1 de l'opérateur H_z i.e :*

$$\|(H_z - E_1)^{1/2} \psi_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C \varepsilon.$$

Alors, il existe $C > 0$ tel que la solution ψ^ε du système (0.0.5) vérifie :

$$\|\partial_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C, \text{ indépendamment de } \varepsilon > 0 \text{ et } t \in \mathbb{R}, \quad (0.0.7)$$

et, pour tout $T > 0$, on a le résultat de convergence suivant

$$\left\| \psi^\varepsilon(t, x, z) - e^{-itE_1/\varepsilon^2} \varphi(t, x) \chi_1(z) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \text{ uniformément sur } [-T, T],$$

où $\varphi(t, x)$ résout l'équation de Schrödinger nonlinéaire

$$i\partial_t \varphi = -\partial_x^2 \varphi + \frac{1}{2\pi} |\varphi|^2 \varphi, \quad \varphi(0, x) = \int_{\mathbb{R}} \psi_0(x, z) \chi_1(z) dz. \quad (0.0.8)$$

Les méthodes utilisées pour démontrer ce théorème sont assez proches de celles utilisées pour prouver le résultat préliminaire (cas du confinement sur un plan). Cependant, quelques différences interviennent : une première est l'étude asymptotique lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ de la solution de l'équation de Poisson remise à l'échelle (0.0.5b), qui pose, du fait que x est une variable réelle, de nouveaux problèmes d'intégrabilité. On démontre un tel développement asymptotique pour une fonction ψ^ε dans l'espace d'énergie \mathcal{H} dans la proposition (2.2.1).

Une deuxième différence a trait à l'estimation d'énergie que l'on utilise ici. En effet, l'hypothèse que l'on fait de polarisation sur le premier mode propre de l'opérateur H_z a deux conséquences principales. Elle permet tout d'abord, combinée à la conservation de l'énergie et la conservation de la masse, d'obtenir une estimation indépendante de ε de $\partial_x \psi^\varepsilon(t)$ pour tout temps $t \in \mathbb{R}$ (l'estimation (0.0.7)). Par ailleurs, elle fournit une preuve du fait que, si la donnée initiale est polarisée sur le premier mode propre de l'opérateur H_z , alors, pour tout temps $t > 0$, la projection de ψ^ε sur les autres modes propres de H_z est négligeable quand ε tend vers 0.

On peut faire une dernière remarque concernant ce résultat. En effet, comme nous l'avons dit, le point crucial ici est que l'on ne dispose pas d'estimation $L^2(\mathbb{R}^3)$ indépendante de ε pour $\partial_x \psi^\varepsilon(t)$ au cours du temps. L'hypothèse de polarisation sur le premier mode propre de H_z est un cas particulier où une telle estimation existe. Ce théorème peut être étendu à tous les cas où l'estimation (0.0.7) est vérifiée. Dans ce cas, le modèle limite prend la forme d'un système infini d'équations de Schrödinger monodimensionnelles nonlinéaires couplées.

Chapitre 3 : Un théorème de masse effective pour le transport d'un gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un champ magnétique fort

Dans cette deuxième partie, on reprend le problème du transport d'un gaz quantique bidimensionnel et on y ajoute un champ magnétique uniforme fort dont la direction est portée par le plan de transport. Le but de ce chapitre est donc de comprendre l'importance des effets du potentiel magnétique lorsque le facteur ε qui représente l'échelle de l'extension spatiale du gaz bidimensionnel dans la direction de confinement z tend vers 0. Les variables de l'espace jouent des rôles différents : z est la direction de confinement, (x, y) sont les directions de transport, et on suppose par ailleurs que le champ magnétique est porté par la direction de transport y : $\mathbf{B} = \frac{B}{\varepsilon} e_y$. Les particules chargées, soumises aux effets couplés du potentiel de confinement, du champ magnétique et du potentiel d'interaction électrostatique sont alors représentées par le couple fonction d'onde-potential d'interaction électrostatique, solution dans \mathbb{R}^3 du système (0.0.2) auquel on ajoute un potentiel magnétique. Ce potentiel est choisi en accord avec un choix de jauge de Landau. Le système peut alors être écrit sous la forme :

$$i\partial_t \Psi^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} (-\partial_z^2 + V_c(z)) \Psi^\varepsilon + \left(i\partial_x - \frac{Bz}{\varepsilon} \right)^2 \Psi^\varepsilon - \partial_y^2 \Psi^\varepsilon + V^\varepsilon \Psi^\varepsilon, \quad (0.0.9a)$$

$$V^\varepsilon(t, x, y, z) = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} * |\Psi^\varepsilon|^2, \quad (0.0.9b)$$

où $r^\varepsilon(x, y, z) = \sqrt{x^2 + y^2 + \varepsilon^2 z^2}$ et (x, y, z) varie dans \mathbb{R}^3 entier. Le choix des échelles physiques utilisées pour aboutir à ce modèle est expliqué en début du chapitre 3, puis, après avoir obtenu un modèle formel de manière heuristique dans le cas particulier d'un potentiel de confinement harmonique, on met en place des hypothèses de confinement sur la fonction $V_c(z)$ et des hypothèses concernant le spectre de l'opérateur transverse $H_z := -\partial_z^2 + B^2 z^2 + V_c(z)$ de domaine $\mathcal{D}(H_z) := \{u \in L^2(\mathbb{R}), H_z u \in L^2(\mathbb{R})\}$ qui permettent de mener à bien une analyse asymptotique rigoureuse de ce système.

En ce qui concerne le potentiel de confinement, la fonction $V_c(z)$ est supposée *régulière, positive et paire, au moins harmonique* mais sa croissance à l'infini reste polynomiale :

$$a^2 |z|^2 \leq V_c(z) \leq C |z|^M \quad \text{pour } |z| \geq 1, \quad (0.0.10)$$

où $a > 0$ et $M > 0$. À ces hypothèses s'en ajoutent d'autres, plus techniques qui permettent la mise en place d'une échelle d'espaces de Sobolev modifiés. Ces espaces sont adaptés aux opérateurs différentiels présents dans ce problème. Ils sont inspirés des espaces de Sobolev modifiés qui constituent le cadre fonctionnel pour la moyennisation en temps des équations de Schrödinger non linéaires fortement confinées présentée dans [12].

L'opérateur H_z a dans ce cas un spectre discret, et l'on note $(E_p)_{p \geq 1}$ ses valeurs propres, ainsi que $(\chi_p)_p$ une famille de vecteurs propres associés. On fait l'hypothèse qu'il existe $C > 0$ et $n_0 \in \mathbb{N}$ tels que

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad E_{p+1} - E_p \geq C(1+p)^{-n_0}. \quad (0.0.11)$$

Il est à noter que cette hypothèse est vérifiée dans le cas très physique d'un potentiel de confinement $V_c(z)$ harmonique, ou alors pour certaines "petites perturbations" du potentiel harmonique. Elle est aussi vérifiée dès que la croissance du potentiel est surharmonique.

Ces hypothèses permettent alors la mise en place d'un modèle asymptotique pour le système (0.0.9) lorsque ε tend vers zero ainsi qu'un cadre fonctionnel dans lequel on peut conduire une analyse rigoureuse de cette limite. On démontre ainsi la convergence, lorsque ε tend vers zero, du système (0.0.9) vers un système infini d'équations de Schrödinger bidimensionnelles couplées qui font apparaître deux principales dynamiques :

- dans la direction y , comme on l'attendait, la dynamique n'est pas modifiée par la présence du champ magnétique
- dans la direction x en revanche, les effets du champ magnétique prennent la forme d'une multiplication du Laplacien en x par un facteur α_p qui ne dépend que de p , V_c et B :

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad \alpha_p = 1 - \sum_{q \neq p} \frac{\langle 2Bz\chi_p\chi_q \rangle^2}{E_q - E_p}, \quad (0.0.12)$$

où $\langle f \rangle := \int_{\mathbb{R}} f(z) dz$. Le coefficient α_p joue, dans le modèle asymptotique, le rôle de l'inverse d'une *masse effective*.

Ce modèle asymptotique s'écrit sous la forme :

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad i\partial_t \phi_p = -\alpha_p \partial_x^2 \phi_p - \partial_y^2 \phi_p + W \phi_p, \quad (0.0.13a)$$

$$\phi_p(t=0) = \langle \Psi_0 \chi_p \rangle, \quad (0.0.13b)$$

$$W = \frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2}} * \left(\sum_{p \in \mathbb{N}} |\phi_p|^2 \right). \quad (0.0.13c)$$

et, si on prend les notations suivantes pour approcher ψ^ε :

$$\Phi(t, x, y, z) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \phi_p(t, x, y) \chi_p(z),$$

$$\Psi_{app}^\varepsilon(t, x, y, z) := e^{-itH_z/\varepsilon^2} \Phi = \sum_{p \in \mathbb{N}} e^{-itE_p/\varepsilon^2} \phi_p(t, x, y) \chi_p(z).$$

on peut alors formuler le résultat de convergence suivant :

Théorème 0.0.3. *Sous les hypothèses (0.0.10) et (0.0.11), considérons Ψ_0 dans l'espace*

$$B^1 := \left\{ a \in H^1(\mathbb{R}^3), \sqrt{V_c}u \in L^2(\mathbb{R}^3) \right\}.$$

Alors, pour tout $\varepsilon \in (0, 1]$, si $\Psi^\varepsilon \in C^0([0, +\infty), B^1)$ est l'unique solution du problème initial (0.0.9),

(i) le système limite (0.0.13) admet une unique solution maximale

$\Psi_{app}^\varepsilon \in C^0([0, T_{max}), B^1)$, où $T_{max} \in (0, +\infty]$ ne dépend pas de ε , et, si $T_{max} < +\infty$ alors $\|\Psi_{app}^\varepsilon(t, \cdot)\|_{B^1} \rightarrow +\infty$ lorsque $t \rightarrow T_{max}$.

(ii) pour tout $T \in (0, T_{max})$, on a la convergence suivante :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\Psi^\varepsilon - \Psi_{app}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} = 0.$$

Les méthodes employées pour démontrer ce théorème combinent plusieurs types d'arguments. Tout d'abord, on fait appel à des estimations démontrées dans le résultat préliminaire pour étudier la nonlinéarité de Poisson. Ensuite, pour mettre en place un cadre fonctionnel adapté aux opérateurs intervenant dans l'équation (0.0.9), on utilise des résultats de [12] obtenus par des arguments de calcul semi-classique. Enfin, on utilise des méthodes de moyennisation d'ordre 2 en temps long qui permettent de traiter les oscillations dues au terme de couplage entre les directions x et z induit par le potentiel magnétique.

La première étape de la preuve consiste en la mise en place du cadre fonctionnel adapté à l'étude non-linéaire et l'obtention d'estimations a priori indépendantes de ε dans ce cadre.

Ensuite, on s'inspire de l'analyse asymptotique faite dans [19, 12] des équations de Schrödinger non linéaires de la forme

$$i\partial_t u^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} H_z u^\varepsilon - \Delta_{x,y} u^\varepsilon + \mathcal{F}(|u^\varepsilon|^2) u^\varepsilon$$

(telles que l'équation de Gross-Pitaevskii par exemple), dans le cas où \mathcal{F} est une nonlinéarité qui dépend de u^ε de manière *locale*. La stratégie adaptée à ce type de problème est alors de filtrer les oscillations dues au terme $\frac{1}{\varepsilon^2} H_z$, sans projeter sur les modes propres de H_z . On évite ainsi les problèmes de convergence de sommes et l'apparition de petits dénominateurs. On est alors ramené à l'analyse du système filtré :

$$i\partial_t \Phi^\varepsilon = -\frac{2B}{\varepsilon} \left(e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \right) (i\partial_x \Phi^\varepsilon) - \Delta_{x,y} \Phi^\varepsilon + F\left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \Phi^\varepsilon(t)\right), \quad (0.0.14)$$

où on introduit la fonction nonlinéaire :

$$(\tau, u) \mapsto F(\tau, u) = e^{i\tau H_z} \left(\frac{1}{4\pi r^\varepsilon} * |e^{-i\tau H_z} u|^2 \right) e^{-i\tau H_z} u. \quad (0.0.15)$$

La troisième étape est une étape d'approximation. En effet, on y approche le système filtré (0.0.14)-(0.0.15) par un système intermédiaire dans lequel la nonlinéarité

de Poisson V^ε est remplacée par son asymptotique W qui est celle obtenue dans [14], et étudiée en modèle préliminaire (0.0.3b). Elle présente en effet l'avantage de ne pas dépendre de la variable z et donc d'être transparente pour l'opérateur de filtration e^{itH_z/ε^2} . On obtient ainsi une nonlinéarité approchée

$$(\tau, u) \mapsto F_0(\tau, u) := \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} *_{x,y} \langle |e^{-i\tau H_z} u|^2 \rangle u, \quad (0.0.16)$$

et le système intermédiaire auquel on s'intéresse dorénavant est le système (0.0.14) où F est remplacée par F_0 définie dans (0.0.16). On aboutit ainsi finalement à l'étude asymptotique, lorsque ε tend vers zéro, d'un problème du type

$$i\partial_t u = \frac{1}{\varepsilon} f\left(\frac{t}{\varepsilon^2}\right) u(t) + g(u(t)) \quad (0.0.17)$$

avec

$$f(\tau) = -2Be^{i\tau H_z} z e^{-i\tau H_z} i\partial_x \quad \text{et} \quad g(u) = -\Delta_{x,y} u + F_0(u).$$

On exploite alors dans cette dernière étape les techniques de moyennisation des EDO présentées dans [43] et basées sur l'utilisation d'une certaine périodicité en temps du terme f . Ici, contrairement au cas présenté dans [12], le champ magnétique induit un terme à une échelle intermédiaire $\frac{1}{\varepsilon}$ entre la nonlinéarité (à l'échelle 1) et le terme de confinement (à l'échelle $\frac{1}{\varepsilon^2}$) qui nous oblige à pousser les techniques de moyennisation en temps long à l'ordre 2.

Il est à noter pour conclure que la notion de masse effective évoquée ici est assez différente de la définition usuelle. Néanmoins, on a obtenu à la limite un système homogénéisé avec un terme de type "masse effective" dans la direction x . Celui-ci se trouve être assez semblable à ceux obtenus dans l'analyse du transport de gaz électroniques dans des réseaux cristallins, et il est intéressant de remarquer que les échelles utilisées dans [1, 44] dans le cas de potentiels périodiques forts sont équivalentes à celles mises en place dans ce travail.

Chapitre 4 : Modélisation asymptotique du transport d'un gaz d'électrons dans une plaque fine.

Dans cette partie, on reprend, dans une modélisation différente, le problème du transport d'un gaz d'électrons confiné sur un plan exposé en problème préliminaire. On représente le gaz quantique par le couple fonction d'onde-potentiel d'interaction électrostatique solution d'une équation de Schrödinger-Poisson dans l'espace \mathbb{R}^3 . On ajoute une perturbation singulière pour modéliser le confinement. Néanmoins, des différences apparaissent avec les modèles précédents. En effet, dans l'étude du problème préliminaire, ainsi que dans [14, 39], on posait le problème dans l'espace complet \mathbb{R}^3 , et l'on faisait des choix d'échelles qui amenaient à étudier le problème :

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi^\varepsilon &= -\Delta_x\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_c(z))\psi^\varepsilon + V^\varepsilon\psi^\varepsilon & t > 0, (x, z) \in \mathbb{R}^3 \\ -\partial_z^2V^\varepsilon - \varepsilon^2\Delta_xV^\varepsilon &= \varepsilon|\psi^\varepsilon|^2, & (x, z) \in \mathbb{R}^3. \end{aligned}$$

Ici, on modélise le confinement dans la plaque fine représentée par le domaine $\Omega_\varepsilon = [0, \varepsilon] \times \mathbb{R}^2$ en ajoutant au potentiel de confinement des conditions de Dirichlet homogènes sur les plans $z = 0$ et $z = \varepsilon$. L'objectif est d'étudier ce qui se passe lorsque l'on remplace le potentiel de confinement "doux" par un potentiel de type "mur infini". Dans ce cas, pour éviter d'avoir un modèle asymptotique trivial, on fait un choix d'échelles correspondant à de fortes densités d'ordre $\mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$. Par ailleurs, pour des raisons techniques (un argument de compacité est utilisé dans la preuve), on ajoute un potentiel de confinement $V_1(x)$ à la même échelle que le transport en x . Les choix d'échelles d'énergie adaptées sont expliqués dans le chapitre introductif de cette partie et rappelés dans le chapitre 4. Dans les nouvelles variables adimensionnées, le problème dans le domaine borné

$$\Omega := \mathbb{R}^2 \times (0, 1)$$

s'écrit :

$$i\partial_t\psi^\varepsilon = (-\Delta_x + V_1(x))\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_2(z))\psi^\varepsilon + V^\varepsilon\psi^\varepsilon, \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (0.0.18a)$$

$$\psi^\varepsilon(t, x, 0) = \psi^\varepsilon(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2 \quad (0.0.18b)$$

$$-\partial_z^2V^\varepsilon(t) - \varepsilon^2\Delta_xV^\varepsilon(t) = |\psi^\varepsilon(t)|^2, \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (0.0.18c)$$

$$V^\varepsilon(t, x, 0) = V^\varepsilon(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2. \quad (0.0.18d)$$

On démontre dans cette partie que le potentiel de Poisson défini par (0.0.18c)-(0.0.18d) a un comportement asymptotique donné par la solution W du système obtenu en faisant tendre ε formellement vers 0 dans (0.0.18c) :

$$-\partial_z^2W(t, \cdot) = |\psi^\varepsilon(t, \cdot)|^2, \quad t \geq 0, (x, z) \in \Omega \quad (0.0.19)$$

$$W(t, x, 0) = W(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2. \quad (0.0.20)$$

Le potentiel limite W est alors donné explicitement pour $t > 0$ et $(x, y, z) \in \Omega$ par :

$$W(|\psi^\varepsilon|^2)(t, x, z) = \int_0^1 [z(1 - z') - (z - z')\mathbb{1}_{z' \leq z}] |\psi^\varepsilon(t, x, z')|^2 dz'. \quad (0.0.21)$$

Dès lors apparaît une différence cruciale avec le modèle étudié en préliminaire, dans lequel l'asymptotique du potentiel de Poisson, donnée par (0.0.3b) ne dépendait plus de z . Ceci avait l'avantage de garantir que le terme non linéaire d'interaction électrostatique ne subissait pas le filtrage par l'opérateur de confinement H_z .

Dans le cas présent, le potentiel asymptotique *dépend effectivement de z* . Cette dépendance en z change radicalement la nature de l'analyse asymptotique à mener. En effet, après filtration des oscillations dues à l'opérateur de confinement en z , il reste désormais des termes oscillant rapidement en temps.

Comme précédemment, une première étape consiste à remplacer le système de départ (0.0.18) par un système dans lequel on a remplacé l'équation de Poisson (0.0.18c)-(0.0.18d) par son asymptotique (0.0.19)-(0.0.20), ou, de manière équivalente (0.0.21) :

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = -H_x \psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} H_z \psi^\varepsilon + W(|\psi^\varepsilon|^2) \psi^\varepsilon, \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (0.0.22)$$

$$\psi^\varepsilon(t, x, 0) = \psi^\varepsilon(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2 \quad (0.0.23)$$

où les opérateurs H_x et H_z sont définis par

$$H_x := -\Delta_x + V_1(x), \quad \text{de domaine } \mathcal{D}(H_x) := \{u \in H^2(\mathbb{R}^2), V_1 u \in L^2(\mathbb{R}^2)\} \quad (0.0.24)$$

$$H_z := -\partial_z^2 + V_c(z), \quad \text{de domaine } \mathcal{D}(H_z) := H^2(0, 1) \cap H_0^1(\Omega). \quad (0.0.25)$$

Dans ce cadre, H_z a un spectre *discret* et on définit la famille de ses éléments propres $(\chi_m)_{m \geq 1}$ associés aux valeurs propres $(E_m)_{m \geq 1}$.

De même que dans les problèmes précédents, on commence par *filtrer les oscillations* rapides en temps dues au terme de confinement $\frac{1}{\varepsilon^2} H_z$ et on obtient alors un système de la forme :

$$\phi^\varepsilon(t, x, z) = e^{itH_z/\varepsilon^2} \psi^\varepsilon(t, x, z), \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (0.0.26a)$$

$$i\partial_t \phi^\varepsilon(t) = H_x \phi^\varepsilon(t) + G\left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(t)\right), \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (0.0.26b)$$

$$(\tau, u) \mapsto G(\tau, u) := e^{i\tau H_z} W(|e^{-i\tau H_z} u|^2) e^{-i\tau H_z} u. \quad (0.0.26c)$$

Le point-clef dans ce problème est alors de définir un cadre fonctionnel adapté tel que si u est dans cet espace, alors la fonction $\tau \mapsto G(\tau, u)$ est *presque-périodique en temps* à valeurs dans cet espace. Cette notion de presque périodicité est le cadre adéquat ici, car elle permet de définir rigoureusement les moyennes en temps long et donc de donner un sens, dans le problème qui nous intéresse ici, à :

$$G_{av}(u) = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T G(\tau, u) d\tau.$$

En s'inspirant des arguments de moyennisation en temps long développés dans [12] et dans [43], on montre alors que le modèle de départ converge vers le modèle moyenné en temps :

$$i\partial_t\phi(t, x, z) = H_x\phi(t, x, z) + G_{av}(\phi). \quad (0.0.27)$$

Un calcul, qui prend tout son sens dans le cadre des fonctions presque-périodiques donne par ailleurs :

$$G_{av}(u) = \sum_{E_p+E_q=E_r+E_s} \alpha_{pqrs} \overline{u_q} u_r u_s \chi_p \quad (0.0.28)$$

où, pour tout $k \geq 0$, $u_k := \langle u, \chi_k \rangle_{L^2(0,1)}$ et

$$\alpha_{pqrs} = \int_0^1 \int_0^1 [z(1-z') - (z-z')\mathbf{1}_{z' \leq z}] \chi_r(z') \chi_q(z') \chi_s(z) \chi_p(z) dz' dz. \quad (0.0.29)$$

On énonce finalement le résultat de convergence suivant, dans lequel le modèle final n'est autre que la projection sur les modes propres de H_z de (0.0.27).

Théorème 0.0.4. *On considère une donnée initiale Ψ_0 dans*

$$\mathcal{X} := \{u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega), V_1 u \in L^2(\Omega)\}$$

muni de la norme :

$$\|u\|_{\mathcal{X}}^2 := \|u\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|V_1 u\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Alors, il existe $T > 0$ ne dépendant que de $\|\Psi_0\|_{\mathcal{X}}$ tel que

1. *Le système de Schrödinger-Poisson (0.0.18) avec la donnée initiale Ψ_0 admet une unique solution notée $(\psi^\varepsilon, V^\varepsilon)$, qui est bornée dans $\mathcal{C}([0, T], \mathcal{X})$ uniformément en ε .*

2. *Considérons le système infini suivant*

$$i\partial_t \varphi_p = -\Delta \varphi_p + \sum_{(q,r,s) \in \Lambda_p} \overline{\varphi_q} \varphi_r \varphi_s \alpha_{pqrs} \quad \forall t > 0, x \in \mathbb{R}^2 \quad (0.0.30a)$$

$$\varphi_p(0, x) = \int_0^1 \Psi_0(t, x, z) \chi_p(z) dz, \quad x \in \mathbb{R}^2 \quad (0.0.30b)$$

où $\Lambda_p = \{(q, r, s), E_p + E_q = E_r + E_s\}$, α_{pqrs} est défini par (0.0.29). Il admet une unique famille solution $(\varphi_p)_{p \geq 0} \in \mathcal{C}([0, T], \mathcal{D}(H_x))$, où $\mathcal{D}(H_x)$ est défini par (0.0.24).

3. *Si enfin ψ^ε et $(\varphi_p)_{p \geq 0}$ désignent les solutions respectives de (0.0.18) et (0.0.30), alors le résultat de convergence suivant est vérifié :*

$$\left\| \psi^\varepsilon(t, x, z) - \sum_{p \geq 0} \varphi_p(t, x) e^{-itE_p/\varepsilon^2} \chi_p(z) \right\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Pour démontrer ce résultat de convergence asymptotique, la première étape consiste à analyser l'asymptotique du potentiel de Poisson pour définir une première approximation du système initial. Elle repose sur des estimations a priori de type "régularité elliptique" pour l'équation de Poisson (0.0.18c)-(0.0.18d). Ces estimations permettent de démontrer la convergence du système (0.0.18) vers le système (0.0.26) dans un espace plus régulier que l'on note \mathcal{Y} uniquement. Cette convergence nécessite en effet la perte de deux degrés de régularité.

Par la suite, l'argument-clé est bien sûr la propriété de presque périodicité de la nonlinéarité G définie par (0.0.26c), et l'analyse du système intermédiaire (0.0.26). Pour cela, on adapte les preuves de [12]. Dans cet article, les auteurs se placent dans le cadre d'une équation de Schrödinger nonlinéaire dont la nonlinéarité est de la forme $\mathcal{F}(u)$ avec \mathcal{F} une fonction régulière. Ici, contrairement à [12], la nonlinéarité est non locale en u .

La propriété de presque périodicité de G permet alors d'une part de définir sa moyenne en temps long G_{av} et ainsi de donner un sens à la formule (0.0.28). Elle fait par ailleurs hériter le caractère local Lipschitz de G à sa moyenne G_{av} et ainsi permet une étude simple du système limite (0.0.27). Enfin, on adapte les arguments de [12] pour démontrer le résultat de convergence de (0.0.26) vers (0.0.27), dans \mathcal{Y} une fois de plus, deux dérivées étant nécessaires pour aboutir à cette convergence. On conclut alors à la convergence dans \mathcal{X} de (0.0.18) vers (0.0.27) par un argument de régularisation.

Il est cependant à noter que, bien que l'on travaille ici localement en temps tout au long de la preuve, on démontre un résultat où le temps d'existence T_0 ne dépend bien sûr pas de ε . Cette uniformité par rapport à ε est un argument que l'on doit garder en tête tout au long de cette preuve, dans les différentes preuves d'existence locale en temps pour les différents systèmes intermédiaires.

Un cas particulier intéressant pourra être testé numériquement. En effet, dans le cas particulier où le potentiel $V_2(z)$ est nul, alors les valeurs propres valent

$$E_p := p^2 \pi^2.$$

On voit alors que le système (0.0.30) admet un sous système isolé de 3 équations constituées uniquement des modes 1, 5 et 7.

Partie 2 : Simulations numériques du transport de gaz quantique stationnaire dans un nanofil

Cette section aborde une problématique quelque peu différente : la simulation effective du transport d'un gaz d'électrons dans un nanocomposant de type nanofil. Pour mettre en place une telle simulation, on doit bien sûr se restreindre à un domaine de calcul qui soit borné. Dans les structures nanométriques, il est naturel de se placer dans une zone privilégiée du composant, appelée *zone active* où se mettent en place les phénomènes de transport des charges ainsi que leurs interférences.

Néanmoins, dans les situations physiques issues de l'électronique, ce domaine d'étude ne peut être considéré comme isolé du monde extérieur. Il est en effet nécessaire d'envisager des échanges de charges entre la zone active et l'extérieur : le composant électronique est alors modélisé par un domaine *ouvert*. Il est représenté dans cette modélisation par une *zone active* reliée à des *réservoirs d'électrons* par des *zones d'accès* au travers desquelles ont lieu des *échanges de charges*, encore appelées *guides d'ondes*.

Dans les guides d'ondes, les électrons sont proches de l'état d'équilibre thermodynamique et les phénomènes de conduction liés aux échanges entre les guides d'ondes et la zone active ne représentent qu'une perturbation négligeable pour l'équilibre du guide d'ondes et du réservoir qui lui est associé. Par conséquent, les électrons dans les guides et les réservoirs sont supposés se trouver dans un mélange statistique d'états qui obéit à la distribution de Fermi-Dirac.

Dans la zone active, le transport d'électrons partiellement confinés ainsi que leurs interactions électrostatiques sont quant à eux raisonnablement modélisés par *un système de Schrödinger-Poisson*. Ce système a été très étudié (notamment [20, 28, 5, 35, 36, 37]), mais en général dans des cas où la zone active est *isolée*.

Ici, on limite le domaine de calcul effectif par la mise en place de conditions aux limites au niveau des interfaces entre la zone active et les guides d'onde afin que des flux entrants et sortants soient admis. Cette problématique a fait l'objet de plusieurs travaux dans le cas dépendant du temps : [8, 6, 4, 3, 2]. L'objectif est, en général, de mettre en place des conditions aux limites appelées *absorbantes* qui laissent passer les ondes sortantes du domaine d'étude pour éviter les réflexions artificielles aux frontières du domaine d'étude. Dans un souci d'application au domaine de l'électronique, la présence d'éventuelles sources extérieures échangeant des particules avec le domaine d'étude est prise en compte dans [15] pour l'écriture de conditions aux limites qui sont alors appelées *transparentes*. Ces conditions aux limites transparentes sont obtenues grâce à une idée générale commune aux cas stationnaire et instationnaire. Elle passe par la résolution exacte de l'équation de Schrödinger dans le domaine extérieur (ici les guides d'ondes) grâce à une hypothèse essentielle qui est que les sources sont stationnaires. Dans le cadre dépendant du temps, l'obtention de telles conditions aux bords nécessite l'introduction de l'opérateur *Dirichlet-to-Neumann* reliant la fonction d'onde et sa dérivée au bord par l'intermédiaire d'une

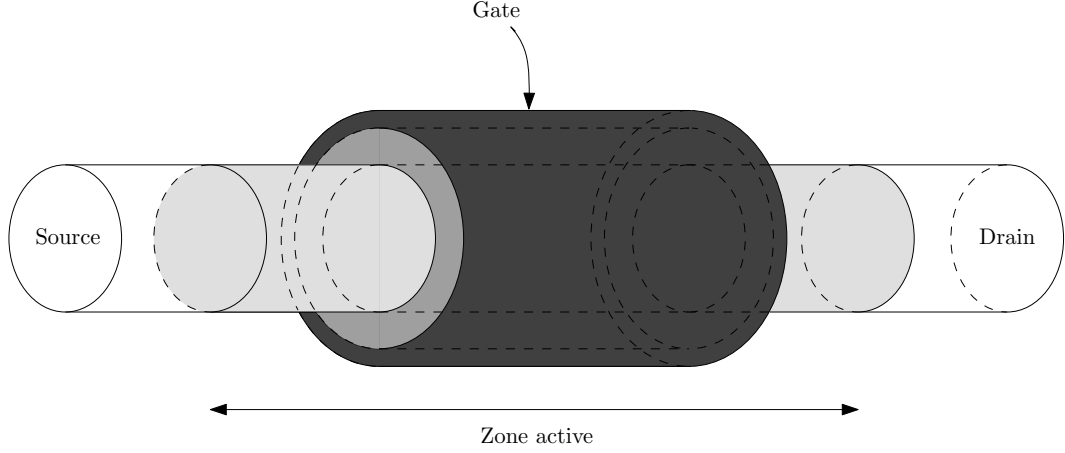
demi-dérivée temporelle.

On se place pour la suite de ce travail dans le cadre *stationnaire*, et on utilise la méthode dite QTBM (*Quantum Transmitting Boundary Method*) initialement développée dans [30] puis étudiée mathématiquement dans [13, 10] pour la mise en place précise de conditions aux limites transparentes. Dans ce cadre, on verra que les conditions obtenues sont des conditions de type *Robin-Fourier*.

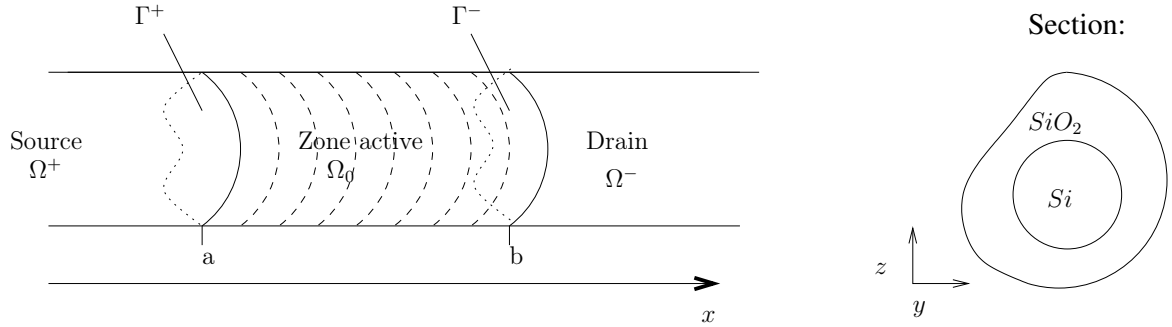
Le problème que l'on se pose ici est celui du transport d'un gaz d'électrons tridimensionnel confiné dans un nanofil (i.e partiellement confiné dans deux directions). Ce problème a été étudié mathématiquement dans [38, 10]. L'inconvénient majeur des méthodes de résolution mises en place est leur coût élevé en temps de calcul du fait de la résolution d'équations de Schrödinger 3D. Pour éviter d'avoir à traiter ces équations tridimensionnelles, [18] introduit une méthode de *décomposition en sous-bandes* qui permet de réduire la dimensionalité des systèmes à résoudre. Cette méthode a été implémentée numériquement par la suite pour le transport d'un gaz en dimension 2 dans [17, 16]. Dans ce travail, au lieu d'avoir à traiter des équations de Schrödinger bidimensionnelles, les auteurs se ramènent à des équations de Schrödinger en dimension 1 par décomposition en sous-bandes. Le problème de la modélisation numérique du transport d'un gaz d'électrons tridimensionnel dans un nanofil est complexe. Il a été traité dans plusieurs travaux, avec des modèles plus simples que le modèle de Schrödinger-Poisson, ou avec des approximations simplificatrices. Dans [45], les auteurs s'intéressent au transport d'un gaz tridimensionnel confiné dans un nanofil. Pour cela, ils mettent en place la méthode de décomposition en sous-bandes pour passer d'un problème en dimension 3 à des problèmes de Schrödinger en dimension 2. Ils se placent néanmoins dans l'approximation quasi-3D. On peut par ailleurs citer ici les travaux de [23] ou encore [41].

Cette méthode s'inspire du fait que les gaz d'électrons dans les nanocomposants sont partiellement confinés dans une ou plusieurs directions pour réduire la dimension de propagation dans le problème. Ainsi, dans notre problème de transport en 3 dimensions, la résolution de l'équation de Schrödinger 3D générale dans la zone active est ramenée (comme dans [45]) à la résolution de plusieurs problèmes aux valeurs propres 2D dans les directions transverses (les directions de confinement y et z) et d'un système d'équations de Schrödinger 1D couplées dans la direction longitudinale (direction de transport x).

On propose ici de décrire très brièvement le modèle que l'on détaille complètement dans le Chapitre 5. Le dispositif que nous étudions dans cette partie est constitué de trois composantes : une zone active, une source et un drain qui regroupent chacun un réservoir d'électrons et un guide d'onde qui le relie à la zone active.



On choisit de noter Ω_0 la zone active, Ω^+ et Ω^- désigneront respectivement la source et le drain. Les interfaces entre la source et la zone active, entre la zone active et le drain et entre la zone active et l'extérieur sont respectivement notées Γ^+ , Γ^- et Γ_0 , comme décrit sur la figure suivante :



On suppose que la source et le drain sont à l'équilibre thermodynamique, que les charges qu'ils échangent avec la zone active ne dérangent pas cet équilibre, et que, dans la source et le drain, le potentiel d'interaction électrostatique ne dépend que de la variable transverse et non de la direction de transport. Par ailleurs, on suppose que les électrons sont émis par la source et le drain en accord avec la statistique d'un gaz de fermions caractérisée par la distribution d'énergie de Fermi-Dirac. Quant à la zone active, on fait l'approximation du transport balistique et, ainsi, les électrons de la zone active sont dans un mélange statistique d'états et leur densité n_e est donnée par :

$$n(x, y, z) = 2 \times \sum_{\eta \in \{+, -\}} \sum_{\{E\}} f_{FD}(E - \mu_\eta) |\Psi_E(x, y, z)|^2 \quad (0.0.31)$$

où $|\Psi_E(x, y, z)|^2$ est la densité de probabilité de présence de l'électron d'énergie E en x, y, z , et où μ^+ et μ^- représentent respectivement les potentiels chimiques associés

à la source et au drain. Notons enfin que la somme sur les configurations d'énergie E est, suivant les cas, une somme discrète ou une intégrale.

Le but est donc ici de

- simuler le transport dans la source et le drain pour déterminer les potentiels chimiques μ^+ et μ^- .
- déterminer les configurations d'énergie E et les fonctions d'ondes associées Ψ_E , qui sont des fonctions propres généralisées de l'opérateur de Schrödinger stationnaire

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_x(y, z)}\partial_x^2 - \frac{\hbar^2}{2}\partial_y \left(\frac{1}{m_1(y, z)}\partial_y \right) - \frac{\hbar^2}{2}\partial_z \left(\frac{1}{m_2(y, z)}\partial_z \right) + qV(x, y, z). \quad (0.0.32)$$

- mettre en place les conditions transparentes pour prendre en compte les échanges avec la source et le drain et déterminer les fonctions Ψ_E de manière unique.

De telles fonctions sont ainsi solutions du système

$$(H + U(x, y, z)) \Psi_E = E\Psi_E \quad \text{dans } \Omega_0 \quad (0.0.33a)$$

$$\Psi_E = 0 \quad \text{sur } \Gamma_0 = \overline{\Omega_0} \cap \Gamma \quad (0.0.33b)$$

$$+ \text{conditions aux bords entrantes} \quad \text{sur } \Sigma^+ \text{ et } \Sigma^- \quad (0.0.33c)$$

$$-\nabla(\epsilon_r \nabla V) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho \quad \text{dans } \Omega_0 \quad (0.0.33d)$$

$$+ \text{conditions aux bords à discuter} \quad (0.0.33e)$$

Pour mettre en place les conditions entrantes et sortantes, on résout dans la source et le drain, de manière explicite les équations qui sont simplifiées par le fait que le potentiel d'interaction électrostatique ne dépend que de la direction $(y, z) \in \Sigma^\pm$. En effet, dans ce cas, les fonctions propres $\chi_m^\pm(z)$ de l'opérateur transverse

$$H_{y,z} := -\frac{\hbar^2}{2}\partial_y \left(\frac{1}{m_1(y, z)}\partial_y \right) - \frac{\hbar^2}{2}\partial_z \left(\frac{1}{m_2(y, z)}\partial_z \right) + qV(y, z)$$

ne dépendent pas de la variable de transport x . Pour résoudre le problème de transport dans la source et le drain, on l'écrit de manière équivalente en le projetant sur les modes propres χ_m^\pm de l'opérateur Hamiltonien transverse H_z . On décompose ainsi la fonction inconnue Ψ_E sur la base de $L^2(\Sigma)$ formée par les $(\chi_m(y, z))_m$ et on écrit sur les bords Γ^+ et Γ^- des équations de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée par rapport à la variable de transport x .

Une fois ces conditions au bord obtenues, on s'attache au problème de transport dans la zone active qui, cette fois, dépend de x , toujours par décomposition sur les

modes propres transverses. Cette fois, les fonctions propres du Hamiltonien transverse dépendent de x , et l'équation portant sur les $\phi_m(x)$ s'en trouve compliquée. L'unique fonction d'onde d'énergie E , associée à l'injection d'une onde polarisée sur le mode propre i_0 , de vecteur d'onde k_0 et venant par exemple de la source s'écrit alors :

$$\psi_{E,i_0,k_0}^+(x, y, z) = \sum_{m \geq 1} \phi_{m,E,i_0,k_0}^+(x) \chi_m(y, z, x)$$

où les fonctions $\phi_{m,E,i_0,k_0}^+(x)$ sont solutions du problème :

$$-\phi_m''(x) - 2 \sum_{j \geq 1} c_{m,j}^{(1)}(x) \phi_j'(x) - \sum_{j \geq 1} \left(c_{m,j}^{(2)}(x) + \frac{2}{\hbar^2} (E_j(x) - E) c_{m,j}^{(0)}(x) \right) \phi_j(x) = 0 \quad (0.0.34)$$

où

$$\begin{aligned} c_{m,j}^{(0)}(x) &= \int_{\Sigma(x)} m_x(y, z) \chi_j(y, z, x) \chi_m(y, z, x) dy dz \\ c_{m,j}^{(1)}(x) &= \int_{\Sigma(x)} \partial_x \chi_j(y, z, x) \chi_m(y, z, x) dy dz \\ c_{m,j}^{(2)}(x) &= \int_{\Sigma(x)} \partial_x^2 \chi_j(y, z, x) \chi_m(y, z, x) dy dz \end{aligned}$$

avec les conditions transparentes au bord (dans le cas d'une injection à l'infini par la source) :

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_m^+}{dx}(a) &= (-i\delta_{m \leq I^+(E)} - \delta_{m \geq I^+(E)+1}) k_m^+ \phi_m^+(a) + 2ik_m^+ \delta_{i_0,m} e^{ik_m^+ a} \delta_{m \leq I^+(E)} \\ \frac{d\phi_m^+}{dx}(b) &= (i\delta_{m \leq I^-(E)} - \delta_{m \geq I^-(E)+1}) k_m^- \phi_m^+(b). \end{aligned}$$

Les simulations numériques se basent sur la méthode numérique de *décomposition en sous bandes* qui s'appuie sur la décomposition de Ψ_E sur les modes propres du Hamiltonien transverse et par deux approximations. La première consiste à tronquer les sommes sur les modes propres en un nombre fini (en pratique petit) de modes propres, et la deuxième consiste par ailleurs à négliger les interactions entre les modes très éloignés.

Les simulations numériques effectuées sont de deux types et sont par conséquent présentées dans les deux chapitres 6 et 7. D'une part, dans le Chapitre 6, on s'intéresse à la modélisation particulière, sensiblement différente, des guides d'ondes formés par la source et le drain. Cela nous permet de calculer numériquement les potentiels chimiques μ^+ et μ^- , nécessaires à la définition de la densité et du courant dans la zone active, ainsi que de calculer le potentiel d'interaction électrostatique, solution de l'équation de Poisson. Ce calcul de potentiel dans la source et le drain permet la mise en place de conditions aux bords pour la résolution numérique de l'équation de

Poisson dans la zone active. Il s'agit dans ce chapitre de résoudre numériquement un problème de Schrödinger nonlinéaire 2D, couplé avec une équation de Poisson.

La simulation du transport dans la zone active est actuellement en phase de test. Les premiers résultats disponibles proviennent d'un problème simplifié, qui est la résolution d'une équation de Schrödinger 3D linéaire. En effet, dans un souci de réduction du coût numérique, on est amené à faire l'approximation *faibles densités*, c'est-à-dire que l'on se fixe un potentiel qui modélise l'interaction électrostatique dans le cas de faibles densités. On présente ainsi dans le Chapitre 7 l'algorithme général pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger 3D ainsi que la résolution d'une équation elliptique 3D pour le calcul d'un potentiel appliqué qui vérifie les conditions physiques aux bords. On présente enfin les méthodes numériques mises en place pour cette résolution et les résultats obtenus.

Pour ces résolutions numériques, dans le but d'optimiser les résolutions d'EDP intervenant au sein de l'algorithme, on a fait appel au code MÉLINA. Ce code est installé et utilisé dans plusieurs laboratoires, en particulier à l'IRMAR et à l'ENSTA. Il se présente sous la forme d'une bibliothèque éléments finis interfacée en Fortran et en C++.

Bibliographie

- [1] Allaire, G. ; Piatnitski, A. *Homogenization of the Schrödinger equation and effective mass theorems*, Comm. Math. Phys. 258 (2005), no. 1, 1-22.
- [2] Antoine, X. ; Arnold, A. ; Besse, C. ; Ehrhardt M. ; and Schädle, A. *A Review of Transparent and Artificial Boundary Conditions Techniques for Linear and Nonlinear Schrödinger Equations*, Communications in Computational Physics 4 (4) (2008), pp. 729-796
- [3] Antoine, X. ; Besse, C. *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.
- [4] Arnold, A. ; Ehrhardt, M. ; *Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation*, Riv. Mat. Univ. Parma 6, (2001), no. 4 57–108 .
- [5] Arnold, A. *Self-consistent relaxation-time models in quantum mechanics*, Comm. PDE, 21, (1996) no.3-4, 473–506.
- [6] Arnold, A. *Numerical absorbing boundary conditions for quantum evolution equations*, VLSI Design 6,(1998), 313–319.
- [7] Bao, W. ; Markowich, P. A. ; Schmeiser, C. ; Weishäupl, R. *On the Gross-Pitaevski equation with strongly anisotropic confinement : formal asymptotics and numerical experiments*, Math. Models Methods Appl. Sci. 15 (2005), no. 5, 767–782.
- [8] Baskakov, V. A. ; Popov, A. V. *Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation*, Wave Motion 14, (1991), 123–128.
- [9] Bastard, G. *Wave Mechanics Applied to Semi-conductor Heterostructures*, Les Éditions de Physique, EDP Sciences, Les Ulis Cedex, France, 1992.
- [10] Ben Abdallah, N. *On a multidimensional Schrödinger-Poisson Scattering Model for semiconductors*, J. Math. Phys. 41, (2000),no. 7, 4241–4261.
- [11] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Delebecque-Fendt, F. ; Méhats, F. *The strongly confined Schrödinger-Poisson system for the transport of electrons in a nanowire.*, SIAM J. Appl. Math. 69 (2009), no. 4, 1162-1173.
- [12] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Méhats, F. *Time averaging for the strongly confined nonlinear Schrödinger equation, using almost periodicity.*, J. Diff. Eq. 245 (2008), no 1, 154-200

- [13] Ben Abdallah, N.; Degond, P.; Markowich, P. A. *On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model*, Z. Angew. Math. Phys. **48**, (1997), no.1, 135–155.
- [14] Ben Abdallah, N.; Méhats, F.; Pinaud, O. *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement*, SIAM J. Math. Anal, **36** (2005), 986-1013.
- [15] Ben Abdallah, N.; Pinaud, O. *On an open transient Schrödinger-Poisson system*, Math. Models Methods Appl. Sci. **15** (2005), 667–688.
- [16] Ben Abdallah, N.; Negulescu, C.; Mouis, M. *An accelerated algorithm for 2D simulations of the quantum ballistic transport in nanoscale MOSFETs*, Journal of Computational Physics **225** no. (1), (2007), 74-99.
- [17] Ben Abdallah, N.; Polizzi, E. *Self-consistent three dimensional model for quantum ballistic transport in open systems*, Phys. Rev B. **66** (2002), 245301-245309.
- [18] Ben Abdallah, N.; Polizzi, E.; *Subband decomposition approach for the simulation of quantum electron transport in nanostructures*, J. Comp. Physics, **202** (1), (2005), 150–180.
- [19] Ben Abdallah, N.; Méhats, F.; Schmeiser, C.; Weishäupl, R. M. *The nonlinear Schrödinger equation with strong anisotropic harmonic potential*, SIAM J. Math. Anal. **37** (2005), no. 1, 189–199.
- [20] Brezzi, F.; Markowich, P. A. *The three dimensional Wigner -Poisson Problem : existence, uniqueness and approximation*, Math. Methods Appl. Sci. **14** (1991), no. 1, 35–61.
- [21] Castella, F. *L^2 solutions to the Schrödinger-Poisson system : Existence, uniqueness, time behaviour, and smoothing effects*, Math. Models Methods Appl. Sci., **7** (1997), pp. 1051-1083.
- [22] Chen, Z.; Cockburn, B.; Gardner, C.L.; Jerome, J.W. *Quantum Hydrodynamic Simulation of Hysteresis in the Resonant Tunneling Diode*, J. C. Phys **117**, (1995), 274–280
- [23] Cho, K. H.; Yeo, K. H.; Yeoh, Y. Y.; Suk, S. D.; Li, M.; Lee, J. M.; Kim, M.-S.; Kim, D.-W.; Park, D.; Hong, B. H.; Jung, Y. C.; Hwang, S. W. *Experimental evidence of ballistic transport in cylindrical gate-all-around twin silicon nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*, Applied Physics Letters, **92** no 5 (2008).
- [24] Ferry, D.K.; Goodnick, S.M. *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997.
- [25] Gardner, C. *Resonant Tunneling in the Quantum Hydrodynamic Model*, VLSI Design, **3** (1995), 201–210

- [26] Gérard, P ; Markowich, P. A. ; Mauser, N. J. ; Poupaud, F. *Homogeneization limits and Wigner transforms*, Comm. Pure. Appl. Math. **50** (1997), 323–379.
- [27] Hazard, C.; Lunéville, E., *An improved multimodal approach for non-uniform acoustic waveguides*, IMA J. Appl. Math. **73**, (2008), no. 4, 668–690.
- [28] Illner, R. ; Zweifel, P.F. ; Lange, H. *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.
- [29] Jüngel, A. *Quasi-hydrodynamics semi-conductor equations*, Progress in Non-linear Differential Equations, (1999).
- [30] Lent, C.S. ; Kirkner, D.J. *The quantum transmitting boundary method*, J. Appl. Phys. **67**, (1990), 6353-6359
- [31] Lions, P.L. ; Paul, T. *Sur les mesures de Wigner*, Rev. Math. Iberoamericana **9** (1993), 553–618
- [32] Markowich, P. A. ; Mauser, N. J. *The classical limit of a self-consistent quantum-Vlasov equation in 3D*, Math; Meth. Mod. **16** (1993), 6, 409–442
- [33] P. A. Markowich, N. J. Mauser, F. Poupaud, *A Wigner function approach to semi-classical limits : electrons in a periodic potential*, J; Math. Phys., **35** (6), (1994), 1066–1094.
- [34] Messiah, A. ; *Mécanique quantique, tome 1*, Dunod, Paris, 2003
- [35] Nier, F. *A Stationary Schrödinger-Poisson system arising from the modelling of electronic devices*, Forum Math. **2**, (1993), no.5, 489–510.
- [36] Nier, F. *Schrödinger-Poisson systems in Dimension $d \leq 3$: The whole space case*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A **123**, (1993), no. 5, 1179–1201.
- [37] Nier, F. *A variational formulation of Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$* , Comm. Partial Di. Eq. **18** (1993), no. 7-8, 1125–1147.
- [38] Nier, F ; *The dynamics of some quantum open systems with short-range nonlinearities*, Nonlinearity **11**, (1998), 1127-1172.
- [39] Pinaud, O. *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement : the stationary case*, J. Math. Phys. **45** (2004), no. 5, 2029–2050.
- [40] E. Polizzi, thèse de doctorat (2001), Toulouse.
- [41] Racec, P.N. ; Racec E. R. ; Neidhardt H. ; *Evanescent channels and scattering in cylindrical nanowire heterostructures*, Phys. Rev. B **79**, (2009), 155305–155319
- [42] Reed, M. ; Simon, B. *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. 1–4, Academic Press, New York, San Francisco, London, 1972–1979.
- [43] Sanders, J. A. ; Verhulst, F. *Averaging Methods in Nonlinear Dynamical Systems*, Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Tokyo (1985).

- [44] Sparber, C. *Effective mass theorems for nonlinear Schrödinger equations*, SIAM J. Appl. Math. 66 (2006), no. 3, 820-842
- [45] Wang, J. ; Polizzi, E. ; Lundstrom, M., *A three-dimensional quantum simulation of silicon nanowire transistors with the effective-mass approximation*, J. Appl. Phys. **96** (2004), 2192.
- [46] E. P. Wigner, *On the quantum correction for the thermodynamic equilibrium*, Phys. Rev. **40** (1932), 749–759.

Première partie

Quelques modèles asymptotiques pour le transport de gaz quantiques confinés

Chapitre 1

Un problème modèle

Sommaire

1.1	Mise en équation du problème physique et remise à l'échelle	45
1.2	Asymptotique formelle	47
1.3	Intérêt du modèle (1.2.11)-(1.2.12)	49
1.4	Énoncé du résultat principal et schéma de la preuve . .	50
1.5	Analyse des nonlinéarités V^ε et W	51
1.6	Preuve de la convergence	52
1.7	Les principales différences avec les modèles étudiés par la suite	53

Cette première partie de la thèse présente différentes configurations de transport d'un gaz d'électrons confiné. Comme on l'a déjà vu, ces différentes configurations sont les suivantes : on considère tour à tour le confinement d'un gaz d'électrons dans un nanofil, puis d'un gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un champ magnétique fort, et enfin on étudie un confinement de type "mur infini" pour un gaz bidimensionnel. On propose pour introduire cette partie un problème modèle, qui est le point de départ de cette thèse et le trait d'union entre les différentes situations de confinement étudiées par la suite.

Dans l'étude asymptotique de ce problème modèle se mettent en place la plupart des schémas de preuve et des idées-clefs utilisés dans le reste du manuscrit. On se permettra donc ici de faire appel à divers résultats démontrés dans les chapitres suivants de cette partie. En effet, on préférera mettre ici l'accent d'une part sur les méthodes plus que sur les résultats techniques, et d'autre part sur les différences qui apparaissent par la suite entre les différentes situations de confinement.

Le modèle présenté est tiré de l'article [3] dans lequel les auteurs proposent une hiérarchie de modèles à dimensionalité réduite pour approcher le système de Schrödinger-Poisson tridimensionnel perturbé par un potentiel de confinement fort. L'objet de ce chapitre est de présenter une stratégie générale plus systématique que celle utilisée dans [3], qui sera réutilisée pour les trois chapitres suivants. Accessoirement, cette méthode permet une généralisation des résultats de [3], où seules des données initiales bien préparées étaient considérées. Ce chapitre introductif ne donnera pas lieu à un article à proprement parler (les preuves seront ici un peu succinctes, et on se donne le droit de référer à des résultats démontrés dans les chapitres suivants).

1.1 Mise en équation du problème physique et remise à l'échelle

Le gaz d'électrons bidimensionnel est représenté ici par le couple "fonction d'onde/potentiel d'interactions électrostatique" solution du système de Schrödinger-Poisson 3D. Les différentes directions de l'espace \mathbb{R}^3 jouant des rôles différents, on note $x \in \mathbb{R}^2$ la variable bidimensionnelle de transport et $z \in \mathbb{R}$ la variable de confinement. Afin de modéliser le confinement dans la direction z , on perturbe le système de Schrödinger-Poisson écrit dans les variables physiques (en gras) par un potentiel de confinement fort que l'on note $\mathbf{V}_c(\mathbf{z})$. On considère dès lors le système suivant, écrit dans les variables physiques.

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + e\mathbf{V}_c(\mathbf{z})\Psi + e\mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z})\Psi, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{z}) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.1.1)$$

$$-\Delta\mathbf{V} = \frac{e}{\epsilon_0}|\Psi|^2, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{z}) \in \mathbb{R}^3, \quad (1.1.2)$$

où ϵ_0 désigne ici la permittivité du matériau dans lequel le gaz est transporté. L'équation de Poisson (1.1.2) étant posée sur \mathbb{R}^3 , elle peut se récrire sous la forme d'une convolution avec le noyau de Poisson et devient alors

$$\mathbf{V} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + \mathbf{z}^2}} * (|\Psi|^2). \quad (1.1.3)$$

On associe à chacune des grandeurs physiques intervenant dans cette équation une grandeur sans dimension comme suit :

$$t = \frac{\mathbf{t}}{\bar{t}}, \quad x = \frac{\mathbf{x}}{\bar{x}}, \quad z = \frac{\mathbf{z}}{\bar{z}}, \quad V_c = \frac{\mathbf{V}_c}{\bar{V}_c}, \quad V = \frac{\mathbf{V}}{\bar{V}}, \quad \Psi = \frac{\mathbf{\Psi}}{\sqrt{N}}. \quad (1.1.4)$$

On définit à présent deux échelles d'énergies distinctes : une énergie forte que l'on note E_{conf} et qui correspond à l'énergie typique du confinement en z et une énergie plus faible notée E_{transp} qui correspond à l'énergie du transport longitudinal en x mais aussi à celle des effets d'interaction électrostatiques. On définit alors un paramètre ε qui mesure l'ordre de grandeur du rapport entre ces énergies. L'hypothèse principale de confinement reviendra alors à supposer ce rapport ε très petit devant 1.

$$\varepsilon := \left(\frac{E_{transp}}{E_{conf}} \right)^{1/2} \ll 1. \quad (1.1.5)$$

On fait les hypothèses de modélisation suivantes qui permettent de définir les choix d'échelles pour les principaux phénomènes physiques auxquels sont soumis les électrons. On choisit d'étalonner à l'échelle d'énergie E_{conf} l'énergie associée au potentiel de confinement et l'énergie cinétique selon la variable z :

$$E_{conf} = e\bar{V}_c = \frac{\hbar^2}{2m\bar{z}^2} \quad (1.1.6)$$

et on fixe à l'échelle d'énergie E_{transp} les énergies cinétiques selon la variable x ainsi que l'énergie associée au potentiel d'interaction électrostatique. On choisit d'adapter l'échelle de temps à cette énergie :

$$E_{transp} := e\bar{V} = \frac{\hbar^2}{2m\bar{x}^2} = \frac{\hbar}{\bar{t}}. \quad (1.1.7)$$

Il est à noter qu'un tel choix d'échelles pour les énergies intervenant dans le problème physique (1.1.6)-(1.1.7) implique aussi un rapport ε entre les directions caractéristiques de confinement et de transport :

$$\varepsilon = \frac{\bar{z}}{\bar{x}}.$$

En introduisant ces variables adimensionnées dans l'équation physique de départ (1.1.1)-(1.1.2), on aboutit au système

$$i\partial_t\Psi = -\Delta_x\Psi - \frac{E_{conf}}{E_{transp}}\partial_z^2\Psi + \frac{E_{conf}}{E_{transp}}V_c(z)\Psi + V\Psi, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.1.8)$$

$$-\Delta_x V - \frac{E_{conf}}{E_{transp}}\partial_z^2 V = \frac{e^2\bar{x}^2 N}{\epsilon_0 E_{transp}}|\Psi|^2 \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3. \quad (1.1.9)$$

On combine alors (1.1.8)-(1.1.9) avec la définition du paramètre ε pour obtenir

$$i\partial_t\Psi = -\Delta_x\Psi + \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_c(z))\Psi + V\Psi, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3$$

$$-\Delta_x V - \frac{1}{\varepsilon^2}\partial_z^2 V = \frac{e^2\bar{x}^2 N}{\epsilon_0 E_{transp}}|\Psi|^2 \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3.$$

On fait finalement une deuxième hypothèse de modélisation qui concerne l'ordre de grandeur physique de la densité, c'est à dire un choix d'échelle pour la grandeur N . On choisit ici de travailler dans le cadre de **faibles densités**, et on pose

$$N = \frac{\epsilon_0}{e^2\bar{x}z}E_{transp}, \quad (1.1.10)$$

ce qui nous amène à considérer le système de Schrödinger-Poisson de départ suivant :

$$i\partial_t\psi^\varepsilon = -\Delta_x\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_c(z))\psi^\varepsilon + V^\varepsilon\psi^\varepsilon, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.1.11)$$

$$-\varepsilon^2\Delta_x V^\varepsilon - \partial_z^2 V^\varepsilon = \varepsilon|\psi^\varepsilon|^2 \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3. \quad (1.1.12)$$

De manière équivalente, la convolution (1.1.3) s'écrit alors aussi comme *une convolution avec le noyau de Poisson modifié*

$$V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon(x, z)} * |\psi^\varepsilon(t, x, z)|^2 \quad (1.1.13)$$

où on a noté $r^\varepsilon(x, z) := |x|^2 + \varepsilon^2 z^2$.

La raison d'être de l'hypothèse "faibles densités" (1.1.10) apparaît sur cette équation (1.1.13). Cette hypothèse permettra d'obtenir à la limite un potentiel de Poisson en $\mathcal{O}(1)$, donc un modèle avec des vraies interactions électrostatiques.

1.2 Asymptotique formelle

L'équation (1.1.13) nous fournit alors immédiatement une asymptotique formelle pour le potentiel de Poisson, donné par le potentiel W suivant

$$W(t, x) := \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{4\pi|x-x'|^2} |\psi^\varepsilon(t, x', z')|^2 dx' dz' = \frac{1}{4\pi|x|} *_x \langle |\psi^\varepsilon(t, x, \cdot)|^2 \rangle, \quad (1.2.1)$$

où on a utilisé la notation

$$\langle f \rangle := \int_{\mathbb{R}} f(z) dz.$$

Reprenons le système de départ (1.1.11)-(1.1.12). On définit le Hamiltonien transverse

$$H_z := -\partial_z^2 + V_c(z) \quad (1.2.2)$$

sur le domaine

$$\mathcal{D}(H_z) := \{u \in H^2(\mathbb{R}), V_c u \in L^2(\mathbb{R})\}, \quad (1.2.3)$$

et on fait l'hypothèse de confinement suivante :

Hypothèse 1.2.1. *La fonction V_c est une fonction réelle positive, régulière de la variable z telle que :*

$$\text{il existe } \alpha > 0 \text{ tel que, pour tout } |z| \text{ assez grand, } V_c(z) \geq C|z|^\alpha \quad (1.2.4)$$

$$\text{et, pour tout } \beta \in \mathbb{N}^*, \partial_z^\beta V_c(z) = o(V_c(z)) \text{ lorsque } |z| \rightarrow \infty. \quad (1.2.5)$$

La première hypothèse (1.2.4) est cruciale en ce qu'elle détermine le caractère confinant et la force de confinement du potentiel. La deuxième (1.2.5), plus technique permet un maniement plus aisé des opérateurs liés au système d'équations (1.1.11)-(1.1.12). Par ailleurs, on sait que l'hypothèse (1.2.4) nous garantit que l'opérateur Hamiltonien transverse H_z soit auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R})$ et a de plus un spectre discret (on renvoie pour cela le lecteur à [5] par exemple). Dès lors, il est possible de filtrer les oscillations liées au terme $\frac{1}{\varepsilon^2} H_z \psi^\varepsilon$ dans le système (1.1.11)-(1.1.13) en définissant la fonction d'onde filtrée ϕ^ε comme suit.

$$\phi^\varepsilon(t, x, z) := e^{itH_z/\varepsilon^2} \psi^\varepsilon(t, x, z). \quad (1.2.6)$$

Cette nouvelle fonction vérifie à son tour le système filtré

$$i\partial_t \phi^\varepsilon = -\Delta_x \phi^\varepsilon + e^{itH_z/\varepsilon^2} V^\varepsilon e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.2.7)$$

$$V^\varepsilon(t, x, z) = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon(x, z)} * |e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon(t, x, \cdot)|^2, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^2. \quad (1.2.8)$$

On s'attend désormais à ce que l'équation (1.2.7) dans laquelle on remplace V^ε par son asymptotique formelle W lorsque ε tend vers 0 soit une bonne approximation de (1.2.7). L'intérêt principal de la nonlinéarité W par rapport à V^ε est que, comme elle ne dépend pas de z (ce qui est clair au vu de sa définition (1.2.1)), elle est transparente pour l'opérateur $e^{\pm itH_z/\varepsilon^2}$. On obtient ainsi le modèle suivant

$$i\partial_t \phi^\varepsilon = -\Delta_x \phi^\varepsilon + W \phi^\varepsilon, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.2.9)$$

$$W(t, x) = \frac{1}{4\pi|x|} *_x \langle |e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon(t, x, \cdot)|^2 \rangle, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3. \quad (1.2.10)$$

Par ailleurs, comme l'opérateur $e^{itH_z/2\varepsilon^2}$ est unitaire dans $L^2(\mathbb{R})$, on peut immédiatement ré-écrire l'équation (1.2.10) comme suit :

$$i\partial_t\phi = -\Delta_x\phi + W\phi, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.2.11)$$

$$W(t, x) = \frac{1}{4\pi|x|} *_x \langle |\phi(t, x, \cdot)|^2 \rangle, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3. \quad (1.2.12)$$

1.3 Intérêt du modèle (1.2.11)-(1.2.12)

L'intérêt du modèle asymptotique formel (1.2.11)-(1.2.12) sur le modèle initial (1.1.11)-(1.1.13) est triple. Tout d'abord, on l'a déjà dit, il est de dimensionnalité réduite. Il permet ainsi une réduction notable des coûts d'implémentation numérique.

Par ailleurs, le terme $\frac{1}{\varepsilon^2}H_z\psi^\varepsilon$ introduit dans le système de départ (1.1.11)-(1.1.13) de fortes oscillations. Ainsi, lorsque les grandeurs intervenant dans l'équation varient en $\mathcal{O}(1)$, les grandeurs intervenant dans le modèle de départ varient en $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$, d'où la nécessité d'utiliser des pas de temps très petits pour la simulation du modèle de départ.

Un dernier intérêt apparaît si l'on s'intéresse à la manière dont le système agit sur les modes propres du Hamiltonien transverse H_z . Pour cela, on va maintenant projeter ces deux systèmes sur les modes propres du Hamiltonien transverse. En effet, on considère la famille des valeurs propres $(E_p)_{p \geq 0}$ de l'opérateur H_z ainsi qu'une famille de fonctions propres associées $(\chi_p)_{p \geq 0}$ choisies de sorte à former une base hilbertienne de $L^2(\mathbb{R})$. Décomposons la fonction $\phi^\varepsilon(t, x) \in L^2(\mathbb{R})$ sur cette base :

$$\phi^\varepsilon(t, x, z) := \sum_{p \geq 0} \phi_p^\varepsilon(t, x) \chi_p(z) \quad \text{où} \quad \phi_p^\varepsilon(t, x) := \langle \phi^\varepsilon(t, x, \cdot) \chi_p \rangle.$$

En introduisant cette expression dans (1.1.11) et en projetant sur le mode $p \geq 0$, on aboutit au système infini d'équations de Schrödinger suivant : $\forall p \geq 0$

$$i\partial_t\phi_p^\varepsilon = -\Delta_x\phi_p^\varepsilon + \phi_p^\varepsilon \langle V^\varepsilon |\chi_p|^2 \rangle + \sum_{p \neq q} \sum e^{it(E_p - E_q)/\varepsilon^2} \phi_q^\varepsilon \langle V^\varepsilon \chi_p \chi_q \rangle \quad (1.3.1)$$

$$V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} *_x \sum_{p \geq 0} |\phi_p^\varepsilon|^2 |\chi_p|^2 + \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} *_x \sum_{p \neq q} \sum e^{-it(E_p - E_q)/\varepsilon^2} \phi_p^\varepsilon \overline{\phi_q^\varepsilon} \chi_p \chi_q.$$

En projetant le modèle (1.2.11)-(1.2.12) sur les modes propres de l'opérateur H_z , on obtient cette fois-ci :

$$i\partial_t\phi_p = -\Delta_x\phi_p + W\phi_p$$

$$W = \frac{1}{4\pi|x|} *_x \left(\sum_p |\phi_p|^2 \right) = \frac{1}{4\pi|x|} *_x \left(\|\phi(t, x, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 \right).$$

On observe dès lors que le modèle limite fait apparaître un phénomène de *perte de cohérence quantique*, c'est-à-dire qu'un découplage s'opère entre les différents modes propres qui sont ainsi plus facilement approchables numériquement un à un. De plus, si un seul mode propre est dépeuplé, c'est à dire si il existe $p_0 \geq 0$ tel que $\phi_{p_0}(0, x) = 0$, alors cette propriété reste vraie au cours du temps. Dans la pratique, les données initiales étant très concentrées sur les niveaux de basse énergie pour des raisons de thermostatistique, il suffira de considérer un petit nombre de modes pour une implémentation numérique qui restera précise (en pratique moins de 10 modes suffiront).

1.4 Énoncé du résultat principal et schéma de la preuve

Dans [3], les auteurs ont principalement utilisé une analyse fine de la nonlinéarité de Poisson et des techniques de projection sur les modes propres du Hamiltonien transverse. Pour résoudre les problèmes de convergence de sommes auxquels ils étaient alors confrontés, ils ont dû faire une hypothèse de polarisation de la donnée initiale sur un mode propre de l'opérateur H_z . Ici, on s'affranchit de cette hypothèse en proposant une preuve qui évite ces questions difficiles de convergence de séries. Pour cela, on estime la différence $V^\varepsilon - W$ dans certains espaces et on récrit l'équation de départ (1.1.11) comme une petite perturbation du système limite. On peut dès lors énoncer le résultat de convergence suivant.

Théorème 1.4.1. *Supposons l'Hypothèse 1.2.1 vérifiée, et considérons ψ_0 une fonction de l'espace d'énergie*

$$\mathcal{H} := \{u \in H^1(\mathbb{R}^3), \sqrt{V_c}u \in L^2(\mathbb{R}^3)\}. \quad (1.4.1)$$

Alors, il existe une unique solution $(\psi^\varepsilon, V^\varepsilon)$ de (1.1.11)-(1.1.13) avec la donnée initiale ψ_0 dans $\mathcal{C}([0, \infty), \mathcal{H})$, et une unique solution (ϕ, V) de (1.2.11)-(1.2.12) avec la donnée initiale ψ_0 dans $\mathcal{C}([0, \infty), \mathcal{H})$. De plus, pour tout $T > 0$, on a le résultat de convergence suivant :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\psi^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi\|_{\mathcal{C}([0, T], \mathcal{H})} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

La preuve de ce théorème s'appuie sur une analyse de la nonlinéarité de Poisson modifiée donnée par l'équation (1.1.13) inspirée par des résultats présentés en annexe de [3] au sujet de la convolution avec le noyau de Poisson de dimension 2. Cela nous permet de démontrer des estimations douces pour chacune des deux nonlinéarités V^ε et W , décrites rigoureusement dans le Lemme 3.2.5 du Chapitre 3, et d'en déduire des estimations indépendantes de ε pour ψ^ε et ψ .

Dans un deuxième temps, on étudie la différence entre les noyaux de Poisson (1.1.12) et (1.2.12) dans l'espace d'énergie \mathcal{H} . On énonce ainsi le Lemme 1.6.1 qui

fait apparaître la nécessité de régulariser la fonction u du fait de la perte d'une dérivée dans cette estimation. Pour cela, on définit l'espace de régularisation adapté à nos opérateurs

$$\mathcal{H}^2 := \{u \in H^2(\mathbb{R}^3), \quad V_c u \in L^2(\mathbb{R}^3)\} \text{ muni de } \|u\|_{\mathcal{H}^2}^2 := \|u\|_{H^2}^2 + \|V_c u\|_{L^2}^2.$$

On renvoie en effet le lecteur au Lemme 2.2 du Chapitre 3, tiré de [2] dans lequel les auteurs démontrent par des techniques utilisant le calcul de Weyl-Hörmander que cet espace \mathcal{H}^2 peut être muni de manière équivalente de la norme adaptée aux opérateurs Δ_x et H_z :

$$\|u\|_{\mathcal{H}^2}^2 \sim \|u\|_{L^2}^2 + \|\Delta_x u\|_{L^2}^2 + \|H_z u\|_{L^2}^2.$$

On écrit enfin le système de Schrödinger-Poisson de départ comme une perturbation du système limite en faisant apparaître la différence entre les deux nonlinéarités. En utilisant l'estimation donnée par le Lemme 1.6.1 ainsi qu'un procédé de régularisation, on conclut à la convergence dans \mathcal{H} du système (1.1.11)-(1.1.13) vers le système (1.2.11)-(1.2.12).

1.5 Analyse des nonlinéarités V^ε et W

On fait ici appel au Lemme 3.2.5 démontré en appendice 3.B du Chapitre 3 qui fournit les estimations douces pour les nonlinéarités V^ε et W .

Lemme 1.5.1. *On définit la nonlinéarité générale*

$$F_\alpha(u) = \left(\frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2 + \alpha\varepsilon^2 z^2}} * (|u|^2) \right) u. \quad (1.5.1)$$

Alors, il existe une constante $C > 0$ telle que, pour tout $\varepsilon \in (0, 1]$, si $\alpha = 0$ ou 1 , on ait :

$$\forall u, v \in \mathcal{H}, \quad \|F_\alpha(u) - F_\alpha(v)\|_{\mathcal{H}} \leq C (\|u\|_{\mathcal{H}}^2 + \|v\|_{\mathcal{H}}^2) \|u - v\|_{\mathcal{H}}. \quad (1.5.2)$$

De plus, pour tout entier, il existe $C > 0$ telle que l'estimation douce suivante soit vérifiée :

$$\forall \varepsilon \in (0, 1], \forall \alpha \in \{0, 1\}, \forall u \in \mathcal{H}^2, \quad \|F_\alpha(u)\|_{\mathcal{H}^2} \leq C \|u\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}^2}.$$

Ces estimations permettent de démontrer l'existence et l'unicité de solution dans $\mathcal{C}([0, \infty), \mathcal{H})$ pour les équations (1.1.11)-(1.1.13) et (1.2.11)-(1.2.12) avec comme donnée initiale la fonction ψ_0 . Pour cela, on écrit le problème sous sa forme plus générale

$$i\partial_t u^\varepsilon = -\Delta_x u^\varepsilon + F_\alpha(u^\varepsilon), \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3 \quad (1.5.3)$$

$$u^\varepsilon(0, x, z) = \psi_0(x, z), \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3. \quad (1.5.4)$$

Dès lors, ε étant fixé, l'existence et l'unicité d'une solution maximale $u^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_\varepsilon], \mathcal{H})$ peut être obtenue par des techniques classiques (on réfère le lecteur à [4] par exemple). Le temps d'existence T_ε dépend éventuellement de ε . Pour démontrer que cette solution maximale est en fait globale, on fait appel aux estimations standard pour l'équation de Schrödinger. Les lois de conservation L^2 et de conservation de l'énergie s'écrivent en effet dans notre cas comme suit :

$$\forall t \geq 0, \|u^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} = \|\psi_0\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \text{ et } \mathcal{E}_\alpha(u^\varepsilon(t)) = \mathcal{E}_\alpha(\psi_0),$$

où l'énergie \mathcal{E}_α est définie par

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\alpha(u) &:= \langle \Delta_x u, u \rangle_{L^2} + \frac{1}{\varepsilon^2} \langle H_z u, u \rangle_{L^2} + \frac{1}{2} \langle F_\alpha(u), u \rangle_{L^2} \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} \|\partial_z u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|\sqrt{V_c} u\|_{L^2}^2 + \|\nabla_x u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \langle F_\alpha(u), u \rangle_{L^2}. \end{aligned}$$

Si ces estimations permettent de démontrer que la solution u^ε de (1.5.3)-(1.5.4) est globale en temps, elles ne permettent pas néanmoins d'obtenir des estimations indépendantes de ε du fait du terme en $\frac{1}{\varepsilon^2}$. Pour obtenir de telles estimations, mais localement en temps, on utilise la formulation de Duhamel pour u^ε :

$$u^\varepsilon = e^{it\Delta_x} \psi_0 - i \int_0^t e^{i(t-s)\Delta_x} (F_\alpha(u^\varepsilon(s))) ds.$$

En utilisant le fait que $e^{it\Delta_x}$ est un opérateur unitaire dans \mathcal{H} (on utilise ici cruciallement le fait que les opérateurs H_z et Δ_x commutent) et (1.5.2) avec $v = 0$, on obtient aisément :

$$\|u^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{H}} \leq C \|\psi_0\|_{\mathcal{H}} + C \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{H}^2}^3 ds.$$

Le lemme de Gronwall et un raisonnement similaire dans \mathcal{H}^2 permettent alors de démontrer l'estimation suivante :

$$\exists T > 0, \max(\|u^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T], \mathcal{H})}, \|u^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T], \mathcal{H}^2)}) \leq C_0 \quad (1.5.5)$$

où C_0 ne dépend que de $\|\psi_0\|_{\mathcal{H}}$, $\|\psi_0\|_{\mathcal{H}^2}$ et T .

1.6 Preuve de la convergence

Désormais, on s'intéresse à la différence entre les deux nonlinéarités V^ε et W . Ainsi, le Lemme 3.2.7 du Chapitre 3, démontré dans l'Appendice 3.C donne

Lemma 1.6.1. *Il existe une constante $C > 0$ telle que, pour tout $\varepsilon \in (0, 1]$, pour tout $\alpha \in \{0, 1\}$,*

$$\forall u \in \mathcal{H}, \|F_1(u) - F_0(u)\|_{\mathcal{H}} \leq C\varepsilon^{1/3} \|u\|_{\mathcal{H}^2}^3. \quad (1.6.1)$$

De plus, il existe $C > 0$ telle que l'estimation suivante est vérifiée

$$\forall \varepsilon \in (0, 1], \forall \alpha \in \{0, 1\}, \forall u \in \mathcal{H}^2, \|F_\alpha(u)\|_{\mathcal{H}^2} \leq C \|u\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}^2}. \quad (1.6.2)$$

On récrit à présent l'équation (1.1.11) sous la forme :

$$i\partial_t\psi^\varepsilon = H^\varepsilon\psi^\varepsilon + F_0(\psi^\varepsilon) + F_1(\psi^\varepsilon) - F_0(\psi^\varepsilon) \quad (1.6.3)$$

où l'on a noté $H^\varepsilon := -\Delta_x + \frac{1}{\varepsilon^2}H_z$. Dès lors, si ψ vérifie (1.2.11), la différence

$$\omega^\varepsilon(t) := \psi^\varepsilon(t) - \psi(t)$$

satisfait l'équation

$$i\partial_t\omega^\varepsilon = -\Delta_x\omega^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}H_z\omega^\varepsilon + (F_0(\psi^\varepsilon) - F_0(\psi)) + (F_1(\psi^\varepsilon) - F_0(\psi^\varepsilon)). \quad (1.6.4)$$

Dès lors, utilisant le fait que H^ε est unitaire sur \mathcal{H} (cela utilise de manière cruciale le fait que H_z et Δ_x commutent), la formulation de Duhamel fournit l'estimation suivante pour ω^ε :

$$\|\omega^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{H}} \leq \int_0^t \|F_0(\psi^\varepsilon)(s) - F_0(\psi)(s)\|_{\mathcal{H}} + \|F_1(\psi^\varepsilon)(s) - F_0(\psi^\varepsilon)(s)\|_{\mathcal{H}} ds. \quad (1.6.5)$$

On utilise pour conclure l'estimation douce donnée par le lemme (1.5.2) et l'estimation de la différence (1.6.1) entre les noyaux V^ε et W donnée par le lemme (1.6.1) ainsi qu'un argument de régularisation dans \mathcal{H}^2 .

1.7 Les principales différences avec les modèles étudiés par la suite

Le cas du transport d'un gaz électronique dans un nanofil

Le premier chapitre de cette partie présente une étude asymptotique du système de Schrödinger-Poisson tridimensionnel perturbé par un potentiel de confinement bidimensionnel. La différence principale qui apparaît dans ce cas est liée à la différence des rôles joués par les variables d'espace. En effet, la variable de confinement z est maintenant dans \mathbb{R}^2 et la variable de transport x est réelle. Il s'ensuit un comportement radicalement différent pour le potentiel de Poisson, lié à des problèmes d'intégrabilité du terme $\frac{1}{|x|}$ intervenant dans l'asymptotique du potentiel de Poisson (1.2.12). En effet, on s'intéresse dans ce cas au système posé pour $(x, z) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2$

$$\begin{aligned} i\partial_t\Psi^\varepsilon &= -\Delta_{x,z}\Psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}V_c\left(\frac{z}{\varepsilon}\right)\Psi^\varepsilon + \mathbb{V}^\varepsilon\Psi^\varepsilon \\ &\quad - \Delta_{x,z}\mathbb{V}^\varepsilon = |\Psi^\varepsilon|^2. \end{aligned}$$

On s'attend alors à ce que la densité des électrons ait un comportement asymptotique qui prenne la forme de la densité linéique concentrée sur l'axe $z = 0$:

$$|\Psi^\varepsilon(t, x, z)|^2 \sim \int_{\mathbb{R}^2} |\Psi^\varepsilon|^2(t, x, z') dz' \delta_{z=0}.$$

Le potentiel de Poisson se trouve alors avoir une asymptotique en $\mathcal{O}(\log(\varepsilon))$ de la forme :

$$V^\varepsilon(t, x, z) \sim -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |\psi^\varepsilon(t, x, z')|^2 dz' \log(\varepsilon).$$

On est donc amené dans ce cadre à faire un choix d'échelle différent pour les fonctions inconnues, adapté à un tel comportement. L'analyse de la nonlinéarité de Poisson est alors radicalement différente, elle mène au Lemme 2.2.1, et ne permet plus d'obtenir des estimations de Ψ^ε indépendantes de ε dans l'espace d'énergie. Pour pallier ce manque, on se place alors dans le cas particulier où la donnée initiale ψ_0 est concentrée sur le premier mode propre de l'opérateur H_z .

Le cas du transport d'un gaz d'électrons bidimensionnel dans un champ magnétique fort

Dans le deuxième chapitre de cette partie, on reprend notre problème modèle en ajoutant un potentiel magnétique fort, uniforme, porté par une des directions de transport que l'on note y . On fait par ailleurs l'hypothèse de modélisation qui consiste à choisir pour le potentiel magnétique l'échelle d'énergie associée à l'énergie caractéristique du transport E_{transp} définie par (1.1.7). Enfin, on effectue un choix de jauge de Landau qui aboutit finalement à remplacer dans l'équation (1.1.11) l'opérateur de transport $-\partial_x^2 - \partial_y^2$ comme suit :

$$-\partial_x^2 - \partial_y^2 \longleftrightarrow \left(i\partial_x - \frac{Bz}{\varepsilon} \right)^2 - \partial_y^2$$

pour aboutir à l'équation

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} (-\partial_z^2 + B^2 z^2 + V_c(z)) \psi^\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon} 2iBz \partial_x \psi^\varepsilon - \Delta_{x,y} \psi^\varepsilon + V^\varepsilon \psi^\varepsilon \quad (1.7.1)$$

où V^ε est toujours défini, de manière équivalente, par (1.1.12) ou (1.1.13).

La différence fondamentale ici avec le cas modèle (qui n'est autre que le cas présent en prenant $B = 0$), est que l'on a ajouté, dans le potentiel magnétique, le terme $\frac{1}{\varepsilon} 2iBz \partial_x \psi^\varepsilon$. Celui-ci a pour effet de coupler la direction de transport x (par le biais d'une dérivée en x) et la direction de confinement z (par le biais de la multiplication par z). Du fait de ce couplage, le terme $\frac{1}{\varepsilon} 2iBz \partial_x \psi^\varepsilon$ n'est pas transparent vis-à-vis de l'opérateur $e^{\pm it(-\partial_z^2 + B^2 z^2 + V_c(z))/\varepsilon^2}$. Pour plus de simplicité, on note encore H_z le Hamiltonien transverse, défini dans ce problème par

$$H_z := -\partial_z^2 + B^2 z^2 + V_c(z).$$

Ainsi, pour filtrer les oscillations dues au terme $\frac{1}{\varepsilon} H_z \psi^\varepsilon$ dans l'équation (1.7.1), on introduit l'inconnue filtrée ϕ^ε comme précédemment (1.2.6). L'équation une fois filtrée devient :

$$i\partial_t \phi^\varepsilon = -\frac{2B}{\varepsilon} \left(e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \right) (i\partial_x \phi^\varepsilon) - \Delta_{x,y} \phi^\varepsilon + e^{itH_z/\varepsilon^2} F_1(e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon(t)), \quad (1.7.2)$$

où la nonlinéarité F_α est définie dans (1.5.1).

Pour traiter ce nouveau problème, on travaille en deux temps. On approche le terme nonlinéaire par $F_0(\phi^\varepsilon(t))$ comme dans la cas modèle et on définit ainsi le modèle intermédiaire

$$i\partial_t \tilde{\phi}^\varepsilon = -\frac{2B}{\varepsilon} \left(e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \right) (i\partial_x \tilde{\phi}^\varepsilon) - \Delta_{x,y} \tilde{\phi}^\varepsilon + F_0(\tilde{\phi}^\varepsilon(t)). \quad (1.7.3)$$

Une première partie du travail consiste ainsi en une preuve de la convergence du système initial vers ce système intermédiaire. Par la suite, on traite le terme oscillant

$$-\frac{2B}{\varepsilon} \left(e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \right) (i\partial_x \phi^\varepsilon)$$

lié à l'opérateur couplé par une technique de moyennisation en temps long à l'ordre 2.

Le cas du transport d'un gaz d'électrons bidimensionnel modélisé par un potentiel "mur infini"

Dans le dernier chapitre de cette première partie, on propose une approche différente pour modéliser le confinement dans une plaque fine. En effet, on propose d'ajouter au potentiel de confinement habituel des conditions de Dirichlet homogènes sur les plans $z = 0$ et $z = \varepsilon$ qui forment "les bords de la plaque fine". Pour des raisons techniques, on ajoute de même un potentiel de confinement en x , la direction de transport, et l'on suppose que son énergie caractéristique est l'énergie de transport E_{transp} définie par (1.1.7). On étudie donc l'équation écrite dans les grandeurs physiques sur le domaine $\{(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \in \mathbb{R}^2 \times (0, \varepsilon)\}$

$$i\hbar\partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + e\mathbf{V}_2(\mathbf{z})\Psi + e\mathbf{V}_1(\mathbf{x})\Psi + e\mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z})\Psi, \quad (1.7.4)$$

$$\Psi(\mathbf{x}, 0) = \Psi(\mathbf{x}, \varepsilon) = 0, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$$

$$-\Delta \mathbf{V} = \frac{e}{\epsilon_0} |\Psi|^2, \quad (1.7.5)$$

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{V}(\mathbf{x}, \varepsilon) = 0. \quad (1.7.6)$$

On fait les mêmes choix d'échelles E_{conf} et E_{trans} donnés par (1.1.6) et (1.1.7), en

ajoutant $e\bar{V}_1 = E_{transp}$. L'équation (1.7.4)-(1.7.5) devient alors :

$$\begin{aligned} i\partial_t \Psi &= (-\Delta_x + V_1(x))\Psi + \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_2(z))\Psi + V\Psi, & (x, z) \in \mathbb{R}^2 \times (0, 1) \\ \Psi(x, 0) &= \Psi(x, 1) = 0, & x \in \mathbb{R}^2 \\ -\Delta_x V - \frac{1}{\varepsilon^2}\partial_z^2 V &= \frac{e^2 \bar{x}^2 N}{\varepsilon_0 E_{transp}} |\Psi|^2, & (x, z) \in \mathbb{R}^2 \times (0, 1) \\ V(x, 0) &= V(x, 1) = 0, & x \in \mathbb{R}^2, \end{aligned}$$

posée dans $\{(x, z) \in \mathbb{R}^2 \times (0, 1)\}$. Contrairement au cas modèle dans lequel on faisait l'hypothèse de *densité faible* en définissant N dans (1.1.10), on choisit ici le cadre de *densités fortes* et on pose

$$N = \frac{\varepsilon_0 E_{transp}}{e^2 \bar{x}^2} \frac{1}{\varepsilon}. \quad (1.7.7)$$

On s'intéresse dans ce chapitre au système suivant, posé sur $\mathbb{R}^2 \times (0, 1)$:

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = (-\Delta_x + V_1(x))\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_2(z))\psi^\varepsilon + V^\varepsilon \psi^\varepsilon, \quad (1.7.8)$$

$$\begin{aligned} \psi^\varepsilon(x, 0) &= \psi^\varepsilon(x, 1) = 0, & x \in \mathbb{R}^2 \\ -\varepsilon^2 \Delta_x V^\varepsilon - \partial_z^2 V^\varepsilon &= |\psi^\varepsilon|^2, & (1.7.9) \\ V^\varepsilon(x, 0) &= V^\varepsilon(x, 1) = 0, & x \in \mathbb{R}^2. \end{aligned}$$

La différence majeure avec le cas modèle est le comportement asymptotique du potentiel de Poisson V^ε défini par (1.7.9). En effet, on démontre que son asymptotique est donnée par le potentiel \mathcal{W} défini par

$$\begin{aligned} -\partial_z^2 \mathcal{W}(x, z) &= |\psi^\varepsilon(x, z)|^2, & (x, z) \in \mathbb{R}^2 \times (0, 1) \\ \mathcal{W}(x, 0) &= \mathcal{W}(x, 1) = 0, & x \in \mathbb{R}^2. \end{aligned}$$

Cette équation admet une unique solution qui est explicite et s'écrit

$$\mathcal{W}(t, x, z) := \int_0^1 [z(1 - z') - (z - z')\mathbb{1}_{z' \leq z}] |\psi^\varepsilon(t, x, z')|^2 dz'.$$

Cette expression met clairement en évidence la différence principale avec le problème modèle. En effet, dans ce cas, le potentiel asymptotique de Poisson *dépend de la variable z* et n'est donc plus transparent au cours de l'opération de filtrage par le Hamiltonien transverse $-\partial_z^2 + V_2(z)$. Dès lors, en remplaçant le potentiel de Poisson par son asymptotique dans l'équation filtrée

$$i\partial_t \phi^\varepsilon = (-\Delta_x + V_1(x))\phi^\varepsilon + e^{itH_z/\varepsilon^2} V^\varepsilon (|e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon|^2) e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon$$

on obtient

$$i\partial_t \phi^\varepsilon = (-\Delta_x + V_1(x))\phi^\varepsilon + e^{itH_z/\varepsilon^2} \mathcal{W} (|e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon|^2) e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon$$

qui ne peut être plus simplifiée.

Pour pallier ce problème, on raisonne de nouveau ici en deux temps. Dans un premier temps, on étudie la convergence du modèle (1.7.8)-(1.7.9) vers un modèle intermédiaire où le potentiel de Poisson V^ε est remplacé par son asymptotique \mathcal{W} . Dans un second temps, on étudie uniquement le système formé par le modèle intermédiaire filtré. La dépendance en z du potentiel \mathcal{W} fait apparaître un terme nonlinéaire fortement oscillant en temps auquel on applique un procédé de moyennisation en temps.

Bibliographie

- [1] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Delebecque-Fendt, F. ; Méhats, F. *The strongly confined Schrödinger-Poisson system for the transport of electrons in a nanowire.*, SIAM J. Appl. Math. **69** (2009), no. 4, 1162-1173.
- [2] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Méhats, F. *Time averaging for the strongly confined nonlinear Schrödinger equation, using almost periodicity.*, J. Diff. Eq. **245** (2008), no 1, 154-200
- [3] Ben Abdallah, N. ; Méhats, F. ; Pinaud, O. *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement*, SIAM J. Math. Anal, 36 (2005), 986-1013.
- [4] Cazenave, T. *Semilinear Schrödinger Equations*, Lecture Notes AMS, (2003).
- [5] Reed, M. ; Simon, B. *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. 1–4, Academic Press, New York, San Francisco, London, 1972–1979.

Chapitre 2

Modélisation du transport quantique dans un nanofil

Sommaire

2.1	Introduction	63
2.1.1	The physical problem and the singularly perturbed system	63
2.1.2	Scaling of the initial data and formal limit	64
2.1.3	Statement of the main result	66
2.2	Approximation of the Poisson kernel	67
2.3	Proof of the main theorem	71
2.3.1	Energy estimate for well-prepared data	71
2.3.2	The convergence theorem	72
2.3.3	Towards a more precise approximation	74

Ce chapitre a fait l'objet d'un article rédigé en collaboration avec N. Ben Abdallah, F. Castella et F. Méhats, paru sous le titre *The strongly confined Schrödinger-Poisson system for the transport of electrons in a nanowire*, SIAM J. Appl. Math. **69** (2009), no. 4, 1162-1173.

2.1 Introduction

2.1.1 The physical problem and the singularly perturbed system

Artificially confined structures are now routinely realized in the nanoelectronic industry and the functioning of many electronic devices is based on the transport of charged particles which are bounded in transversal directions, see e.g. [1, 2, 10, 13]. The confinement can be typically monodimensional like in quantum wells where two directions remain for the transport, or bidimensional like in quantum wires where the transport is in dimension one. In this work we are interested in the second case, and this paper is devoted to the rigorous derivation of a dynamic one-dimensional quantum model with space-charge effects describing the transport of electrons confined in a nanowire. Compared with some previous works that treat problems of quantum confinement, as for instance [9] about an asymptotic model for two particles on the surface of a nanotube (see also references therein), our concern here is to deal more specifically with the nonlinear Poisson term.

Our strategy is inspired from the one in [4, 5, 3] and consists in an asymptotic analysis of the three-dimensional Schrödinger-Poisson system (or Hartree system) –that will be referred to as our “starting model”– with a singular perturbation modeling a strong potential confining the electron gas in a wire. The interesting point concerning the reduced model obtained in the limit is that the nonlinearity describing space-charge effects is now *localized*, this reduced model taking the form of a cubic defocusing nonlinear Schrödinger equation.

Let us describe the starting model. The space variable is written (x, z_1, z_2) , where $x \in \mathbb{R}$ is the direction in which the electron gas is transported free from any external force and $z = (z_1, z_2) \in \mathbb{R}^2$ are the confined directions. We consider the following singularly perturbed Schrödinger-Poisson system :

$$i\partial_t \Psi^\varepsilon = -\Delta \Psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} V_c \left(\frac{z}{\varepsilon} \right) \Psi^\varepsilon + \mathbb{V}^\varepsilon \Psi^\varepsilon, \quad (2.1.1)$$

$$\mathbb{V}^\varepsilon = \frac{1}{4\pi r} * (|\Psi^\varepsilon|^2). \quad (2.1.2)$$

The unknown in this system is the pair $(\Psi^\varepsilon, \mathbb{V}^\varepsilon)$ made of the electronic wave function Ψ^ε and the self-consistent potential \mathbb{V}^ε due to space charge effects, written here as a convolution with the Poisson kernel. We use the notation $r(x, z) = \sqrt{x^2 + |z|^2}$. The main modeling assumption is that a strong external potential is applied to the gas, written here $\frac{1}{\varepsilon^2} V_c(\frac{z}{\varepsilon})$, where $V_c(z)$ is a prescribed function satisfying the following assumption.

Assumption 2.1.1. *The function $V_c : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$ belongs to $L_{loc}^2(\mathbb{R}^2)$ and there exists $\alpha > 0$ and $C > 0$ such that*

$$V_c(z) \geq C |z|^\alpha.$$

The crucial assumption here is the growth at infinity, which determines the strength of the confinement. The parameter $\varepsilon \in (0, 1)$ is the scaled thickness of the electron gas. As we will see after a rescaling in the next section, the normalisation term $\frac{1}{\varepsilon^2}$ is natural in order to balance the strong external potential with the Laplace operator in the z variable.

This paper studies the asymptotic behaviour of $(\Psi^\varepsilon, \mathbb{V}^\varepsilon)$ as ε goes to zero. Of course, an initial data $\Psi^\varepsilon(0, x, z)$ needs to be prescribed for (2.1.1), whose specific form is made precise in the next section.

2.1.2 Scaling of the initial data and formal limit

In this section, we derive heuristically the asymptotic model satisfied by the solution of (2.1.1)–(2.1.2) as ε goes to zero. Precise and rigorous statements will be made in the next section. Let us introduce the following notation for averages upon the transversal variables :

$$\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} f(z) dz.$$

The singular term $\frac{1}{\varepsilon^2} V_c(\frac{z}{\varepsilon})$ in the Schrödinger equation (2.1.1) induces a concentration of the density on the axis $z = 0$. We expect that, as $\varepsilon \rightarrow 0$, the density takes the form of a line density multiplied by a delta function :

$$|\Psi^\varepsilon(t, x, z)|^2 \sim \langle |\Psi^\varepsilon(t, x, \cdot)|^2 \rangle \delta(z). \quad (2.1.3)$$

The crucial point is the consequence of (2.1.3) on the selfconsistent potential. Indeed, we can prove (see Proposition 2.2.1) that, near the axis $z = 0$, the solution of (2.1.2) looks like

$$\mathbb{V}^\varepsilon(t, x, z) \sim -\frac{1}{2\pi} \log \varepsilon \langle |\Psi^\varepsilon(t, x, \cdot)|^2 \rangle. \quad (2.1.4)$$

This estimate suggests the following choice of initial data : we choose $\Psi^\varepsilon(0, x, z)$ to be small, of order $|\log \varepsilon|^{-1/2}$ (e.g. in $L^2(\mathbb{R}^3)$).

In order to observe the system at the scale of the gas, we work with rescaled space variables, setting

$$\Psi^\varepsilon(t, x, z) = \frac{1}{\varepsilon \sqrt{|\log \varepsilon|}} \psi^\varepsilon \left(t, x, \frac{z}{\varepsilon} \right), \quad \mathbb{V}^\varepsilon(t, x, z) = \frac{1}{|\log \varepsilon|} V^\varepsilon \left(t, x, \frac{z}{\varepsilon} \right).$$

The system in the new unknowns $\psi^\varepsilon, V^\varepsilon$ becomes

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = -\partial_x^2 \psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} H_z \psi^\varepsilon + \frac{1}{|\log \varepsilon|} V^\varepsilon \psi^\varepsilon, \quad (2.1.5)$$

$$V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} * |\psi^\varepsilon|^2, \quad r^\varepsilon(x, z) = \sqrt{x^2 + \varepsilon^2 |z|^2}, \quad (2.1.6)$$

$$\psi^\varepsilon(0, x, z) = \psi_0^\varepsilon(x, z), \quad (2.1.7)$$

where the Hamiltonian in the z direction is

$$H_z = -\Delta_z + V_c(z).$$

Inserting (2.1.4) in (2.1.5), we obtain that, asymptotically, ψ^ε satisfies

$$i\partial_t\psi^\varepsilon = -\partial_x^2\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2}H_z\psi^\varepsilon + \frac{1}{2\pi}\langle|\psi^\varepsilon|^2\rangle\psi^\varepsilon, \quad (2.1.8)$$

$$\psi^\varepsilon(0, x, z) = \psi_0^\varepsilon(x, z). \quad (2.1.9)$$

This is our reduced model. An elementary remark is, the term $\langle|\psi^\varepsilon|^2\rangle$ in the nonlinearity does not depend on the z variable. It is thus easy to filter out the oscillations in time induced by the $\frac{1}{\varepsilon^2}H_z$ term. Indeed the function

$$\phi^\varepsilon = e^{itH_z/\varepsilon^2}\psi^\varepsilon$$

satisfies the following problem, independent of ε :

$$i\partial_t\phi^\varepsilon = -\partial_x^2\phi^\varepsilon + \frac{1}{2\pi}\langle|\phi^\varepsilon|^2\rangle\phi^\varepsilon, \quad (2.1.10)$$

$$\phi^\varepsilon(0, x, z) = \psi_0^\varepsilon(x, z), \quad (2.1.11)$$

where we used the fact that e^{itH_z/ε^2} is an isometry on $L_z^2(\mathbb{R}^2)$, ie

$$\langle|\phi^\varepsilon|^2\rangle = \langle|\psi^\varepsilon|^2\rangle.$$

The limit model can be seen as a system of nonlinear Schrödinger equations (NLS) in dimension one. To see this, let us introduce the eigenfunctions $(\chi_k(z))_{k \geq 1}$ of the operator H_z and the associated eigenvalues $(E_k)_{k \geq 1}$. Remark that Assumption 4.1.6 implies the operator H_z is self-adjoint (see e.g. [12], vol 2, Theorem X.28) and, defined as a sum of quadratic forms, is an operator with compact resolvent (see [12], vol. 4, Theorem XIII.67). It possesses purely discrete spectrum and a complete set of eigenfunctions. The reduced model (2.1.10), (2.1.11) can be projected on the χ_k 's and is equivalent to the system

$$i\partial_t\varphi_k = -\partial_x^2\varphi_k + \frac{1}{2\pi}\left(\sum_{j=1}^{\infty}|\varphi_j|^2\right)\varphi_k, \quad (2.1.12)$$

$$\varphi_k(0, x) = \int_{\mathbb{R}}\psi_0(x, z)\chi_k(z)dz, \quad k \in \mathbb{N}^*. \quad (2.1.13)$$

The solution of the rescaled initial problem is then –formally– asymptotically close to

$$\psi^\varepsilon(t, x, z) = \sum_{k=1}^{\infty}e^{-itE_k/\varepsilon^2}\varphi_k(t, x)\chi_k(z).$$

2.1.3 Statement of the main result

Let us introduce the energy space

$$\mathcal{H} = \{u \in H^1(\mathbb{R}^3), \sqrt{V_c}u \in L^2(\mathbb{R}^3)\}, \quad (2.1.14)$$

endowed with the norm

$$\|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^3)}^2 + \|\sqrt{V_c}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \|\partial_x u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|H_z^{1/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2.$$

Remark that Assumption 4.1.6 yields the following control for functions in the energy space :

$$\forall u \in \mathcal{H} \quad \int_{\mathbb{R}^3} |z|^\alpha |u|^2 dx dz \leq C \|u\|_{\mathcal{H}}^2. \quad (2.1.15)$$

Consider for the rescaled starting model (2.1.5)–(2.1.7) a sequence of initial data $(\psi_0^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ satisfying the following assumption.

Assumption 2.1.2. *The sequence $(\psi_0^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ is uniformly bounded in \mathcal{H} and converges in $L^2(\mathbb{R}^3)$ to a function ψ_0 .*

Standard techniques [6, 8, 11], allow to prove that for any $\varepsilon \in (0, 1)$ the three-dimensional Schrödinger-Poisson system (2.1.5)–(2.1.7) admits a unique global weak solution $(\psi^\varepsilon, V^\varepsilon)$ for $t \in \mathbb{R}$, in the energy space. In order to analyze its limit as $\varepsilon \rightarrow 0$, let us summarize the available estimates on ψ^ε . The first one is the L^2 estimate. For all t we have

$$\|\psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 = \|\psi_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq C. \quad (2.1.16)$$

Unfortunately, (see Proposition 2.2.1), this estimate alone does not enable to bound the selfconsistent potential, and one needs at least an estimate on the derivative of ψ^ε with respect to x . Let us now examine the second natural estimate for the Schrödinger-Poisson system, namely the energy estimate. It reads, in rescaled variables :

$$\begin{aligned} \|\partial_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|H_z^{1/2} \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \frac{1}{|\log \varepsilon|} \|V^\varepsilon(t) |\psi^\varepsilon(t)|^2\|_{L^1(\mathbb{R}^3)} \\ = \|\partial_x \psi_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|H_z^{1/2} \psi_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \frac{1}{|\log \varepsilon|} \|V^\varepsilon(0) |\psi_0^\varepsilon|^2\|_{L^1(\mathbb{R}^3)}. \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

Multiplying this equation by ε^2 , one can deduce a bound for $\|H_z^{1/2} \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$ (see the beginning of Section 2.3), *but not for* $\|\partial_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}$. However, for a certain set of well-prepared initial data it can be easily proved that this quantity is bounded. As it was remarked in [5], it suffices to consider initial data which are polarized on the first eigenmode χ_1 of the transverse Hamiltonian H_z . This leads to the following theorem, which is our main result.

Theorem 2.1.3. *Under Assumptions 4.1.6 and 3.1.18, assume moreover that the initial data is nearly polarized on the first eigenmode χ_1 of H_z , associated to the eigenvalues E_1 in the sense :*

$$\|(H_z - E_1)^{1/2} \psi_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C \varepsilon. \quad (2.1.18)$$

Then there exist $C > 0$ such that the solution ψ^ε of (2.1.5)–(2.1.7) satisfies :

$$\|\partial_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2} \leq C, \quad \text{independently of } \varepsilon > 0 \text{ and } t \in \mathbb{R}, \quad (2.1.19)$$

and the following convergence result holds, for all $T > 0$,

$$\left\| \psi^\varepsilon(t, x, z) - e^{-itE_1/\varepsilon^2} \varphi(t, x) \chi_1(z) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \text{ uniformly on } [-T, T],$$

where $\varphi(t, x)$ solves the cubic defocusing NLS equation

$$i\partial_t \varphi = -\partial_x^2 \varphi + \frac{1}{2\pi} |\varphi|^2 \varphi, \quad \varphi(0, x) = \int_{\mathbb{R}} \psi_0(x, z) \chi_1(z) dz. \quad (2.1.20)$$

Remark that (2.1.20) is a particular case of the limit model (2.1.12), (2.1.13) derived formally in the previous subsection. The keystone of the convergence proof is the L^2 estimate (2.1.19) of $\partial_x \psi^\varepsilon$. In the general case of initial data bounded in \mathcal{H} but *not* polarized on the first eigenmode, the following partial result can be proved as an easy extension of Theorem 2.1.3. *Under the assumption that (2.1.19) holds, the function $e^{itH_z/\varepsilon^2} \psi^\varepsilon$ converges locally uniformly in $L^2(\mathbb{R}^3)$ to the solution ϕ of*

$$i\partial_t \phi = -\partial_x^2 \phi + \frac{1}{2\pi} \langle |\phi|^2 \rangle \phi, \quad \phi(0, x, z) = \psi_0(x, z).$$

The outline of the paper is the following. In Section 2.2, we give an asymptotic expansion as $\varepsilon \rightarrow 0$ of the solution of the rescaled Poisson equation (2.1.6), for wavefunctions ψ^ε in a suitable functional space. Section 2.3 is devoted to the proof of Theorem 2.1.3. We use as a first step the energy estimate for well-prepared data in order to get an estimate of $\|\partial_x \psi^\varepsilon\|_{L^2}$ in that case. We conclude the proof using a stability result for the cubic NLS equation.

2.2 Approximation of the Poisson kernel

In this section, we study the convolution with the Poisson kernel when ε is close to zero. We consider the Poisson potential V^ε , after the rescaling $z \mapsto \varepsilon z$, $x \mapsto x$, and let $\varepsilon \rightarrow 0$ in (2.1.6). In order to make a precise statement, let us first recall the definition of the finite part of a singular integral. For $u \in C^{0,\eta}(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$, with $\eta \in (0, 1)$, we have

$$\begin{aligned} \text{FP} \int_{\mathbb{R}} \frac{u(x')}{|x - x'|} dx' &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(\int_{|x-x'| > \eta} \frac{u(x')}{|x - x'|} dx' + 2u(x) \log \eta \right). \\ &= \int_{|x-x'| < 1} \frac{u(x') - u(x)}{|x - x'|} dx' + \int_{|x-x'| > 1} \frac{u(x')}{|x - x'|} dx'. \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

Both quantities are well defined whenever $u \in \mathcal{C}^{0,\eta}(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$. Our aim here is to prove the following result.

Proposition 2.2.1. *Consider ψ in the energy space \mathcal{H} defined by (2.1.14), and let*

$$G^\varepsilon(\psi) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{|\psi(x', z')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + \varepsilon^2|z-z'|^2}} dx' dz'.$$

Then we have the following asymptotic expansion :

$$G^\varepsilon(\psi) = -2 \log \varepsilon \langle |\psi(x, \cdot)|^2 \rangle + R_1(\psi) + R_2^\varepsilon(\psi), \quad (2.2.2)$$

where

$$R_1(\psi) = -2 \int_{\mathbb{R}^2} \log |z-z'| |\psi(x, z')|^2 dz' + 2 \log 2 \langle |\psi(x, \cdot)|^2 \rangle + \text{FP} \int_{\mathbb{R}} \frac{\langle |\psi(x', \cdot)|^2 \rangle}{|x-x'|} dx'$$

and for all $u \in \mathcal{H}$ we have

$$\|R_1(\psi)u\|_{L^2} \leq C \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}}, \quad \|R_2^\varepsilon(\psi)u\|_{L^2} \leq C_\beta \varepsilon^\beta \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}}, \quad (2.2.3)$$

for all $\beta < \min(1/2, \alpha/2)$, α being defined according to Assumption 4.1.6.

Proof. Let us first list some useful available estimates deduced from Sobolev embeddings and from (2.1.15) : for all $u \in \mathcal{H}$, we have

$$\|\partial_x u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \|u\|_{L_x^\infty L_z^2} + \|\partial_z u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} + \|(1+|z|^{\alpha/2})u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C \|u\|_{\mathcal{H}}. \quad (2.2.4)$$

Let us now decompose

$$\begin{aligned} G^\varepsilon(\psi) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi(x', z')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + \varepsilon^2|z-z'|^2}} dx' dz' \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \int_{|x-x'| < 1} \frac{|\psi(x', z')|^2 - |\psi(x, z')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + \varepsilon^2|z-z'|^2}} dx' dz' \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^2} \int_{|x-x'| < 1} \frac{|\psi(x, z')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + \varepsilon^2|z-z'|^2}} dx' dz' \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^2} \int_{|x-x'| \geq 1} \frac{|\psi(x', z')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + \varepsilon^2|z-z'|^2}} dx' dz' \\ &= I_1 + I_2 + I_3. \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

We first analyze the term I_1 by rewriting it as

$$I_1 = \int_{\mathbb{R}^2} \int_{|x-x'| < 1} \frac{|\psi(x', z')|^2 - |\psi(x, z')|^2}{|x-x'|} dx' dz' + r_1^\varepsilon, \quad (2.2.6)$$

where r_1^ε is to be upper-bounded later. Using

$$|\psi(x, z) - \psi(x', z)| \leq C|x - x'|^{1/2} \left(\int_{\mathbb{R}} |\partial_x \psi(y, z)|^2 dy \right)^{1/2}, \quad (2.2.7)$$

we deduce that the first term in the right-hand side is well defined and can be bounded thanks to (2.2.4) :

$$\left| \int_{\mathbb{R}^2} \int_{|x-x'|<1} \frac{|\psi(x', z')|^2 - |\psi(x, z')|^2}{|x - x'|} dx' dz' \right| \leq C \|\partial_x \psi\|_{L^2} \|\psi\|_{L_x^\infty L_z^2} \int_0^1 \frac{1}{\xi^{1/2}} d\xi \leq C \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2.$$

In order to estimate the remainder r_1^ε , we remark that for all $\gamma \in [0, 2]$ there holds :

$$0 \leq \frac{1}{|x - x'|} - \frac{1}{\sqrt{(x - x')^2 + \varepsilon^2|z - z'|^2}} \leq \frac{\varepsilon^\gamma |z - z'|^\gamma}{|x - x'|^{1+\gamma}}. \quad (2.2.8)$$

Pick β such that $0 < \beta < \min(\frac{1}{2}, \frac{\alpha}{2})$ and take $\gamma = \beta$. One can estimate the remainder as

$$|r_1^\varepsilon| \leq C\varepsilon^\beta \int_{\mathbb{R}^2} \int_{|x-x'|<1} \frac{\|\partial_x \psi(\cdot, z')\|_{L_x^2}}{|x - x'|^{1/2+\beta}} (|z|^\beta + |z'|^\beta) (|\psi(x', z')| + |\psi(x, z')|) dx' dz',$$

where we used (4.2.33) and (2.2.7). By the Cauchy-Schwarz estimate, for all $u \in \mathcal{H}$ we get

$$\|r_1^\varepsilon u\|_{L^2} \leq C\varepsilon^\beta \|\partial_x \psi\|_{L^2} (\| |z|^\beta \psi \|_{L^2} \|u\|_{L_x^\infty L_z^2} + \|\psi\|_{L_x^\infty L_z^2} \| |z|^\beta u \|_{L^2}) \int_0^1 \frac{1}{\xi^{1/2+\beta}} d\xi + C\varepsilon^\beta \|\partial_x \psi\|_{L^2} \|uw\|_{L^2}$$

with

$$w(x) := \int_{|x-x'|<1} \frac{(\int_{\mathbb{R}^2} |z'|^{2\beta} |\psi(x', z')|^2 dz')^{1/2}}{|x - x'|^{1/2+\beta}} dx'.$$

The first line of the right-hand side is bounded thanks to (2.2.4) and $\beta < \frac{1}{2}$. To bound the last term, we use Hölder and Hardy-Littlewood-Sobolev inequalities :

$$\|uw\|_{L^2} \leq \|w\|_{L^{1/\beta}} \|u\|_{L_x^{2/(1-2\beta)} L_z^2} \leq C \| |z|^\beta \psi \|_{L^2} \|u\|_{L_x^{2/(1-2\beta)} L_z^2} \leq C \|\psi\|_{\mathcal{H}} \|u\|_{\mathcal{H}},$$

where we used (2.2.4) and the fact that $\beta < \frac{\alpha}{2}$ and $\frac{2}{1-2\beta} > 2$. Finally, we have

$$\|r_1^\varepsilon u\|_{L^2} \leq C \varepsilon^\beta \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}}.$$

For the term I_2 , a direct computation of the integral with respect to x' gives

$$I_2 = 2(-\log \varepsilon + \log 2) \langle |\psi(x, \cdot)|^2 \rangle - 2 \int_{\mathbb{R}^2} \log |z - z'| |\psi(x, z')|^2 dz' + r_2^\varepsilon, \quad (2.2.9)$$

with

$$r_2^\varepsilon = 2 \int_{\mathbb{R}^2} |\psi(x, z')|^2 \log \left(\frac{1 + \sqrt{1 + \varepsilon^2 |z - z'|^2}}{2} \right) dz'.$$

Let us first estimate the dominant term in (3.3.24). The term $\langle |\psi(x, \cdot)|^2 \rangle$ is clearly bounded in L^∞ by (2.2.4). In order to bound the second term

$$v = \int_{\mathbb{R}^2} \log |z - z'| |\psi(x, z')|^2 dz',$$

we remark that

$$|\log |z - z'|| \leq C \left(\frac{\mathbf{1}_{|z-z'|<1}}{|z-z'|^{1/2}} + 1 + |z|^{\alpha/2} + |z'|^{\alpha/2} \right)$$

and from Hardy-Littlewood-Sobolev and Gagliardo-Nirenberg inequalities, we get, pointwise in x ,

$$\int_{|z-z'|<1} \frac{1}{|z-z'|^{1/2}} |\psi(x, z')|^2 dz' \leq C \|\psi(x, \cdot)\|_{L^4}^2 \leq C \|\psi(x, \cdot)\|_{L^2} \|\partial_z \psi(x, \cdot)\|_{L^2}.$$

Hence, for all $u \in \mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} \|uv\|_{L^2} &\leq C \|\psi\|_{L_x^\infty L_z^2} \|\partial_z \psi\|_{L^2} \|u\|_{L_x^\infty L_z^2} + C \| |z|^{\alpha/2} \psi \|_{L^2}^2 \|u\|_{L_x^\infty L_z^2} \\ &\quad + C \|\psi\|_{L_x^\infty L_z^2}^2 \|(1 + |z|^{\alpha/2})u\|_{L^2} \leq C \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}}, \end{aligned}$$

where we used (2.2.4). Let us now estimate the remainder r_2^ε . With the above choice of $\beta \leq \frac{1}{2} < 2$, we have

$$\log \left(\frac{1 + \sqrt{1 + t^2}}{2} \right) \leq Ct^\beta \quad \text{for all } t > 0,$$

thus, for all $u \in \mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} \|r_2^\varepsilon u\|_{L^2} &\leq C \varepsilon^\beta \|\psi\|_{L_x^\infty L_z^2} (\| |z|^\beta \psi \|_{L^2} \|u\|_{L_x^\infty L_z^2} + \|\psi\|_{L_x^\infty L_z^2} \| |z|^\beta u \|_{L^2}) \\ &\leq C \varepsilon^\beta \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}}, \end{aligned}$$

where we used again (2.2.4) and $\beta < \frac{\alpha}{2}$.

Consider now the term I_3 , that we write

$$I_3 = \int_{|x-x'|\geq 1} \frac{\langle |\psi(x', z')|^2 \rangle}{|x-x'|} dx' + r_3^\varepsilon, \quad (2.2.10)$$

with the following immediate bound for the dominant term :

$$0 \leq \int_{|x-x'|\geq 1} \frac{\langle |\psi(x', z')|^2 \rangle}{|x-x'|} dx' \leq \|\psi\|_{L^2}^2.$$

Moreover, from (4.2.33), the following estimate can be deduced for the remainder :

$$\begin{aligned} |r_3^\varepsilon| &\leq C \varepsilon^\beta \int_{\mathbb{R}^2} \int_{|x-x'| \geq 1} \frac{|z-z'|^\beta |\psi(x', z')|^2}{|x-x'|^{1+\beta}} dx' dz' \\ &\leq C \varepsilon^\beta \left(|z|^\beta \|\psi\|_{L^2}^2 + \||z|^{\beta/2} \psi\|_{L^2}^2 \right). \end{aligned}$$

This is enough to conclude that

$$\|r_3^\varepsilon u\|_{L^2} \leq C \varepsilon^\beta \|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 \|u\|_{\mathcal{H}}.$$

To complete the proof of the proposition, it suffices to gather (2.2.6), (3.3.24) and (3.3.25), then to use (2.2.1). \square

2.3 Proof of the main theorem

As we said in the introduction, the system (2.1.5)–(2.1.7) admits two natural conservation laws : the conservation of the L^2 norm (2.1.16) and the energy estimate (2.1.17). Whereas it is immediate to deduce from the first one a uniform estimate of the L^2 norm of ψ^ε , let us examine the second one. Multiplied by ε^2 , it gives

$$\|H_z^{1/2} \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq \varepsilon^2 \|\partial_x \psi_0^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|\psi_0^\varepsilon\|_{\mathcal{H}}^2 + \frac{\varepsilon^2}{|\log \varepsilon|} \|V^\varepsilon(0) |\psi_0^\varepsilon|^2\|_{L^1(\mathbb{R}^3)}. \quad (2.3.1)$$

From Proposition 2.2.1 and the Cauchy-Schwarz inequality, we get

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\log \varepsilon|} \|V^\varepsilon(0) |\psi_0^\varepsilon|^2\|_{L^1} &\leq \frac{1}{|\log \varepsilon|} \|V^\varepsilon(0) \psi_0^\varepsilon\|_{L^2} \|\psi_0^\varepsilon\|_{L^2} \\ &= \frac{1}{4\pi |\log \varepsilon|} \|G^\varepsilon(\psi_0) \psi_0^\varepsilon\|_{L^2} \|\psi_0^\varepsilon\|_{L^2} \leq C \|\psi_0^\varepsilon\|_{\mathcal{H}}^4, \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

thus

$$\|H_z^{1/2} \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq \|\psi_0^\varepsilon\|_{\mathcal{H}}^2 + C \varepsilon^2 \|\psi_0^\varepsilon\|_{\mathcal{H}}^4, \quad (2.3.3)$$

which is uniformly bounded, thanks to Assumption 3.1.18. In order to have a bound for ψ^ε in the energy space \mathcal{H} , it remains to bound the L^2 norm of $\partial_x \psi^\varepsilon$. This is done in the next subsection for well-prepared initial data.

2.3.1 Energy estimate for well-prepared data

We name "well-prepared data" a sequence of initial data $(\psi_0^\varepsilon)_{\varepsilon>0}$ in \mathcal{H} which are polarized on the first eigenmode χ_1 of H_z , associated to the eigenvalue E_1 in the sense (2.1.18).

We now prove that, under Assumptions 4.1.6, 3.1.18 and the assumption of well-prepared data, estimate (2.1.19) holds true. This only relies on the two conservation laws (2.1.16) and (2.1.17). Since E_1 is the bottom of the spectrum of H_z , we have

$$\|H_z^{1/2}u\|_{L^2}^2 - E_1\|u\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{u}(H_z - E_1)u \, dx dz = \|(H_z - E_1)^{1/2}u\|_{L^2}^2,$$

thus subtracting $\frac{E_1}{\varepsilon^2} \times$ (2.1.16) to (2.1.17) leads to the identity :

$$\begin{aligned} \|\partial_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|(H_z - E_1)^{1/2} \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + \frac{1}{|\log \varepsilon|} \|V^\varepsilon(t) |\psi^\varepsilon(t)|^2\|_{L^1} \\ = \|\partial_x \psi_0^\varepsilon\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|(H_z - E_1)^{1/2} \psi_0^\varepsilon\|_{L^2}^2 + \frac{1}{|\log \varepsilon|} \|V^\varepsilon(0) |\psi_0^\varepsilon|^2\|_{L^1}. \end{aligned}$$

By Assumption 3.1.18, (2.1.18) and (2.3.2), the right-hand side of this inequality is bounded independently of ε . Hence

$$\|\partial_x \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|(H_z - E_1)^{1/2} \psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 \leq C. \quad (2.3.4)$$

This estimate has two consequences. First, with (2.3.3) it gives

$$\|\psi^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{H}} \leq C, \quad (2.3.5)$$

uniformly with respect to t . Second, this estimate shows that ψ^ε remains polarized on the first mode for all time. More precisely, denote

$$r^\varepsilon(t, x, z) = \psi^\varepsilon(t, x, z) - \chi_1(z) \int \psi^\varepsilon(t, x, z') \chi_1(z') dz'.$$

Remarking that $(H_z - E_1)^{1/2} \geq (E_2 - E_1)^{1/2} > 0$ in the operator sense on \mathcal{H} , it can be deduced from (2.3.4) the following estimate :

$$\|r^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{H}} \leq C\varepsilon. \quad (2.3.6)$$

2.3.2 The convergence theorem

In this section, we prove the convergence result stated in Theorem 2.1.3. Let

$$\psi^\varepsilon(t, x, z) = e^{-itE_1/\varepsilon^2} \varphi_1^\varepsilon(t, x) \chi_1(z) + r^\varepsilon(t, x, z). \quad (2.3.7)$$

Inserting (2.3.7) in (2.1.5) and projecting on $Span(\chi_1)$ leads to the following equation

$$i\partial_t \varphi_1^\varepsilon = -\partial_x^2 \varphi_1^\varepsilon + \frac{e^{itE_1/\varepsilon^2}}{|\log \varepsilon|} \int_{\mathbb{R}^2} V^\varepsilon(t, x, z) \psi^\varepsilon(t, x, z) \chi_1(z) dz. \quad (2.3.8)$$

To deal with the non linear term, we use the decomposition given by Proposition 2.2.1, with $V^\varepsilon = \frac{1}{4\pi}G^\varepsilon(\psi^\varepsilon)$. Remarking that, by orthogonality, we have

$$\langle |\psi^\varepsilon|^2 \rangle = |\varphi_1^\varepsilon|^2 + \langle |r^\varepsilon|^2 \rangle,$$

we get from (2.2.2)

$$\frac{e^{itE_1/\varepsilon^2}}{|\log \varepsilon|} \int_{\mathbb{R}^2} V^\varepsilon(t, x, z) \psi^\varepsilon(t, x, z) \chi_1(z) dz = \frac{1}{2\pi} |\varphi_1^\varepsilon|^2 \varphi_1^\varepsilon + f^\varepsilon,$$

with

$$f^\varepsilon = \frac{1}{2\pi} \langle |r^\varepsilon|^2 \rangle \varphi_1^\varepsilon + \frac{e^{itE_1/\varepsilon^2}}{4\pi |\log \varepsilon|} \int_{\mathbb{R}^2} (R_1(\psi^\varepsilon) + R_2^\varepsilon(\psi^\varepsilon)) \psi^\varepsilon \chi_1 dz.$$

We clearly have

$$\|f^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq C \left\| \langle |r^\varepsilon|^2 \rangle \right\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \|\psi^\varepsilon\|_{L^2} + \frac{C}{|\log \varepsilon|} (\|R_1(\psi^\varepsilon)\psi^\varepsilon\|_{L^2} + \|R_2^\varepsilon(\psi^\varepsilon)\psi^\varepsilon\|_{L^2}).$$

In order to bound the first term, we notice that by Cauchy-Schwarz

$$|\partial_x \langle |r^\varepsilon|^2 \rangle|^{1/2} = \frac{\left| \operatorname{Re} \int \bar{r}^\varepsilon \partial_x r^\varepsilon dz \right|}{\langle |r^\varepsilon|^2 \rangle^{1/2}} \leq \|\partial_x r^\varepsilon\|_{L_z^2}$$

thus by the Sobolev embedding $H^1(\mathbb{R}) \hookrightarrow L^\infty(\mathbb{R})$

$$\left\| \langle |r^\varepsilon|^2 \rangle \right\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq C \left\| \langle |r^\varepsilon|^2 \rangle^{1/2} \right\|_{H^1(\mathbb{R})}^2 \leq C \left(\|r^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|\partial_x r^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \right) \leq C\varepsilon^2,$$

where we used (2.3.6). Therefore, one deduces directly from (2.2.3) and (2.3.5) that

$$\|f^\varepsilon\|_{L^2(\mathbb{R})} \leq \frac{C}{|\log \varepsilon|}. \quad (2.3.9)$$

Now, the conclusion stems from a stability result for the cubic NLS equation in dimension one. Indeed, the functions φ_1^ε and φ solve respectively

$$i\partial_t \varphi_1^\varepsilon = -\partial_x^2 \varphi_1^\varepsilon + \frac{1}{2\pi} |\varphi_1^\varepsilon|^2 \varphi_1^\varepsilon + f^\varepsilon, \quad \varphi_1^\varepsilon(0, x) = \int_{\mathbb{R}} \psi_0^\varepsilon(x, z) \chi_1(z) dz. \quad (2.3.10)$$

and

$$i\partial_t \varphi = -\partial_x^2 \varphi + \frac{1}{2\pi} |\varphi|^2 \varphi, \quad \varphi(0, x) = \int_{\mathbb{R}} \psi_0(x, z) \chi_1(z) dz. \quad (2.3.11)$$

We remark that both functions are bounded in $H^1(\mathbb{R})$, thus in $L^\infty(\mathbb{R})$, uniformly in time. For φ_1^ε this property is a direct consequence of (2.3.5), as $\|\varphi_1^\varepsilon\|_{H^1(\mathbb{R})} \leq \|\psi^\varepsilon\|_{\mathcal{H}}$. For φ , this stems from the energy conservation for the defocusing NLS equation

(2.3.11) and from the fact that, by Assumption 3.1.18, the initial data $\varphi(0, \cdot)$ belongs to $H^1(\mathbb{R})$. Then it is easily seen that for all t we have

$$\begin{aligned} \|\varphi_1^\varepsilon(t) - \varphi(t)\|_{L^2} &\leq \|\psi_0^\varepsilon - \psi_0\|_{L^2} + \int_0^t \left(\frac{1}{2\pi} \left\| |\varphi_1^\varepsilon|^2 \varphi_1^\varepsilon - |\varphi|^2 \varphi \right\|_{L^2} + \|f^\varepsilon(s)\|_{L^2} \right) ds \\ &\leq \|\psi_0^\varepsilon - \psi_0\|_{L^2} + C \int_0^t \|\varphi_1^\varepsilon(s) - \varphi(s)\|_{L^2} ds + \int_0^t \|f^\varepsilon(s)\|_{L^2} ds, \end{aligned}$$

so it follows from (2.3.9), from Assumption 3.1.18 and from the Gronwall lemma that for all $T > 0$

$$\|\varphi_1^\varepsilon - \varphi\|_{L^\infty([-T, T], L^2(\mathbb{R}))} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

□

2.3.3 Towards a more precise approximation

According to (2.3.9), the convergence rate in Theorem 2.1.3 is at most $\mathcal{O}\left(\frac{1}{|\log \varepsilon|}\right)$. To go further, Proposition 2.2.1 suggests the form of the next term in the approximation of the initial model. Taking into account the R^1 term, one can consider the following system :

$$i\partial_t \tilde{\varphi} = -\partial_x^2 \tilde{\varphi} + \frac{1}{2\pi} |\tilde{\varphi}|^2 \tilde{\varphi} + \frac{1}{4\pi |\log \varepsilon|} \left(\gamma |\tilde{\varphi}|^2 + \text{FP} \int_{\mathbb{R}} \frac{|\tilde{\varphi}(x')|^2}{|x - x'|} dx' \right) \tilde{\varphi} \quad (2.3.12)$$

where

$$\gamma = - \int_{\mathbb{R}^4} \log \left(\frac{|z - z'|^2}{4} \right) |\chi_1(z)|^2 |\chi_1(z')|^2 dz dz'$$

and

$$\tilde{\varphi}(0, x) = \int_{\mathbb{R}^2} \psi_0^\varepsilon(x, z) \chi_1(z) dz.$$

From the approximation result given by Proposition 2.2.1, one could expect a better convergence rate :

$$\|\psi^\varepsilon(t, x, z) - e^{itH_z/\varepsilon^2} \tilde{\varphi}(t, x) \chi_1(z)\|_{L^2} \leq C \varepsilon^\beta$$

with $\beta > 0$ as in Proposition 2.2.1. At the level of this article, this refined convergence result is a conjecture, as well as the existence of the solution $\tilde{\varphi}$ of (2.3.12). These questions will be investigated in a future work.

Acknowledgement. We acknowledge support from the ANR project no ANR-07-BLAN-0236 QUATRAN "Quantum transport in Nanostructures".

Bibliographie

- [1] T. Ando, B. Fowler, F. Stern, *Electronic properties of two-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys., **54** (1982), 437–672.
- [2] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semi-conductor Heterostructures*, Les Éditions de Physique, EDP Sciences, Les Ulis Cedex, France, 1992.
- [3] N. Ben Abdallah, F. Castella, F. Méhats, *Time averaging for the strongly confined nonlinear Schrödinger equation, using almost periodicity*, preprint.
- [4] N. Ben Abdallah, F. Méhats, O. Pinaud, *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement*, SIAM J. Math. Anal, **36** (2005), pp. 986-1013.
- [5] N. Ben Abdallah, F. Méhats, C. Schmeiser, R. M. Weishäupl, *The nonlinear Schrödinger equation with strong anisotropic harmonic potential*, SIAM J. Math. Anal., **37** (2005), no. 1, 189–199.
- [6] 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.
- [7] F. Castella, *L^2 solutions to the Schrödinger-Poisson system : Existence, uniqueness, time behaviour, and smoothing effects*, Math. Models Methods Appl. Sci., **7** (1997), pp. 1051-1083.
- [8] T. Cazenave, *Semilinear Schrodinger Equations*, Lecture Notes AMS, (2003).
- [9] H. Cornean, P. Duclos, B. Ricaud, *Effective models for excitons in carbon nanotubes*, Ann. Henri Poincaré **8** (2007), no. 1, 135–163.
- [10] D.K. Ferry, S.M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997.
- [11] 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.
- [12] M. Reed et B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. 1–4, Academic Press, New York, San Francisco, London, 1972–1979.
- [13] B. Vinter, C. Weisbuch, *Quantum Semiconductor Structures : Fundamentals & Applications*, Academic Press, 1991.

Chapitre 3

Résultat de masse effective pour le transport d'un gaz quantique bidimensionnel soumis à un champ magnétique fort

Sommaire

3.1	Introduction	79
3.1.1	The singularly perturbed problem	79
3.1.2	The physical scaling	80
3.1.3	Heuristics in a simplified case	81
3.1.4	Main result	83
3.1.5	Scheme of the proof	89
3.2	The nonlinear analysis	92
3.2.1	Preliminaries	94
3.2.2	A priori estimates	94
3.2.3	Proof of Proposition 3.2.1	97
3.3	Second order averaging	101
3.3.1	Well-posedness of the limit system	102
3.3.2	Proof of Proposition 3.3.2	104
3.4	Proof of the main theorem	107
3.A	Appendix A	109
3.B	Appendix B	111
3.C	Appendix C	115
3.D	Appendix D	118

Ce chapitre reproduit un article écrit en collaboration avec F. Méhats et est à paraître dans *Communication in Mathematical Physics* sous le titre *Effective mass theorem for a bidimensional electron gas under a strong magnetic field*.

3.1 Introduction

3.1.1 The singularly perturbed problem

Many electronic devices are based on the quantum transport of a bidimensional electron gas (2DEG) artificially confined in heterostructures at nanometer scales, see e.g. [2, 4, 20, 31]. In this article, we derive an asymptotic model for the quantum transport of a 2DEG subject to a strong uniform magnetic field which is parallel to the plane of the gas. The aim of this paper is to understand how the cyclotron motion competes with the effects of the potential confining the electrons and the nonlinear effects of the selfconsistent Poisson potential. Our tool is an asymptotic analysis from a singularly perturbed Schrödinger-Poisson system towards a reduced model of bidimensional quantum transport. In particular, we generalize in this context the notion of *cyclotron effective mass*, usually explicitly calculated in the simplified situation of a harmonic confinement potential [20, 28].

Our starting model is thus the 3D Schrödinger-Poisson system, singularly perturbed by a confinement potential and the strong magnetic field. The three-dimensional space variables are denoted by (x, y, z) and the associated canonical basis of \mathbb{R}^3 is denoted by (e_x, e_y, e_z) . The particles are subject to three effects : a confinement potential depending on the z variable, a uniform magnetic field applied to the gas along the e_y axis, and the selfconsistent Poisson potential. Given a small parameter $\varepsilon > 0$, which is the typical extension of the 2DEG in the z direction, our starting model is the following dimensionless Schrödinger-Poisson system :

$$i\partial_t \Psi^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} (-\partial_z^2 + B^2 z^2 + V_c(z)) \Psi^\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon} 2iBz\partial_x \Psi^\varepsilon - \Delta_{x,y} \Psi^\varepsilon + V^\varepsilon \Psi^\varepsilon, \quad (3.1.1)$$

$$\Psi^\varepsilon(0, x, y, z) = \Psi_0(x, y, z), \quad (3.1.2)$$

$$V^\varepsilon(t, x, y, z) = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} * |\Psi^\varepsilon|^2, \quad (3.1.3)$$

where we have denoted

$$r^\varepsilon(x, y, z) = \sqrt{x^2 + y^2 + \varepsilon^2 z^2}. \quad (3.1.4)$$

The scaling is discussed in the next subsection. This system describes the transport of electrons under the action of :

- The applied confinement potential $\frac{1}{\varepsilon^2} V_c(z)$, nonnegative, such that $V_c(z) \rightarrow +\infty$ as $|z| \rightarrow +\infty$. The precise assumptions of this potential are made below in Assumptions 4.1.1 and 3.1.2.
- The applied uniform magnetic field $\frac{B}{\varepsilon} e_y$ (with $B > 0$ fixed), which derives from the magnetic potential $\frac{1}{\varepsilon} Bz e_x$. We have chosen to work in the Landau gauge.
- The Poisson selfconsistent potential V^ε .

Note that (3.1.1) is equivalent to

$$i\partial_t\Psi^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2}(-\partial_z^2 + V_c(z))\Psi^\varepsilon + \left(i\partial_x - \frac{Bz}{\varepsilon}\right)^2\Psi^\varepsilon - \partial_y^2\Psi^\varepsilon + V^\varepsilon\Psi^\varepsilon. \quad (3.1.5)$$

The goal of this work is to exhibit an asymptotic system for (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) as $\varepsilon \rightarrow 0$.

Let us end this subsection with short bibliographical notes. In a linear setting, quantum motion constraint on a manifold has been studied for a long time by several authors, see [15, 18, 21, 30] and references therein. Nonlinear situations were studied more recently. The approximation of the Schrödinger-Poisson system with no magnetic field was studied when the electron gas is constraint in the vicinity of a plane in [7, 25] and when the gas is constraint on a line in [5]. When the nonlinearity depends locally on the density, as for the Gross-Pitaevskii equation, asymptotic models for confined quantum systems were studied in [8, 6, 12]. In classical setting, collisional models in situations of strong confinement have been studied in [17]. Finally, let us draw a parallel with the problem of homogenization of the Schrödinger equation in a large periodic potential, studied in [1] and [29]. At the limit $\varepsilon \rightarrow 0$, as noted above, we will obtain an homogenized system which takes the form of bidimensional Schrödinger equations with an effective mass in the x direction. However, this phenomenon is due to an averaging of the cyclotron motion induced by a strong magnetic field, and is not exactly the same notion as the usual effective mass for the transport in a lattice or in a crystal. Nevertheless, it is interesting to observe that the scaling used in [1, 29] in the case of a strong periodic potential is similar to the strong confinement scaling used in the present paper.

3.1.2 The physical scaling

In order to clarify the physical assumptions underlying our singularly perturbed system, let us derive (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) from the Schrödinger-Poisson system written in physical variables. This system reads as follows :

$$i\hbar\partial_t\Psi = \frac{1}{2m} \left(i\hbar\nabla - \frac{e\mathbf{B}}{c}\mathbf{z}e_x \right)^2 \Psi + e\mathbf{V}_c\Psi + e\mathbf{V}\Psi, \quad (3.1.6)$$

$$\mathbf{V} = \frac{e}{4\pi\varepsilon\sqrt{\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2 + \mathbf{z}^2}} * (|\Psi|^2). \quad (3.1.7)$$

Each dimensionless quantity in (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) is the associated physical quantity normalized by a typical scale :

$$x = \frac{\mathbf{x}}{\bar{x}}, \quad y = \frac{\mathbf{y}}{\bar{y}}, \quad z = \frac{\mathbf{z}}{\bar{z}}, \quad |\Psi^\varepsilon|^2 = \frac{|\Psi|^2}{N}, \quad V_c = \frac{\mathbf{V}_c}{V_c}, \quad V^\varepsilon = \frac{\mathbf{V}}{V}, \quad B = \frac{\mathbf{B}}{B}. \quad (3.1.8)$$

Now we introduce two energy scales in this problem : a strong energy E_{conf} , which will be the energy of the confinement in z and of the magnetic effects, and a transport

energy E_{transp} , which will be the typical energy of the longitudinal transport in (x, y) and also of the selfconsistent effects. We introduce the following small dimensionless parameter :

$$\varepsilon = \left(\frac{E_{transp}}{E_{conf}} \right)^{1/2} \ll 1. \quad (3.1.9)$$

Then our scaling assumptions are the following. We set to the scale E_{conf} the confinement potential, the magnetic energy and the kinetic energy along z :

$$E_{conf} := e\bar{V}_c = \frac{1}{2}m \left(\frac{e\bar{B}}{mc} \right)^2 \bar{z}^2 = \frac{\hbar^2}{2m\bar{z}^2} \quad (3.1.10)$$

and we set to the scale E_{transp} the selfconsistent potential energy, the kinetic energies along x and y and we finally choose a time scale adapted to this energy :

$$E_{transp} := e\bar{V} = \frac{e^2\bar{N}\bar{x}\bar{z}}{\epsilon} = \frac{\hbar^2}{2m\bar{x}^2} = \frac{\hbar^2}{2m\bar{y}^2} = \frac{\hbar}{\bar{t}}. \quad (3.1.11)$$

By inserting (3.1.8) in (3.1.6), (3.1.7), then by using (3.1.9), (3.1.10) and (3.1.11), we obtain directly our singularly perturbed problem (3.1.1), (3.1.3). Note that (3.1.10) and (3.1.11) imply that ε is also the ratio between the transversal and the longitudinal space scales :

$$\varepsilon = \frac{\bar{z}}{\bar{x}} = \frac{\bar{z}}{\bar{y}}.$$

3.1.3 Heuristics in a simplified case

In this section, we analyze a very simplified situation where analytic calculations can be directly done. We assume here that V_c is a harmonic confinement potential and we neglect the Poisson potential V^ε . We formally analyze the heuristics in this simplified case, that will be further compared to our result obtained in the general case.

We thus consider here a new system, similar to (3.1.1) where we prescribe $V_c(z) = \alpha^2 z^2$, $\alpha > 0$ and where the Poisson potential V^ε is replaced by 0 :

$$i\partial_t \Psi^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\partial_z^2 + (\alpha^2 + B^2)z^2 \right) \Psi^\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon} 2iBz\partial_x \Psi^\varepsilon - \Delta_{x,y} \Psi^\varepsilon, \quad (3.1.12)$$

$$\Psi^\varepsilon(0, x, y, z) = \Psi_0(x, y, z). \quad (3.1.13)$$

In this situation, there is a trick which enables to transform the equation. Indeed, by remarking that

$$\begin{aligned} & -\partial_z^2 + (\alpha^2 + B^2)z^2 - 2iB\varepsilon z\partial_x - \varepsilon^2\partial_x^2 \\ &= -\partial_z^2 + (\alpha^2 + B^2) \left(z - \frac{B}{\alpha^2 + B^2} i\varepsilon\partial_x \right)^2 - \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + B^2} \varepsilon^2\partial_x^2, \end{aligned}$$

we obtain that (3.1.12) is equivalent to

$$i\partial_t \Psi^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} \left[-\partial_z^2 + (\alpha^2 + B^2) \left(z - \frac{B}{\alpha^2 + B^2} i\varepsilon \partial_x \right)^2 \right] \Psi^\varepsilon - \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + B^2} \partial_x^2 \Psi^\varepsilon - \partial_y^2 \Psi^\varepsilon. \quad (3.1.14)$$

Introduce now the following operator : for a function $u \in L^2(\mathbb{R}^3)$, we set

$$(\Theta^\varepsilon u)(x, y, z) = \mathcal{F}_x^{-1} \left(\mathcal{F}_x u(\xi, y, z + \frac{B}{\alpha^2 + B^2} \varepsilon \xi) \right),$$

where \mathcal{F}_x denotes the Fourier transform in the x variable. Note that this operator Θ^ε is unitary on $L^2(\mathbb{R}^3)$ and commutes with ∂_x and ∂_y . Hence, we deduce from (3.1.14) and by direct calculations that the function $u^\varepsilon = \Theta^\varepsilon \Psi^\varepsilon$ satisfies the following system :

$$i\partial_t u^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} \tilde{H}_z u^\varepsilon - \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + B^2} \partial_x^2 u^\varepsilon - \partial_y^2 u^\varepsilon, \quad u^\varepsilon(t=0) = \Theta^\varepsilon \Psi_0,$$

where

$$\tilde{H}_z = -\partial_z^2 + (\alpha^2 + B^2) z^2.$$

Let us now filter out the oscillations by introducing the new unknown

$$\Phi^\varepsilon = \exp(it\tilde{H}_z/\varepsilon^2) u^\varepsilon.$$

Again, the operator $\exp(it\tilde{H}_z/\varepsilon^2)$ commutes with ∂_x , ∂_y and, finally, the following equation is equivalent to (3.1.12) :

$$i\partial_t \Phi^\varepsilon = -\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + B^2} \partial_x^2 \Phi^\varepsilon - \partial_y^2 \Phi^\varepsilon, \quad \Phi^\varepsilon(t=0) = \Theta^\varepsilon \Psi_0. \quad (3.1.15)$$

As $\varepsilon \rightarrow 0$, it is not difficult to see that, for sufficiently smooth initial data, we have $\Theta^\varepsilon \Psi_0 \rightarrow \Psi_0$. Therefore, one can show that, in adapted functional spaces, we have $\Phi^\varepsilon \rightarrow \Phi$ as $\varepsilon \rightarrow 0$, with Φ solution of the limit system :

$$i\partial_t \Phi = -\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + B^2} \partial_x^2 \Phi - \partial_y^2 \Phi, \quad \Phi(t=0) = \Psi_0. \quad (3.1.16)$$

This equation is a bidimensional Schrödinger equation with an anisotropic operator that can be interpreted as follows. Whereas, as expected, the dynamics in the y is not perturbed by the magnetic field (since it is parallel to y), in the x direction the electrons are transported as if their mass was augmented by a factor $\frac{\alpha^2 + B^2}{\alpha^2} > 1$. This coefficient is called the (dimensionless) *electron cyclotron mass* [20, 28].

In this article, the model that we want to treat is the nonlinear system (3.1.1), (3.1.3), with a general confinement potential V_c instead of $\alpha^2 z^2$ and the selfconsistent Poisson potential. Consequently, it is not possible to simplify the equation (3.1.1) by the above trick. Moreover, the potential V^ε depends on the z variable and on the

function Ψ^ε itself. Therefore, one has to be careful for instance when filtering out the fast oscillations by applying the operator $\exp(it\tilde{H}_z/\varepsilon^2)$, since in this nonlinear framework some interference effects between the elementary waves might appear. In this article, we present a general strategy that enables to overcome these difficulties. The strategy will be inspired from [6] where the nonlinear Schrödinger equation under strong partial confinement was analyzed. Two main differences appear here. First, the Poisson nonlinearity is nonlocal, which requires specific estimates. Observe that, at the limit $\varepsilon \rightarrow 0$, the nonlinearity in the present paper reads $\frac{1}{4\pi|x|} * \int |\psi|^2 dz$ and does not depend on z . This makes an important difference with the case of [6], in particular no resonance effects due to the nonlinearity will appear. Second, the magnetic field induces in (3.1.1) a singular term at an intermediate scale $\frac{1}{\varepsilon}$ between the confinement operator (at the scale $\frac{1}{\varepsilon^2}$) and the nonlinearity (at the scale $\frac{1}{\varepsilon^0}$). Hence, compared to [6], the average techniques have to be pushed to the order two and resonance effects will finally appear here due to this magnetic term.

3.1.4 Main result

Consider the system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3). We assume that the confinement potential V_c satisfies two assumptions. The first one concerns the behavior of this function at the infinity.

Assumption 3.1.1. *The potential V_c is a \mathcal{C}^∞ nonnegative even function such that*

$$a^2|z|^2 \leq V_c(z) \leq C|z|^M \quad \text{for } |z| \geq 1, \quad (3.1.17)$$

where $a > 0$, $M > 0$, and

$$\frac{|\partial_z V_c(z)|}{V_c(z)} = \mathcal{O}\left(|z|^{-M'}\right), \quad \frac{|\partial_z^k V_c(z)|}{V_c(z)} = \mathcal{O}(1) \quad \text{for all } k \in \mathbb{N}^*, \quad (3.1.18)$$

as $|z| \rightarrow +\infty$, where $M' > 0$.

Note that a smooth even potential of the form $V_c(z) = C|z|^s$ for $|z| \geq |z_0|$, with $C > 0$, $s \geq 2$, satisfies these assumptions. In particular the harmonic potential $V_c = a^2 z^2$ fits these conditions.

Let us discuss on the assumptions. The assumption that the function $V_c(z)$ is even is important in our analysis, see e.g. Step 4 in subsection 3.1.5. The left inequality in the first condition (4.1.6) implies that V_c tends to $+\infty$ as $|z| \rightarrow +\infty$. The fact that $V_c(z) \geq a^2 z^2$ is not essential in our analysis but simplifies it (see below, it allows to give a simple characterization of the energy space related to our system). As it is well-known [26], the spectrum of operator H_z defined by

$$H_z = -\partial_z^2 + B^2 z^2 + V_c(z). \quad (3.1.19)$$

is discrete, when H_z is considered as a linear, unbounded operator over $L^2(\mathbb{R})$, with domain

$$D(H_z) = \{u \in L^2(\mathbb{R}), H_z u \in L^2(\mathbb{R})\}.$$

The complete sequence of eigenvalues of H_z will be denoted by $(E_p)_{p \in \mathbb{N}}$, taken strictly increasing with p (recall indeed that in dimension 1 the eigenvalues are simple), and the associated Hilbert basis of real-valued eigenfunctions will be denoted by $(\chi_p(z))_{p \in \mathbb{N}}$. The right inequality in (4.1.6) and the second condition (3.1.18) are more technical and are here to simplify the use of a Sobolev scale based on the operator H_z , which is well adapted to our problem. More precisely, these assumptions are used in Lemma 3.2.3.

The second assumption on V_c concerns the spectrum of the confinement operator H_z .

Assumption 3.1.2. *The eigenvalues of the operator H_z defined by (3.1.19) satisfy the following property : there exists $C > 0$ and $n_0 \in \mathbb{N}$ such that*

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad E_{p+1} - E_p \geq C(1+p)^{-n_0}.$$

The most simple situation where (3.1.2) is satisfied is when there exists a uniform gap between the eigenvalues : for all $p \in \mathbb{N}^*$, $E_{p+1} - E_p \geq C_0 > 0$. Note that in this case we have $n_0 = 0$. This property is true in the following examples.

- If $V_c(z) = a^2 z^2 + V_1(z)$, with $\|V_1\|_{L^\infty} < 2\sqrt{a^2 + B^2}$. Indeed, in this case the perturbation theory gives $|E_p - (2p+1)\sqrt{a^2 + B^2}| < \|V_1\|_{L^\infty}$.
- If $V_c(z) \sim a|z|^s$ as $|z| \rightarrow +\infty$, with $s > 2$. Indeed, in this case the Weyl asymptotics [19] gives $E_p \sim Cp^{\frac{2s}{s+2}}$, so $E_{p+1} - E_p \rightarrow +\infty$ as $p \rightarrow +\infty$.

Let us now give a few indications on the Cauchy problem for (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3). This system benefits from two conservation laws, the mass and energy conservations :

$$\forall t \geq 0, \quad \|\Psi^\varepsilon(t)\|_{L^2}^2 = \|\Psi_0\|_{L^2}^2, \quad \mathcal{E}(\Psi^\varepsilon(t)) = \mathcal{E}(\Psi_0), \quad (3.1.20)$$

where the total energy of the wavefunction Ψ^ε is defined by

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\Psi^\varepsilon) = & \frac{1}{\varepsilon^2} \|\partial_z \Psi^\varepsilon\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|\sqrt{V_c} \Psi^\varepsilon\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|(\varepsilon \partial_x + iBz) \Psi^\varepsilon\|_{L^2}^2 \\ & + \|\partial_y \Psi^\varepsilon\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\sqrt{V^\varepsilon} \Psi^\varepsilon\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (3.1.21)$$

For fixed $\varepsilon > 0$, the Cauchy theory for the Schrödinger-Poisson with a constant uniform magnetic field was solved in [?, 16] in the energy space. It is not difficult to adapt these proofs (see also the reference book [13]) to our case where an additional confinement potential is applied. The energy space in our situation is the set of functions u such that $\mathcal{E}(u)$ is finite :

$$B^1 = \left\{ u \in L^2(\mathbb{R}^3) : \partial_z u \in L^2(\mathbb{R}^3), \sqrt{V_c} u \in L^2(\mathbb{R}^3), \partial_y u \in L^2(\mathbb{R}^3) \right. \\ \left. \text{and } \left(\partial_x + \frac{iBz}{\varepsilon} \right) u \in L^2(\mathbb{R}^3) \right\}.$$

This space seems to depend on ε , which would not be convenient for our asymptotic analysis. In fact, it does not. Indeed, thanks to our assumption (4.1.6) on the confinement potential, one has

$$\|zu\|_{L^2} \leq \frac{1}{a} \|\sqrt{V_c}u\|_{L^2},$$

so $u \in B^1$ implies that $zu \in L^2$ and thus $\partial_x u \in L^2$. Hence one has

$$B^1 = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^3) : \sqrt{V_c}u \in L^2(\mathbb{R}^3) \right\}$$

and, on this space, we will use the following norm independent of ε :

$$\begin{aligned} \|u\|_{B^1}^2 &= \|(I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2}u\|_{L^2}^2 \\ &= \|u\|_{L^2}^2 + \|(-\Delta_{x,y})^{1/2}u\|_{L^2}^2 + \|(H_z)^{1/2}u\|_{L^2}^2 \\ &= \|u\|_{H^1}^2 + \|\sqrt{V_c}u\|_{L^2}^2 + B^2\|zu\|_{L^2}^2, \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

where we used the selfadjointness and the positivity of $-\Delta_{x,y}$ and of the operator H_z defined by (3.1.19), and where I denotes the identity operator. In this paper, we will assume that the initial datum Ψ_0 in (3.1.2) belongs to this space B^1 . Then, for all $\varepsilon > 0$, the system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) admits a unique global solution $\Psi^\varepsilon \in C^0([0, +\infty), B^1)$. Our aim is to analyze the asymptotic behavior of Ψ^ε as $\varepsilon \rightarrow 0$.

We are now in position to state our main results. Here and throughout this paper, we will use the notation

$$\forall u \in L_z^1(\mathbb{R}), \quad \langle u \rangle = \int_{\mathbb{R}} u(z) dz. \quad (3.1.23)$$

Let us introduce the limit system. First define the following coefficients

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad \alpha_p = 1 - \sum_{q \neq p} \frac{\langle 2Bz\chi_p\chi_q \rangle^2}{E_q - E_p}, \quad (3.1.24)$$

where we recall that $(E_p, \chi_p)_{p \in \mathbb{N}}$ is the complete sequence of eigenvalues and eigenfunctions of the operator H_z defined by (3.1.19). Then, we introduce the following infinite dimensional, nonlinear and coupled differential system on the functions $\phi_p(t, x, y)$:

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad i\partial_t \phi_p = -\alpha_p \partial_x^2 \phi_p - \partial_y^2 \phi_p + W \phi_p, \quad \phi_p(t=0) = \langle \Psi_0 \chi_p \rangle, \quad (3.1.25)$$

$$W = \frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2}} * \left(\sum_{p \in \mathbb{N}} |\phi_p|^2 \right). \quad (3.1.26)$$

Note that the convolution in (3.1.26) holds on the variables $(x, y) \in \mathbb{R}^2$. The equation (3.1.26) is nothing but the Poisson equation for a measure valued distribution of mass whose support is constrained to the plane $z = 0$:

$$W(t, x, y) = \left[\frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} * \left(\sum_{p \in \mathbb{N}} |\phi_p(t, x, y)|^2 \delta_{z=0} \right) \right] \Big|_{z=0}.$$

In order to compare with Ψ^ε , we introduce the following functions :

$$\Phi(t, x, y, z) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \phi_p(t, x, y) \chi_p(z), \quad \Psi_{app}^\varepsilon(t, x, y, z) = \sum_{p \in \mathbb{N}} e^{-itE_p/\varepsilon^2} \phi_p(t, x, y) \chi_p(z). \quad (3.1.27)$$

Remark that Ψ_{app}^ε can be deduced from Φ through the application of the operator e^{itH_z/ε^2} , unitary on B^1 :

$$\Psi_{app}^\varepsilon = e^{-itH_z/\varepsilon^2} \Phi.$$

This explicit relation is the only dependency in ε of the limit system (3.1.25), (3.1.26), (3.1.27). Our main result is the following theorem.

Theorem 3.1.3. *Assume that V_c satisfies Assumptions 4.1.1 and 3.1.2 and let $\Psi_0 \in B^1$. For all $\varepsilon \in (0, 1]$, denote by $\Psi^\varepsilon \in C^0([0, +\infty), B^1)$ the unique global solution of the initial system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3). Then the following holds true.*

- (i) *The limit system (3.1.25), (3.1.26), (3.1.27) admits a unique maximal solution $\Psi_{app}^\varepsilon \in C^0([0, T_{max}), B^1)$, where $T_{max} \in (0, +\infty]$ is independent of ε . If $T_{max} < +\infty$ then $\|\Psi_{app}^\varepsilon(t, \cdot)\|_{B^1} \rightarrow +\infty$ as $t \rightarrow T_{max}$.*
- (ii) *For all $T \in (0, T_{max})$, we have*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\Psi^\varepsilon - \Psi_{app}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} = 0.$$

Comments on Theorem 3.1.3.

1. *The cyclotron effective mass.* Theorem 3.1.3 thus states that, on all time intervals where the limit system (3.1.27), (3.1.25), (3.1.26) is well-posed, the solution Ψ^ε of the singularly perturbed system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) is close to Ψ_{app}^ε . As expected, the dynamics in the y direction, ie parallel to the magnetic field, is not affected by the magnetic field, since the operator is still $-\partial_y^2$. On the other hand, the situation is different in the direction x and the averaging of the cyclotron motion results in a multiplication of the operator $-\partial_x^2$ by the factor α_p which only depends on V_c and B . The coefficient $\frac{1}{\alpha_p}$ plays in (3.1.25) the role of an effective mass in the direction perpendicular to the magnetic field. We find that the effective mass in the Schrödinger equation for the mode p depends on the index p of this mode. We do not know whether these coefficients are positive for a general V_c .

Notice that the effective mass could be predicted heuristically by the following argument. Denoting by k_x, k_y the wavevectors of the 2DEG in the plane (x, y) , the

electron dispersion relation $E_p(k_x, k_y)$ in the transversal subbands can be written from (3.1.1) by computing the eigenvalues of the operator

$$\frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\frac{d^2}{dz^2} + B^2 z^2 + V_c(z) + 2\varepsilon B z k_x + \varepsilon^2 k_x^2 + \varepsilon^2 k_y^2 \right).$$

Since ε is small, an approximation of $E_p(k_x, k_y)$ can be computed thanks to perturbation theory, which gives the following parabolic band approximation :

$$E_p(k_x, k_y) = \frac{E_p}{\varepsilon^2} - k_x^2 \sum_{q \neq p} \frac{\langle 2Bz \chi_p \chi_q \rangle^2}{E_q - E_p} + k_x^2 + k_y^2 + o(1).$$

We can read on this formula that the effective mass is 1 in the y direction and is α_p^{-1} according to (3.1.24) in the x direction. Note that the specific case of the harmonic potential is treated below (see comment 3).

2. *Conservation of the energy for the limit system.* Let us write the conservation of the energy for the limit system. The total energy for this system can be splitted into a confinement energy $\mathcal{E}_{conf}(\Phi)$ and a transport energy $\mathcal{E}_{tr}(\Phi)$ defined by

$$\mathcal{E}_{conf}(\Phi) = \sum_{p \in \mathbb{N}} E_p \|\phi_p\|_{L^2}^2, \quad (3.1.28)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{tr}(\Phi) &= \sum_{p \in \mathbb{N}} \alpha_p \|\partial_x \phi_p\|_{L^2}^2 + \sum_{p \in \mathbb{N}} \|\partial_y \phi_p\|_{L^2}^2 \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{p, q} \int_{\mathbb{R}^4} \frac{1}{4\pi \sqrt{|x - x'|^2 + |y - y'|^2}} |\phi_p(x, y)|^2 |\phi_q(x', y')|^2 dx dy dx' dy'. \end{aligned} \quad (3.1.29)$$

An interesting property is that these two quantities are separately conserved by the limit system. If Ψ_{app}^ε solves (3.1.25), (3.1.26), (3.1.27), then, for all $t \in [0, T]$, we have

$$\mathcal{E}_{conf}(\Psi_{app}^\varepsilon(t)) = \mathcal{E}_{conf}(\Psi_{app}^\varepsilon(0)) \quad \text{and} \quad \mathcal{E}_{tr}(\Psi_{app}^\varepsilon(t)) = \mathcal{E}_{tr}(\Psi_{app}^\varepsilon(0)). \quad (3.1.30)$$

In particular, by summing up the two equalities in (3.1.30), we obtain the following conservation property :

$$\mathcal{E}_{conf}(\Psi_{app}^\varepsilon(t)) + \mathcal{E}_{tr}(\Psi_{app}^\varepsilon(t)) = \mathcal{E}_{conf}(\Psi_{app}^\varepsilon(0)) + \mathcal{E}_{tr}(\Psi_{app}^\varepsilon(0)). \quad (3.1.31)$$

Note that, in the general case, we do not know whether the energy defined by (3.1.29) is the sum of nonnegative terms. This point is related to the fact that the well-posedness for $t \in [0, +\infty)$ of the Cauchy problem for the nonlinear system (3.1.25), (3.1.26) is an open issue. Nevertheless, when the α_p are such that the energy is coercive on B^1 , ie when we have

$$\forall \Phi \in B^1, \quad C_0 \|\Phi\|_{B^1}^2 \leq \mathcal{E}_{conf}(\Phi) + \mathcal{E}_{tr}(\Phi) \leq C_1 \|\Phi\|_{B^1}^2 + C_2 \|\Phi\|_{B^1}^4, \quad (3.1.32)$$

with a constant $C_0 > 0$ independent of ε , then the maximal solution of (3.1.25), (3.1.26) is globally defined : $T_{max} = +\infty$.

Corollary 3.1.4 (Global in time convergence). *Under the assumptions of Theorem 3.1.3, assume moreover that there exists $0 < \underline{\alpha} < \bar{\alpha}$ such that the coefficients α_p defined by (3.1.24) satisfy the following condition :*

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad \underline{\alpha} \leq \alpha_p \leq \bar{\alpha}. \quad (3.1.33)$$

Then the system (3.1.27), (3.1.25), (3.1.26) admits a unique global solution $\Psi_{app}^\varepsilon \in C^0([0, +\infty), B^1)$ and, for all $T > 0$, we have

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\Psi^\varepsilon - \Psi_{app}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} = 0,$$

where $\Psi^\varepsilon \in C^0([0, +\infty), B^1)$ denotes the solution of (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3).

The proof of this corollary is immediate and will not be detailed in this paper. Indeed, remarking that (3.1.33) implies (3.1.32), we obtain that the solution $\Psi_{app}^\varepsilon(t)$ of (3.1.25), (3.1.26) satisfies the following uniform bound :

$$\|\Psi_{app}^\varepsilon(t)\|_{B^1}^2 \leq C \left(\tilde{\mathcal{E}}_{conf}(\Psi_{app}^\varepsilon(t)) + \tilde{\mathcal{E}}_{tr}(\Psi_{app}^\varepsilon(t)) \right) = C \left(\tilde{\mathcal{E}}_{conf}(\Psi_0) + \tilde{\mathcal{E}}_{tr}(\Phi_0) \right),$$

where the quantity in the right-hand side is finite as soon as $\Psi_0 \in B^1$.

3. Case of harmonic confinement. In the special case of a harmonic confinement potential $V_c(z) = a^2 z^2$, the eigenvalues and eigenfunctions of $H_z = -\partial_z^2 + (a^2 + B^2)z^2$ can be computed explicitly and one has

$$E_p = (2p + 1)\sqrt{a^2 + B^2}, \quad \chi_p(z) = (a^2 + B^2)^{1/8} u_p((a^2 + B^2)^{1/4} z),$$

where $(u_p)_{p \in \mathbb{N}}$ are the normalized Hermite functions defined e.g. in [24], B 8 and satisfying $-u'' + z^2 u_p = (2p + 1)u_p$. The properties of the Hermite functions give

$$2z\chi_p = \frac{\sqrt{2(p+1)}}{(a^2 + B^2)^{1/4}} \chi_{p+1} + \frac{\sqrt{2p}}{(a^2 + B^2)^{1/4}} \chi_{p-1},$$

and one can compute explicitly the coefficients

$$\alpha_p = 1 - B^2 \frac{\langle 2z\chi_p \chi_{p+1} \rangle^2}{E_{p+1} - E_p} + B^2 \frac{\langle 2z\chi_p \chi_{p-1} \rangle^2}{E_p - E_{p-1}} = \frac{a^2}{a^2 + B^2}.$$

We thus recover here the coefficient found in subsection 3.1.3 in the simplified situation. Note that, in this case, condition (3.1.33) is satisfied and the convergence result holds on an arbitrary time interval. It is reasonable to conjecture that this condition (3.1.33) holds again when $V_c(z) = a^2 z^2 + V_1(z)$, where V_1 is a small perturbation.

4. Towards a more realistic model. Since we aim at describing the transport of electrons, which are fermions, our model should not be restricted to a pure quantum

state. The following model describes the transport of an electron gas in a mixed quantum state and is more realistic :

$$i\partial_t \Psi_j^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} (-\partial_z^2 + B^2 z^2 + V_c(z)) \Psi_j^\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon} 2iBz \partial_x \Psi_j^\varepsilon - \Delta_{x,y} \Psi_j^\varepsilon + V^\varepsilon \Psi_j^\varepsilon, \quad \forall j, \quad (3.1.34)$$

$$\Psi_j^\varepsilon(0, x, y, z) = \Psi_{j,0}(x, y, z), \quad \forall j, \quad (3.1.35)$$

$$V^\varepsilon(t, x, z) = \frac{1}{4\pi r^\varepsilon} * \rho^\varepsilon, \quad \rho^\varepsilon = \sum_j \lambda_j |\Psi_j^\varepsilon|^2, \quad (3.1.36)$$

where λ_j , the occupation factor of the state Ψ_j^ε , takes into account the statistics of the electron ensemble and is fixed once for all at the initial time. Note that the Schrödinger equations (3.1.34) are only coupled through the selfconsistent Poisson potential. Therefore, we claim that our main Theorem 3.1.3, which has been given for the sake of simplicity in the case of pure quantum state, can be extended to this system (3.1.34), (3.1.35), (3.1.36), with appropriate assumptions on the initial data $(\Psi_{j,0})$.

Similarly, a given smooth external potential could be incorporated in the initial system. We also claim that our result can be easily adapted if we add in the right-hand side of (3.1.1) a term of the form $V_{ext}(t, x, y, \varepsilon z) \Psi^\varepsilon$ (which is coherent with our scaling), and the result does not change qualitatively.

3.1.5 Scheme of the proof

In this section, we sketch the main steps of the proof of the main theorem.

Step 1 : a priori estimates.

The first task is to obtain uniform in ε a priori estimates for the solution of (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3), which are of course crucial in the subsequent nonlinear analysis. Due to the presence of the singular $\frac{1}{\varepsilon^2}$ and $\frac{1}{\varepsilon}$ terms in (3.1.1), this task is not obvious here. In subsection 3.2.1, we introduce a well adapted functional framework : a Sobolev scale based on the operators $-\Delta_{x,y}$ and H_z . More precisely, for all $m \in \mathbb{N}$, we introduce the Hilbert space

$$B^m = \left\{ u : \|u\|_{B^m}^2 = \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|(-\Delta_{x,y})^{m/2} u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|H_z^{m/2} u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 < +\infty \right\}. \quad (3.1.37)$$

In subsection 3.2.1, we give some equivalent norms which are easier to handle here. Then in subsection 3.2.2 we take advantage of this functional framework and derive some a priori estimates for (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3).

Step 2 : the filtered system.

In [3, 6], the asymptotics of NLS equations under the form

$$i\partial_t u^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} H_z u^\varepsilon - \Delta_{x,y} u^\varepsilon + \mathcal{F}(|u^\varepsilon|^2) u^\varepsilon, \quad (3.1.38)$$

such as the Gross-Pitaevskii equation, was analyzed. In (3.1.38), $\mathcal{F} : \mathbb{R}_+ \mapsto \mathbb{R}$ is a given function and the nonlinearity depends locally on the density $|u^\varepsilon|$. It appeared in [6] that a fruitful strategy is to filter out the oscillations in time induced by the term $\frac{1}{\varepsilon^2} H_z$, without projecting on the eigenmodes of H_z . Indeed, projecting (3.1.38) on the Hilbert basis χ_p leads to difficult problems of series summations and of small denominators in oscillating phases. Introducing the new unknown :

$$v^\varepsilon(t, x, z) = \exp(itH_z/\varepsilon^2) u^\varepsilon(t, x, z),$$

the filtered system associated to (3.1.38) reads

$$i\partial_t v^\varepsilon = -\Delta_{x,y} v^\varepsilon + e^{itH_z/\varepsilon^2} \mathcal{F} \left(\left| e^{-itH_z/\varepsilon^2} v^\varepsilon \right|^2 \right) e^{-itH_z/\varepsilon^2} v^\varepsilon \quad (3.1.39)$$

where we used the fact that H_z , thus e^{itH_z} , commutes with ∂_x and ∂_y . Then, the analysis of the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ amounts to prove that it is possible to define an average of the nonlinearity in (3.1.39) with respect to the fast variable t/ε^2 .

Let us adapt this strategy to our problem. Introduce

$$\Phi^\varepsilon(t, x, z) = \exp(itH_z/\varepsilon^2) \Psi^\varepsilon(t, x, z).$$

One deduces from (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) the following equation for Φ^ε :

$$i\partial_t \Phi^\varepsilon = -\frac{2B}{\varepsilon} \left(e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \right) (i\partial_x \Phi^\varepsilon) - \Delta_{x,y} \Phi^\varepsilon + F \left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \Phi^\varepsilon(t) \right), \quad (3.1.40)$$

where we introduced the nonlinear function

$$(\tau, u) \mapsto F(\tau, u) = e^{i\tau H_z} \left(\frac{1}{4\pi r^\varepsilon} * |e^{-i\tau H_z} u|^2 \right) e^{-i\tau H_z} u, \quad (3.1.41)$$

and where r^ε is still defined by (3.1.4).

Step 3 : approximation by an intermediate system.

Before performing the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ in (3.1.40), we remark that (3.1.41) can be approximated in order to get rid of the fast time variable t/ε^2 in the nonlinear term of (3.1.40). By writing *formally*

$$\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + \varepsilon^2 z^2}} = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} + o(1), \quad (3.1.42)$$

we remark that

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^\varepsilon} * |e^{-i\tau H_z} u| &= \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} * \langle |e^{-i\tau H_z} u|^2 \rangle + o(1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} * \langle |u|^2 \rangle + o(1), \end{aligned}$$

where the symbole $*$ denotes here a convolution in the (x, y) variables only, and where we used the fact that $e^{i\tau H_z}$ is unitary on $L_z^2(\mathbb{R})$. Hence, inserting this Ansatz in (3.1.41) yields

$$\begin{aligned} F(\tau, u) &= e^{i\tau H_z} \left(\frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2}} * \langle |u|^2 \rangle \right) e^{-i\tau H_z} u + o(1) \\ &= \left(\frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2}} * \langle |u|^2 \rangle \right) u + o(1). \end{aligned}$$

Denoting

$$F_0(u) = \left(\frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2}} * \langle |u|^2 \rangle \right) u, \quad (3.1.43)$$

and introducing the solution $\widetilde{\Phi}^\varepsilon$ of the following intermediate system :

$$i\partial_t \widetilde{\Phi}^\varepsilon = -\frac{2B}{\varepsilon} \left(e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \right) (i\partial_x \widetilde{\Phi}^\varepsilon) - \Delta_{x,y} \widetilde{\Phi}^\varepsilon + F_0 \left(\widetilde{\Phi}^\varepsilon(t) \right), \quad (3.1.44)$$

we expect that the solution Ψ^ε of (3.1.40) satisfies

$$\Phi^\varepsilon = \widetilde{\Phi}^\varepsilon + o(1). \quad (3.1.45)$$

Subsection 3.2.3 is devoted to the rigorous proof of this heuristics. We give sense to the $o(1)$ in Lemma 3.2.7 and we prove that the solutions of the two nonlinear equations (3.1.40) and (3.1.44) are close together and that (3.1.45) holds true in the sense of the B^1 norm. This statement is given in Proposition 3.2.1.

Step 4 : second order averaging of oscillating systems.

Thanks to this Step 3, we can consider the simplest system (3.1.44) instead of (3.1.40). We are now left with the analysis of the asymptotics of this intermediate system as $\varepsilon \rightarrow 0$. Note that (3.1.44) is under the general form

$$i\partial_t u = \frac{1}{\varepsilon} f \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) u(t) + g(u(t)) \quad (3.1.46)$$

with

$$f(\tau) = -2B e^{i\tau H_z} z e^{-i\tau H_z} i\partial_x \quad \text{and} \quad g(u) = -\Delta_{x,y} u + F_0(u).$$

At this point, a critical fact has to be noticed. Equations under the form

$$i\partial_t u = f \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) u(t) + g(u(t)) \quad (3.1.47)$$

can be averaged when, due to some ergodicity property, one can give a sense to the time average

$$f^0 = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(\tau) d\tau. \quad (3.1.48)$$

Indeed, under rather general assumptions, the techniques of averaging of dynamical systems – see the reference book on the topic by Sanders and Verhulst [27]– enable to show that (3.1.47) is well approximated by the averaged equation

$$i\partial_t u = f^0 u(t) + g(u(t)).$$

Yet, the oscillating term in (3.1.46), compared to the same term in (3.1.47), is multiplied by $\frac{1}{\varepsilon}$. Therefore, a necessary condition in order to perform the averaging of (3.1.46) is that the average f^0 of f is zero. In our case, the integral kernel of the operator $e^{i\tau H_z} z e^{-i\tau H_z}$, defined by

$$\forall u, \quad e^{i\tau H_z} z e^{-i\tau H_z} u = \int_{\mathbb{R}} G(\tau, z, z') u(z') dz',$$

is given by

$$\begin{aligned} G(\tau, z, z') &= \sum_{p \in \mathbb{N}} \sum_{q \in \mathbb{N}} e^{i\tau(E_p - E_q)} \langle z \chi_p \chi_q \rangle \chi_p(z) \chi_q(z') \\ &= \sum_{p \in \mathbb{N}} \sum_{q \neq p} e^{i\tau(E_p - E_q)} \langle z \chi_p \chi_q \rangle \chi_p(z) \chi_q(z'). \end{aligned}$$

In the last inequality, we used the fact that, by Assumption 4.1.1, V_c is even. Indeed, this property implies that, for all p , $(\chi_p)^2$ is also even, thus $\langle z(\chi_p)^2 \rangle = 0$. Consequently, since $p \neq q$ implies $E_p \neq E_q$, the kernel $G(\tau, z, z')$ is a series of functions which all have a vanishing average in time. We thus expect that the operator-valued function $f(\tau)$ has the same property :

$$f^0 = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(\tau) d\tau = 0.$$

In such a situation, the theory of averaging has to be pushed to the second order [27] in order to obtain the limit of (3.1.46) as $\varepsilon \rightarrow 0$. Section 3.3 is devoted to this question of second order averaging, which leads to the limit system (3.1.25), (3.1.26). The main result of this Section 3.3 is Proposition 3.3.2.

In the short last Section 3.4, we prove our main Theorem 3.1.3 by just gathering the results proved in the previous sections.

3.2 The nonlinear analysis

In this section, we obtain some a priori estimates uniform in ε for the initial system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) and we prove that it can be approximated by an intermediate system, where we regularize the initial data and where we replace the

Poisson nonlinearity by its formal limit given in (3.1.43) . This intermediate system takes the form

$$i\partial_t \widetilde{\Psi}^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} H_z \widetilde{\Psi}^\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon} 2iBz \partial_x \widetilde{\Psi}^\varepsilon - \Delta_{x,y} \widetilde{\Psi}^\varepsilon + W^\varepsilon \widetilde{\Psi}^\varepsilon, \quad (3.2.1)$$

$$\widetilde{\Psi}^\varepsilon(0, x, y, z) = \widetilde{\Psi}_0(x, y, z), \quad (3.2.2)$$

$$W^\varepsilon(t, x, z) = \frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2}} * \left\langle |\widetilde{\Psi}^\varepsilon|^2 \right\rangle. \quad (3.2.3)$$

Notice that (3.2.3) is nothing but the Poisson equation (3.1.3) where we replace $r^\varepsilon = \sqrt{x^2 + y^2 + \varepsilon^2 z^2}$ by $r^0 = \sqrt{x^2 + y^2}$. Moreover, the initial datum $\widetilde{\Psi}_0$ in (3.2.2) will be chosen as a regularization in B^m of the initial datum Ψ_0 . Recall the definition (3.1.37) of the space B^m . The main result of this section is the following proposition.

Proposition 3.2.1 (Approximation of the initial system). *Assume that V_c satisfies Assumptions 4.1.1, 3.1.2 and that $\Psi_0 \in B^1$. For all $\varepsilon \in (0, 1]$, denote by $\Psi^\varepsilon \in C^0(\mathbb{R}_+, B^1)$ the unique global solution of the initial system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3). Then the following holds true.*

(i) *There exists a maximal positive time such that Ψ^ε is bounded uniformly in ε : the quantity*

$$T_0 := \sup \left\{ T \geq 0 : \sup_{\varepsilon \in (0,1]} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0,T], B^1)} < +\infty \right\}. \quad (3.2.4)$$

satisfies $T_0 \in (0, +\infty]$. If $T_0 < +\infty$ then

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T_0], B^1)} = +\infty.$$

(ii) *For all $T \in (0, T_0)$, where T_0 is defined by (3.2.4), for all $\delta > 0$ and for all integer $m \geq 2$, there exist $\widetilde{\Psi}_0 \in B^m$ and ε_δ such that the following holds true. For all $\varepsilon \in (0, \varepsilon_\delta]$, the intermediate system (3.2.1), (3.2.2), (3.2.3) admits a unique solution $\widetilde{\Psi}^\varepsilon \in C^0([0, T], B^m)$ satisfying the following uniform estimates :*

$$\forall \varepsilon \leq \varepsilon_\delta \quad \|\Psi^\varepsilon - \widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq \delta \quad (3.2.5)$$

$$\|\widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^m)} \leq C(\|\Psi_0\|_{B^1}) \|\widetilde{\Psi}_0\|_{B^m}. \quad (3.2.6)$$

Remark 3.2.2. It is a priori not excluded that $T_0 < +\infty$. Indeed, although we are in a repulsive case, the energy conservation does not enable to obtain ε -independent a priori estimates in B^1 (see the proof of Lemma 3.2.6). This may be linked to the possible formation of caustics, as for the nonlinear Schrödinger equation in semiclassical regime, see e.g. [11].

3.2.1 Preliminaries

As we explained in subsection 3.1.5, our nonlinear analysis will deeply rely on the use of the functional spaces B^m defined by (3.1.37) and adapted to the operators H_z and $-\Delta_{x,y}$. The following result was proved in [6] by using an appropriate Weyl-Hörmander pseudodifferential calculus, inspired by [9, 22] :

Lemma 3.2.3 ([6]). *Under Assumption 4.1.1, consider the Hilbert space B^m defined by (3.1.37) for $m \in \mathbb{N}$. Then the norm $\|\cdot\|_{B^m}$ in (3.1.37) is equivalent to the following norm :*

$$\|u\|_{H^m(\mathbb{R}^3)} + \|V_c(z)^{m/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}. \quad (3.2.7)$$

Moreover, for all $u \in B^{m+1}$, we have

$$\|H_z^{1/2}u\|_{B^m} + \|\partial_x u\|_{B^m} + \|\partial_y u\|_{B^m} + \|\partial_z u\|_{B^m} + \|\sqrt{V_c}u\|_{B^m} \lesssim \|u\|_{B^{m+1}}. \quad (3.2.8)$$

The operator $\Delta_{x,y}$ commutes with the rapidly oscillating operator $e^{\pm itH_z/\varepsilon^2}$ and with the operator $iz\partial_x$. This will enable us to obtain uniform bounds for the solution of (3.1.1) by simply applying $\Delta_{x,y}$ to this equation. Unfortunately, the operator H_z does not satisfy this property. For this reason, we introduce the following operator :

$$H_\varepsilon = H_z - 2i\varepsilon Bz\partial_x - \varepsilon^2\partial_x^2 = -\partial_z^2 + V_c(z) + (i\varepsilon\partial_x - Bz)^2. \quad (3.2.9)$$

This operator enables to define another norm equivalent to the B^m norm. The following lemma is proved in the Appendix 3.A.

Lemma 3.2.4. *The operator H_ε defined by (3.2.9) on $L^2(\mathbb{R}^3)$ with domain B^2 is self-adjoint and nonnegative. There exists a constant $C_1 > 0$ such that, for all $\varepsilon \in (0, 1]$ and for all $u \in B^1$, we have*

$$\frac{1}{C_1}\|u\|_{B^1}^2 \leq \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|(-\Delta_{x,y})^{1/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|H_\varepsilon^{1/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq C_1\|u\|_{B^1}^2. \quad (3.2.10)$$

Moreover, for all integer $m \geq 2$, there exists $\varepsilon_m \in (0, 1]$ such that, for all $\varepsilon \in (0, \varepsilon_m]$, for all $u \in B^m$, we have

$$\frac{1}{2}\|u\|_{B^m}^2 \leq \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|(-\Delta_{x,y})^{m/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|H_\varepsilon^{m/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq 2\|u\|_{B^m}^2. \quad (3.2.11)$$

3.2.2 A priori estimates

In this subsection, we obtain a priori estimate uniform in ε for the initial Schrödinger-Poisson model (3.1.1), (3.1.3) and the intermediate model (3.2.1), (3.2.2), (3.2.3). Remark first that these two models can be considered in a unified way. For all $u \in B^1$ and for $\alpha \in \{0, 1\}$, denote

$$F_\alpha(u) = \left(\frac{1}{4\pi\sqrt{x^2 + y^2 + \alpha\varepsilon^2z^2}} * (|u|^2) \right) u, \quad (3.2.12)$$

where the convolution holds on the three variables $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$. Remark that for $\alpha = 0$, this definition coincides with the definition (3.1.43). We shall consider for $\varepsilon \in (0, 1]$ and $\alpha \in \{0, 1\}$ the nonlinear equation

$$i\partial_t u^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} H_\varepsilon u^\varepsilon - \partial_y^2 u^\varepsilon + F_\alpha(u^\varepsilon), \quad (3.2.13)$$

$$u^\varepsilon(0, x, y, z) = u_0(x, y, z), \quad (3.2.14)$$

where the operator H_ε was defined by (3.2.9). Note that for $u_0 = \Psi_0$ and $\alpha = 1$, (3.2.13), (3.2.14) is the initial system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3), and that for $u_0 = \widetilde{\Psi}_0$ and $\alpha = 0$, (3.2.13), (3.2.14) is the intermediate system (3.2.1), (3.2.2), (3.2.3). Let us first state a technical lemma concerning the nonlinearities F_1 and F_0 , which is proved in Appendix 3.B.

Lemma 3.2.5. *There exists a constant $C > 0$ such that, for all $\varepsilon \in (0, 1]$, for $\alpha = 0$ or 1 , we have*

$$\forall u, v \in B^1, \quad \|F_\alpha(u) - F_\alpha(v)\|_{B^1} \leq C (\|u\|_{B^1}^2 + \|v\|_{B^1}^2) \|u - v\|_{B^1}, \quad (3.2.15)$$

where F_α is defined by (3.2.12). Moreover, for all $m \in \mathbb{N}^*$, there exists $C_m > 0$ such that we have the tame estimate

$$\forall \varepsilon \in (0, 1], \forall \alpha \in \{0, 1\}, \forall u \in B^m, \quad \|F_\alpha(u)\|_{B^m} \leq C_m \|u\|_{B^1}^2 \|u\|_{B^m}. \quad (3.2.16)$$

Now we are able to derive uniform a priori estimates for the solution of (3.2.13), (3.2.14).

Lemma 3.2.6. *Let $\varepsilon \in (0, 1]$, $\alpha \in \{0, 1\}$ and $u_0 \in B^1$. Then the solution u^ε of the equation (3.2.13), (3.2.14) exists and is unique in $C^0([0, +\infty), B^1)$ and the following uniform in ε estimates hold true.*

(i) *For all $M > 0$, there exist $T > 0$, only depending on M and $\|u_0\|_{B^1}$, such that, for all $\varepsilon \in (0, 1]$, we have*

$$\|u^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq (1 + M) \|u_0\|_{B^1}. \quad (3.2.17)$$

(ii) *Let $m \geq 2$ an integer and assume that $u_0 \in B^m$. Then, for all $\widetilde{T} > 0$, we have the estimate*

$$\forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_m], \quad \|u^\varepsilon\|_{C^0([0, \widetilde{T}], B^m)} \leq C \|u_0\|_{B^m} \exp\left(C \widetilde{T} \|u^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)}^2\right). \quad (3.2.18)$$

where $\varepsilon_m > 0$ is as in Lemma 3.2.4.

Proof. Step 1 : the Cauchy problem and the conservation laws. For any given $\varepsilon > 0$, the existence and uniqueness of a maximal solution $u^\varepsilon \in C^0([0, \overline{T}], B^1)$ can be

obtained by standard techniques [13]. We leave this first part of the proof to the reader. This solution satisfies both L^2 and energy conservation laws :

$$\forall t \geq 0, \quad \|u^\varepsilon(t)\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2} \quad \text{and} \quad \mathcal{E}_\alpha(u^\varepsilon(t)) = \mathcal{E}_\alpha(u_0), \quad (3.2.19)$$

where the energy \mathcal{E}_α is defined by

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\alpha(u) &= \frac{1}{\varepsilon^2} (H_\varepsilon u, u)_{L^2} + \|\partial_y u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} (F_\alpha(u), u)_{L^2} \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} \|\partial_z u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|\sqrt{V_c} u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|(\varepsilon \partial_x + iBz)u\|_{L^2}^2 + \|\partial_y u\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} (F_\alpha(u), u)_{L^2}. \end{aligned}$$

We recall that the operator H_ε is defined by (3.2.9). These conservation laws show that the solution u^ε is global, ie that $\bar{T} = +\infty$. Unfortunately, due to the $\frac{1}{\varepsilon^2}$ terms in this expression, one cannot use the energy conservation to get uniform in ε estimates. Instead, we will directly write the equations satisfied by $\partial_x u^\varepsilon, \partial_y u^\varepsilon$ or $(H_\varepsilon)^{1/2} u^\varepsilon$ and use the standard L^2 -estimates for these equations and the fact that the self-adjoint operators $H_\varepsilon, \partial_x$ and ∂_y commute together.

Step 2 : B^1 estimate. This yields

$$i\partial_t (\nabla_{x,y} u^\varepsilon)(t) = \frac{1}{\varepsilon^2} H_\varepsilon (\nabla_{x,y} u^\varepsilon) - \partial_y^2 (\nabla_{x,y} u^\varepsilon) + \nabla_{x,y} (F_\alpha(u^\varepsilon))$$

and

$$i\partial_t (H_\varepsilon^{1/2} u^\varepsilon)(t) = \frac{1}{\varepsilon^2} H_\varepsilon (H_\varepsilon^{1/2} u^\varepsilon) - \partial_y^2 (H_\varepsilon^{1/2} u^\varepsilon) + H_\varepsilon^{1/2} (F_\alpha(u^\varepsilon)).$$

Hence,

$$\begin{aligned} \|u^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|\nabla_{x,y} u^\varepsilon(t)\|_{L^2} + \|H_\varepsilon^{1/2} u^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\leq \|u_0\|_{L^2} + \|\nabla_{x,y} u_0\|_{L^2} + \|H_\varepsilon^{1/2} u_0\|_{L^2} \\ &\quad + C \int_0^t (\|\nabla_{x,y} F_\alpha(u^\varepsilon(s))\|_{L^2} + \|H_\varepsilon^{1/2} F_\alpha(u^\varepsilon(s))\|_{L^2}) ds \end{aligned}$$

and, for $\varepsilon \in (0, 1]$, the equivalence of norms given in Lemma 3.2.4, yields

$$\begin{aligned} \|u^\varepsilon(t)\|_{B^1} &\leq C \|u_0\|_{B^1} + C \int_0^t \|F_\alpha(u^\varepsilon(s))\|_{B^1} ds \\ &\leq C \|u_0\|_{B^1} + C \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{B^1}^3 ds, \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

where we used (3.2.15) with $v = 0$ to estimate $F_\alpha(u^\varepsilon(s))$. Hence, by applying the Gronwall lemma to the integral inequality (3.2.20), we prove Item (i) of the Lemma.

Step 3 : B^m estimate. Let $T > 0, m \geq 2, u_0 \in B^m$ and let $\varepsilon \in (0, \varepsilon_m]$, where $0 < \varepsilon_m \leq 1$ as in Lemma 3.2.4. Since the operators H_ε and $\Delta_{x,y}$ commute together, $H_\varepsilon^{m/2} u^\varepsilon$ satisfies the following equation :

$$i\partial_t (H_\varepsilon^{m/2} u^\varepsilon)(t) = \frac{1}{\varepsilon^2} H_\varepsilon (H_\varepsilon^{m/2} u^\varepsilon) - \partial_y^2 (H_\varepsilon^{m/2} u^\varepsilon) + H_\varepsilon^{m/2} (F_\alpha(u^\varepsilon)),$$

thus, for all $t \in [0, T]$,

$$\begin{aligned}
\|H_\varepsilon^{m/2} u^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\leq \|H_\varepsilon^{m/2} u_0\|_{L^2} + \int_0^t \|H_\varepsilon^{m/2} (F_\alpha(u^\varepsilon(s)))\|_{L^2} ds, \\
&\leq C \|u_0\|_{B^m} + C \int_0^t \|F_\alpha(u^\varepsilon(s))\|_{B^m} ds \\
&\leq C \|u_0\|_{B^m} + C \|u^\varepsilon\|_{C^0([0,T],B^1)}^2 \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{B^m} ds, \quad (3.2.21)
\end{aligned}$$

where we used Lemma 3.2.4 and the tame estimate (4.2.5). Similarly, $-\Delta_{x,y} u^\varepsilon$ satisfies the following equation :

$$i\partial_t(-\Delta_{x,y} u^\varepsilon)(t) = \frac{1}{\varepsilon^2} H_\varepsilon(-\Delta_{x,y} u^\varepsilon) - \partial_y^2(-\Delta_{x,y} u^\varepsilon) - \Delta_{x,y} (F_\alpha(u^\varepsilon))$$

and, using the definition of B^m (3.1.37) and (4.2.5) yields :

$$\begin{aligned}
\|(-\Delta_{x,y})^{m/2} u^\varepsilon(t)\|_{L^2} &\leq \|(-\Delta_{x,y})^{m/2} u_0\|_{L^2} + \int_0^t \|(-\Delta_{x,y})^{m/2} (F_\alpha(u^\varepsilon(s)))\|_{L^2} ds, \\
&\leq C \|u_0\|_{B^m} + C \|u^\varepsilon\|_{C^0([0,T],B^1)}^2 \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{B^m} ds. \quad (3.2.22)
\end{aligned}$$

Therefore, by using again the equivalence of norms given by Lemma 3.2.4 and the L^2 conservation law in (3.2.19), we deduce from (3.2.21) and (3.2.22) that, for $t \leq T$, we have

$$\|u^\varepsilon(t)\|_{B^m} \leq C \|u_0\|_{B^m} + C \|u^\varepsilon\|_{C^0([0,T],B^1)}^2 \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{B^m} ds,$$

and the Gronwall lemma gives (3.2.18). \square

3.2.3 Proof of Proposition 3.2.1

In this subsection, we prove Proposition 3.2.1, ie we show that this solution can be uniformly approximated by a regular solution of the intermediate system. We first state a technical lemma on the Poisson kernels, which is proved in the Appendix 3.C.

Lemma 3.2.7. *There exists a constant $C > 0$ such that, for all $\varepsilon \in (0, 1]$, we have*

$$\forall u \in B^2, \quad \|F_1(u) - F_0(u)\|_{B^1} \leq C \varepsilon^{1/3} \|u\|_{B^2}^3, \quad (3.2.23)$$

where F_0 and F_1 are defined by (3.2.12).

We are now ready to prove the main result of this section.

Proof of Proposition 3.2.1. Let $\Psi_0 \in B^1$, let an integer $m \geq 2$ be fixed, and define the regularized initial datum $\widetilde{\Psi}_0$ by

$$\widetilde{\Psi}_0 = (I - \eta \Delta_{x,y})^{-m/2} (I + \eta H_z)^{-m/2} \Psi_0, \quad (3.2.24)$$

where $\eta > 0$ is a small parameter that will be fixed further and where I denotes the identity operator. Denote by Ψ^ε the solution of the initial system (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) and by $\widetilde{\Psi}^\varepsilon$ the solution of the intermediate system (3.2.1), (3.2.2), (3.2.3) with the initial datum (3.2.24). We shall estimate the difference $\Psi^\varepsilon - \widetilde{\Psi}^\varepsilon$.

Step 1 : uniform bounds for Ψ^ε . Let $0 < \varepsilon \leq 1$. From Lemma 3.2.6 (i), we first deduce that there exists $T_1 > 0$ only depending on $\|\Psi_0\|_{B^1}$ such that, for all $\varepsilon \in (0, 1]$

$$\|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T_1], B^1)} \leq 2\|\Psi_0\|_{B^1}.$$

This implies that T_0 defined by (3.2.4) satisfies $T_0 \geq T_1 > 0$. Clearly, if $T_0 < +\infty$, we have

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T_0], B^1)} = +\infty,$$

otherwise by reiterating the above procedure we could find a uniform bound on $[0, T_2]$ with $T_2 > T_0$.

Now we fix $T \in (0, T_0)$ and $\delta > 0$ for the sequel of this proof. Definition (3.2.4) of T_0 implies that

$$\|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq C(\|\Psi_0\|_{B^1}), \text{ independent of } \varepsilon \in (0, 1]. \quad (3.2.25)$$

Step 2 : bounds for the initial datum $\widetilde{\Psi}_0$. First, we deduce from (3.2.24) that

$$(I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2} \widetilde{\Psi}_0 = (I - \eta \Delta_{x,y})^{-m/2} (I + \eta H_z)^{-m/2} (I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2} \Psi_0,$$

hence

$$\begin{aligned} & \|(I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2} \widetilde{\Psi}_0\|_{L^2} \\ & \leq \|(I - \eta \Delta_{x,y})^{-m/2} (I + \eta H_z)^{-m/2} (I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2} \Psi_0\|_{L^2} \\ & \leq \|(I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2} \Psi_0\|_{L^2} \end{aligned}$$

where we used the fact that the operators $(I - \eta \Delta_{x,y})^{-m/2}$ and $(I + \eta H_z)^{-m/2}$ are bounded on L^2 , with bounds equal to 1. Therefore, using (3.1.22), we obtain

$$\|\widetilde{\Psi}_0\|_{B^1} \leq \|\Psi_0\|_{B^1}, \quad (3.2.26)$$

where we recall that the right-hand side is independent of ε .

Next, we get from (3.2.24) the two following identities : for all integer $\ell \leq m$,

$$(-\Delta_{x,y})^{\ell/2+1/2} \widetilde{\Psi}_0 = (-\Delta_{x,y})^{\ell/2} (I - \eta \Delta_{x,y})^{-\ell/2} (I - \eta \Delta_{x,y})^{\ell/2-m/2} (I + \eta H_z)^{-m/2} (-\Delta_{x,y})^{1/2} \Psi_0,$$

and

$$H_z^{\ell/2+1/2} \widetilde{\Psi}_0 = H_z^{\ell/2} (I + \eta H_z)^{-\ell/2} (I + \eta H_z)^{\ell/2-m/2} (I - \eta \Delta_{x,y})^{-m/2} H_z^{1/2} \Psi_0.$$

Thus, from the bound

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}_+, \quad \lambda^{\ell/2}(1 + \eta\lambda)^{-\ell/2} \leq C\eta^{-\ell/2},$$

we deduce that both operators $(-\Delta_{x,y})^{\ell/2}(I - \eta\Delta_{x,y})^{-\ell/2}$ and $H_z^{\ell/2}(I + \eta H_z)^{-\ell/2}$ are bounded on L^2 , with bounds equal to $C\eta^{-\ell/2}$, and thus

$$\forall \ell \leq m, \quad \|\widetilde{\Psi}_0\|_{B^{\ell+1}} \leq C\eta^{-\ell/2} \|\Psi_0\|_{B^1}, \quad (3.2.27)$$

where we recall the definition (3.1.37) of the B^m norms.

Finally, we obtain also from (3.2.24) that

$$(I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2}(\Psi_0 - \widetilde{\Psi}_0) = (I - (I - \eta\Delta_{x,y})^{-m/2}(I + \eta H_z)^{-m/2})(I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2}\Psi_0.$$

Decompose $v = (I - \Delta_{x,y} + H_z)^{1/2}\Psi_0$ on the Hilbert basis $(\chi_p)_{p \in \mathbb{N}}$ of eigenmodes of H_z :

$$v(x, y, z) = \sum_{p \in \mathbb{N}} v_p(x, y) \chi_p(z)$$

and denote by $\widehat{v}_p(\xi)$, $\xi \in \mathbb{R}^2$, the Fourier transform of $v_p(x, y)$. By (3.1.22), we have

$$\|\Psi_0 - \widetilde{\Psi}_0\|_{B^1}^2 = \sum_{p \in \mathbb{N}} \int_{\mathbb{R}^2} (1 - (1 + \eta|\xi|^2)^{-m/2}(1 + \eta E_p)^{-m/2})^2 |\widehat{v}_p(\xi)|^2 d\xi.$$

Hence, using that

$$\sum_{p \in \mathbb{N}} \int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{v}_p(\xi)|^2 d\xi = \|\Psi_0\|_{B^1}^2 < +\infty \quad (3.2.28)$$

and that

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^2, \forall p \in \mathbb{N}, \quad \lim_{\eta \rightarrow 0} (1 - (1 + \eta|\xi|^2)^{-m/2}(1 + \eta E_p)^{-m/2}) = 0,$$

we deduce from Lebesgue's dominated convergence theorem and from the convergence of the series in (3.2.28) that

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \|\Psi_0 - \widetilde{\Psi}_0\|_{B^1} = 0. \quad (3.2.29)$$

Step 3 : uniform a priori estimates for $\widetilde{\Psi}^\varepsilon$. Consider

$$T_\eta := \sup\{\tau \in (0, T] : \forall \varepsilon \in (0, 1], \|\widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T_\eta], B^1)} \leq 2\|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)}\}. \quad (3.2.30)$$

Note that, from (3.2.26) and Lemma 3.2.6 (i), we know that $T_\eta \in (0, T]$ is well-defined. Then, from Lemma 3.2.6 (ii), we deduce the following estimate :

$$\begin{aligned} \forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_m], \quad \forall \ell \leq m, \quad \|\widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T_\eta], B^{\ell+1})} &\leq C \left(\|\widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T_\eta], B^1)} \right) \|\widetilde{\Psi}_0\|_{B^{\ell+1}} \\ &\leq C \left(\|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \right) \|\widetilde{\Psi}_0\|_{B^{\ell+1}} \\ &\leq C \left(\|\Psi_0\|_{B^1} \right) \|\widetilde{\Psi}_0\|_{B^{\ell+1}} \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

where we used (3.2.30) and (3.2.25).

Step 4 : estimate of the difference $\Psi^\varepsilon - \widetilde{\Psi}^\varepsilon$. Using the notations defined in (3.2.9) and (3.2.12), Ψ^ε and $\widetilde{\Psi}^\varepsilon$ satisfy (3.2.13), (3.2.14) with $\alpha = 1$, $u_0 = \Psi_0$ and $\alpha = 0$, $u_0 = \widetilde{\Psi}_0$ respectively. The Duhamel formulation of these equations read respectively

$$\begin{aligned}\Psi^\varepsilon(t) &= e^{-it(H_\varepsilon - \partial_y^2)} \Psi_0 + \int_0^t e^{-i(t-s)(H_\varepsilon - \partial_y^2)} F_1(\Psi^\varepsilon(s)) ds, \\ \widetilde{\Psi}^\varepsilon(t) &= e^{-it(H_\varepsilon - \partial_y^2)} \widetilde{\Psi}_0 + \int_0^t e^{-i(t-s)(H_\varepsilon - \partial_y^2)} F_0(\widetilde{\Psi}^\varepsilon(s)) ds.\end{aligned}$$

Hence, for all $t \in [0, T_\eta]$ and $\varepsilon \in (0, \varepsilon_m]$,

$$\begin{aligned}\|\Psi^\varepsilon(t) - \widetilde{\Psi}^\varepsilon(t)\|_{B^1} &\leq \|\Psi_0 - \widetilde{\Psi}_0\|_{B^1} + \int_0^t \|F_1(\Psi^\varepsilon(s)) - F_1(\widetilde{\Psi}^\varepsilon(s))\|_{B^1} ds \\ &\quad + \int_0^t \|F_1(\widetilde{\Psi}^\varepsilon(s)) - F_0(\widetilde{\Psi}^\varepsilon(s))\|_{B^1} ds \\ &\leq \|\Psi_0 - \widetilde{\Psi}_0\|_{B^1} + C \int_0^t \|\Psi^\varepsilon(s) - \widetilde{\Psi}^\varepsilon(s)\|_{B^1} ds + C \varepsilon^{1/3} \eta^{-3/2},\end{aligned}$$

where we used (3.2.15), (3.2.25), (3.2.30), (3.2.23) and (3.2.31) with $\ell = 1$, coupled to (3.2.27). Here C denotes a generic constant depending only on T and $\|\Psi_0\|_{B^1}$. Hence, by the Gronwall lemma, we get, for all $t \in [0, T_\eta]$,

$$\|\Psi^\varepsilon(t) - \widetilde{\Psi}^\varepsilon(t)\|_{B^1} \leq \left(\|\Psi_0 - \widetilde{\Psi}_0\|_{B^1} + C \varepsilon^{1/3} \eta^{-3/2} \right) e^{CT}. \quad (3.2.32)$$

Now, according to (3.2.29), we fix η such that

$$\|\Psi_0 - \widetilde{\Psi}_0\|_{B^1} e^{CT} \leq \min \left(\frac{\delta}{2}, \frac{1}{3} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \right)$$

and, in a second step, we fix $\varepsilon_\delta \in (0, \varepsilon_m]$ such that

$$C \varepsilon_\delta^{1/3} \eta^{-3/2} e^{CT} \leq \min \left(\frac{\delta}{2}, \frac{1}{3} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \right).$$

From (3.2.32), we deduce that

$$\forall t \in [0, T_\eta], \quad \forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_\delta], \quad \|\Psi^\varepsilon(t) - \widetilde{\Psi}^\varepsilon(t)\|_{B^1} \leq \min \left(\delta, \frac{2}{3} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \right). \quad (3.2.33)$$

Therefore, we have

$$\begin{aligned}\|\widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T_\eta], B^1)} &\leq \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T_\eta], B^1)} + \|\Psi^\varepsilon - \widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T_\eta], B^1)} \\ &\leq \frac{5}{3} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)}.\end{aligned} \quad (3.2.34)$$

We claim that $T_\eta = T$. Indeed, if $T_\eta < T$, then, applying again Lemma 3.2.6 at T_η and using (3.2.34) enables to find $\tau > 0$ such that, for all $\varepsilon \in (0, 1)$,

$$\|\widetilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([T_\eta, T_\eta + \tau], B^1)} \leq 2\|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)},$$

which, together with (3.2.34), contradicts the definition (3.2.30) of T_η . Finally, (3.2.33) gives (3.2.5) and (3.2.31) with $\ell = m - 1$ gives (3.2.6). The proof of Proposition 3.2.1 is complete. \square

3.3 Second order averaging

In this section, we focus on the intermediate system (3.2.1), (3.2.2), (3.2.3) as ε goes to zero. As we explained in subsection 3.1.5, it is interesting to consider the filtered version of this equation. Let $\widetilde{\Psi}_0 \in B^m$ be a given initial data, let $\widetilde{\Psi}^\varepsilon$ be the corresponding solution of (3.2.1), (3.2.2), (3.2.3) and set

$$\widetilde{\Phi}^\varepsilon(t, \cdot) = \exp(itH_z/\varepsilon^2) \widetilde{\Psi}^\varepsilon(t, \cdot). \quad (3.3.1)$$

This function satisfies the system

$$\begin{aligned} i\partial_t \widetilde{\Phi}^\varepsilon &= -\frac{2B}{\varepsilon} \left(e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \right) (i\partial_x \widetilde{\Phi}^\varepsilon) - \Delta_{x,y} \widetilde{\Phi}^\varepsilon + F_0 \left(\widetilde{\Phi}^\varepsilon(t) \right), \\ \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t=0) &= \widetilde{\Psi}_0, \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

where F_0 is defined by (3.1.43). The advantage of this intermediate system, compared to (3.1.40) is that the nonlinearity $F_0(\widetilde{\Phi}^\varepsilon)$ has no dependence in the fast variable $\frac{t}{\varepsilon^2}$.

We will analyze the filtered system (3.3.2) in the framework of second order averaging of fast oscillating ODEs under the form (3.1.46) –see [27]–, that we adapt here to our context of nonlinear PDEs. Recall that $(E_p)_{p \in \mathbb{N}}$, $(\chi_p)_{p \in \mathbb{N}}$ are the complete families of eigenvalues and eigenfunctions of the operator H_z and denote by Π_p the spectral projector on χ_p :

$$\forall \Phi \in L^2(\mathbb{R}^3), \quad \Pi_p \Phi = \langle \Phi \chi_p \rangle \chi_p.$$

Introduce now the following unbounded operator on $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$A_0 = -\partial_x^2 \sum_{p \geq 0} \alpha_p \Pi_p \quad \text{with} \quad \alpha_p = 1 - \sum_{q \neq p} \frac{\langle 2Bz \chi_p \chi_q \rangle^2}{E_q - E_p}. \quad (3.3.3)$$

With this notation, the limit system (3.1.25), (3.1.26), (3.1.27) can be rewritten in a more compact form as

$$i\partial_t \Phi = A_0 \Phi - \partial_y^2 \Phi + F_0(\Phi), \quad \Psi(t=0) = \Psi_0. \quad (3.3.4)$$

We state the main results of this section in the following two propositions.

Proposition 3.3.1. *Assume that V_c satisfies Assumptions 4.1.1 and 3.1.2. Then the following properties hold true.*

(i) *The unbounded operator A_0 defined by (3.3.3) on $L^2(\mathbb{R}^3)$ with the domain*

$$D(A_0) = \{\Phi \in L^2(\mathbb{R}^3) : \partial_x^2 \sum_{p \geq 0} \alpha_p \Pi_p \Phi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$$

is selfadjoint. Moreover, the operator A_0 satisfies

$$\forall \ell \geq 0, \forall u \in B^{2n_0+4+\ell} \quad \|A_0 u\|_{B^\ell} \leq C \|u\|_{B^{2n_0+4+\ell}} \quad (3.3.5)$$

where n_0 is as in Assumption 3.1.2.

(ii) *Let $\Psi_0 \in B^1$. The limit system (3.3.4) admits a unique maximal solution $\Phi \in C^0([0, T_{max}), B^1)$. If $T_{max} < +\infty$ then $\|\Phi(t)\|_{B^1} \rightarrow +\infty$ as $t \rightarrow T_{max}$.*

Proposition 3.3.2 (Averaging of the intermediate system). *Assume that V_c satisfies Assumptions 4.1.1 and 3.1.2. Then there exists an integer $m \geq 2$ such that the following holds true. For $\Psi_0 \in B^m$, we consider the solution $\widetilde{\Phi}^\varepsilon \in C^0([0, +\infty), B^m)$ of (3.3.2) and the maximal solution $\widetilde{\Phi} \in C^0([0, T_{max}), B^1)$ of the limit system with $\widetilde{\Psi}_0$ as initial data :*

$$\widetilde{\Phi}(t) = e^{-it(A_0 - \partial_y^2)} \widetilde{\Psi}_0 - i \int_0^t e^{-i(t-s)(A_0 - \partial_y^2)} F_0(\widetilde{\Phi}(s)) ds. \quad (3.3.6)$$

We assume that there exist $T \in (0, T_{max})$, $\varepsilon_0 > 0$ such that

$$M := \sup_{\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]} \|\widetilde{\Phi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^m)} < +\infty. \quad (3.3.7)$$

Then we have

$$\|\widetilde{\Phi}^\varepsilon - \widetilde{\Phi}\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq \varepsilon C_M, \quad (3.3.8)$$

where C_M is independent of ε .

3.3.1 Well-posedness of the limit system

In this section, we prove Proposition 3.3.1.

Step 1. Basic properties of the operator A_0 . First, from $V_c(z) \geq a^2 z^2$, we deduce that the p th eigenvalue of H_z is larger than the p th eigenvalue of the harmonic oscillator $-\frac{d^2}{dz^2} + (a^2 + B^2)z^2$:

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad E_p \geq \sqrt{a^2 + B^2}(2p + 1). \quad (3.3.9)$$

From Assumption 3.1.2, we deduce that the coefficients α_p in (3.3.3) satisfy

$$\begin{aligned} |\alpha_p| &\leq 1 + C(1+p)^{n_0} \sum_{q \geq 0} \langle 2Bz\chi_p\chi_q \rangle^2 = 1 + C(1+p)^{n_0} \|Bz\chi_p\|_{L^2}^2 \\ &\leq CE_p^{n_0+1}, \end{aligned}$$

where we used (3.3.9) and that $\|Bz\chi_p\|_{L^2} \leq E_p^{1/2}$. Now, consider a nonnegative integer ℓ and u in $B^{2n_0+4+\ell}$. Let n_0 be defined as in Assumption 3.1.2, and decompose u over the χ_p family which is orthogonal in L^2 .

$$\begin{aligned} \|A_0 u\|_{B^\ell}^2 &= \sum_{p \geq 0} \alpha_p^2 \|\partial_x^2 \Pi_p u\|_{B^\ell}^2 \\ &\leq C \sum_{p \geq 0} E_p^{2n_0+2} \|\Pi_p u\|_{B^{\ell+2}}^2 \leq C \sum_{p \geq 0} \|H_z^{n_0+1} \Pi_p u\|_{B^{\ell+2}}^2 \\ &\leq C \sum_{p \geq 0} \|\Pi_p u\|_{B^{2n_0+4+\ell}}^2 = C \|u\|_{B^{2n_0+4+\ell}}^2 \end{aligned}$$

where we used Lemma 3.2.3. This proves (3.3.5).

Furthermore, by passing to the limit as $N \rightarrow +\infty$ in the identity

$$\forall \Phi, \Psi \in D(A), \quad \sum_{p=0}^N \alpha_p (\partial_x^2 \Pi_p \Phi, \Pi_p \Psi)_{L^2} = \sum_{p=0}^N \alpha_p (\Pi_p \Phi, \partial_x^2 \Pi_p \Psi)_{L^2},$$

we obtain that the operator A_0 is symmetric. Moreover, the equation $A_0 \Phi + i\Phi = f$ admits a solution $\Phi \in D(A_0)$ for all $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Indeed, the projection of this equation on χ_p reads

$$-\alpha_p \partial_x^2 \phi_p + i\phi_p = f_p$$

and this elliptic equation can obviously be solved for all $f_p \in L^2(\mathbb{R}^2)$. Therefore, by the standard criterion for selfadjointness [26], the operator A_0 is selfadjoint. We have proved the first part of Proposition 3.3.1.

Step 2. Well-posedness and stability of the limit system. The operator A_0 being selfadjoint, the Stone theorem can be applied and the operator $-iA_0$ generates a unitary group of continuous operators $e^{-iA_0 t}$ on L^2 and also on B^1 . The Duhamel formulation of (3.3.4) reads

$$\Phi(t) = e^{-it(A_0 - \partial_y^2)} \Psi_0 - i \int_0^t e^{-i(t-s)(A_0 - \partial_y^2)} F_0(\Phi(s)) ds \quad (3.3.10)$$

(recall that A_0 and ∂_y^2 commute together). Since, by (3.2.15), the application F_0 is locally Lipschitz continuous on B^1 , it is easy to prove by a standard fixed point technique that (3.3.10) admits a unique maximal solution $\Phi \in C^0([0, T_{max}), B^1)$. The details are left to the reader. Note that, if $T_{max} < +\infty$, then $\|\Phi(t)\|_{B^1} \rightarrow +\infty$ as $t \rightarrow T_{max}$. Item (ii) of Proposition 3.3.1 is proved. \square

Remark 3.3.3. In fact, this strategy of proof by a fixed point mapping leads to a stability result. For all $\eta > 0$ and for all $T \in (0, T_{max})$, there exists $\delta_{\eta, T} > 0$ such that the following holds true. For all $\tilde{\Psi}_0$ satisfying

$$\|\Psi_0 - \tilde{\Psi}_0\|_{B^1} \leq \delta_{\eta, T},$$

the equation (3.3.6)

$$\tilde{\Phi}(t) = e^{-it(A_0 - \partial_y^2)} \tilde{\Psi}_0 - i \int_0^t e^{-i(t-s)(A_0 - \partial_y^2)} F_0(\tilde{\Phi}(s)) ds$$

admits a unique solution $\tilde{\Phi} \in C^0([0, T], B^1)$ and we have

$$\sup_{t \in [0, T]} \|\Phi(t) - \tilde{\Phi}(t)\|_{B^1} \leq \eta. \quad (3.3.11)$$

3.3.2 Proof of Proposition 3.3.2

This subsection is devoted to the proof of Proposition 3.3.2, which relies on a reformulation of the Duhamel formula for (3.3.2).

Step 1 : reformulation of the Duhamel formula. Introduce the following family of unbounded self-adjoint operators on $L^2(\mathbb{R}^3)$

$$\forall \tau \in \mathbb{R}, \quad a(\tau) = -2Be^{i\tau H_z} z e^{-i\tau H_z} i\partial_x \quad (3.3.12)$$

with domain B^2 . Note that, from (4.1.6) and Lemma 3.2.3, we deduce that, for all $\ell \in \mathbb{N}$,

$$\forall u \in B^2, \quad \forall \tau \in \mathbb{R}, \quad \|a(\tau)u\|_{L^2} \leq C\|u\|_{B^2}. \quad (3.3.13)$$

The Duhamel representation of (3.3.2) reads

$$\tilde{\Phi}^\varepsilon(t) = \tilde{\Psi}_0 - \frac{i}{\varepsilon} \int_0^t a\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \tilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds - i \int_0^t \left(-\Delta_{x,y} \tilde{\Phi}^\varepsilon(s) + F_0\left(\tilde{\Phi}^\varepsilon(s)\right) \right) ds. \quad (3.3.14)$$

Introduce the primitive of a :

$$\forall u \in B^2, \quad \forall \tau \in \mathbb{R}, \quad A(\tau)u = \int_0^\tau a(s)u ds, \quad (3.3.15)$$

which is well-defined as a Riemann integral, thanks to (3.3.13), and is such that

$$\forall u \in B^2, \quad \forall \tau \in \mathbb{R}, \quad \|A(\tau)u\|_{L^2} \leq C\tau\|u\|_{B^2}. \quad (3.3.16)$$

Now, we notice that if $\tilde{\Phi}^\varepsilon \in C^0([0, T], B^4)$, then by (3.3.2) we have that $\partial_t \tilde{\Phi}^\varepsilon \in C^0([0, T], B^2)$. Hence one can integrate by parts in the first integral of (3.3.14) and,

if $m \geq 4$, the following expression holds true for all $t \in [0, T]$, in the sense of functions in $C^0([0, T], L^2)$:

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\varepsilon} \int_0^t a\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds &= i\varepsilon \int_0^t A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \partial_t \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds - i\varepsilon A\left(\frac{t}{\varepsilon^2}\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t) \\ &= \int_0^t A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) a\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds - i\varepsilon A\left(\frac{t}{\varepsilon^2}\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t) \\ &\quad + \varepsilon \int_0^t A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \left(-\Delta_{x,y} \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) + F_0\left(\widetilde{\Phi}^\varepsilon(s)\right)\right) ds, \end{aligned}$$

where we used (3.3.2) to evaluate $i\partial_t \widetilde{\Phi}^\varepsilon$. Finally, the Duhamel formula (3.3.14) becomes

$$\begin{aligned} \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t) &= \widetilde{\Psi}_0 + \int_0^t A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) a\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds - i\varepsilon A\left(\frac{t}{\varepsilon^2}\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t) \\ &\quad + \varepsilon \int_0^t A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \left(-\Delta_{x,y} \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) + F_0\left(\widetilde{\Phi}^\varepsilon(s)\right)\right) ds \\ &\quad - i \int_0^t \left(-\Delta_{x,y} \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) + F_0\left(\widetilde{\Phi}^\varepsilon(s)\right)\right) ds. \end{aligned} \tag{3.3.17}$$

Step 2 : approximation of the Duhamel formula. Denote

$$\widehat{\Phi}^\varepsilon(t) = \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t) + i\varepsilon A\left(\frac{t}{\varepsilon^2}\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t)$$

and rewrite (3.3.17) as follows :

$$\begin{aligned} \widehat{\Phi}^\varepsilon(t) &= \widetilde{\Psi}_0 + \int_0^t \left(A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) a\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) + i\partial_x^2\right) \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds - i \int_0^t \left(-\partial_y^2 \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) + F_0\left(\widetilde{\Phi}^\varepsilon(s)\right)\right) ds \\ &\quad + \varepsilon \int_0^t A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) \left(-\Delta_{x,y} \widetilde{\Phi}^\varepsilon(s) + F_0\left(\widetilde{\Phi}^\varepsilon(s)\right)\right) ds. \end{aligned} \tag{3.3.18}$$

In this step, we prove that

$$\sup_{t \in [0, T]} \|\widehat{\Phi}^\varepsilon(t) - \widetilde{\Phi}^\varepsilon(t)\|_{B^1} \leq \varepsilon C_M \tag{3.3.19}$$

and that

$$\widehat{\Phi}^\varepsilon(t) = \widetilde{\Psi}_0 - i \int_0^t \left(A_0 \widehat{\Phi}^\varepsilon(s) - \partial_y^2 \widehat{\Phi}^\varepsilon(s) + F_0\left(\widehat{\Phi}^\varepsilon(s)\right) + \varepsilon f^\varepsilon(s)\right) ds, \tag{3.3.20}$$

with

$$\sup_{t \in [0, T]} \|f^\varepsilon\|_{B^1} \leq C_M. \tag{3.3.21}$$

In order to prove this claim, we state two technical lemmas which are proved in the Appendix 3.D so that the proof would be more readable.

Lemma 3.3.4. *Let V_c satisfy Assumptions 4.1.1 and 3.1.2. Then, for all integer ℓ , the operator $A(\tau)$ defined by (3.3.15) satisfies*

$$\forall u \in C^0([0, T], B^{2n_0+\ell+8}), \quad \sup_{t \in [0, T]} \left\| A \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) u(t) \right\|_{B^\ell} \leq C \|u\|_{C^0([0, T], B^{2n_0+\ell+8})}, \quad (3.3.22)$$

where n_0 is as in Assumption 3.1.2 and C is independent of ε .

Lemma 3.3.5. *Let V_c satisfy Assumptions 4.1.1 and 3.1.2. Let $T > 0$ and $m = 4n_0 + 17$. Let $u \in C^0([0, T], B^m)$ such that $\partial_t u \in C^0([0, T], B^{m-2})$. Then we have, for all $\varepsilon \in (0, 1]$,*

$$\sup_{t \in [0, T]} \left\| \int_0^t \left(A \left(\frac{s}{\varepsilon^2} \right) a \left(\frac{s}{\varepsilon^2} \right) + i \partial_x^2 \right) u(s) ds + i \int_0^t A_0 u(s) ds \right\|_{B^1} \leq C \varepsilon^2 \|u\| \quad (3.3.23)$$

where A_0 , a and A are respectively defined by (3.3.3), (5.3.14) and (3.3.15) and where $\|u\|$ denotes shortly $\|u\|_{C^0([0, T], B^m)} + \|\partial_t u\|_{C^0([0, T], B^{m-2})}$.

In order to apply these lemmas, we need some bounds for $\tilde{\Phi}^\varepsilon$ and $\partial_t \tilde{\Phi}^\varepsilon$. Let us fix $m = 4n_0 + 17$, where n_0 is as in Assumption 3.1.2 and assume that we have the uniform estimate (3.3.7). By (3.2.8), we deduce that

$$\|\Delta_{x,y} \tilde{\Phi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^{m-2})} + \left\| e^{itH_z/\varepsilon^2} z e^{-itH_z/\varepsilon^2} \partial_x \tilde{\Phi}^\varepsilon \right\|_{C^0([0, T], B^{m-2})} \leq C_M. \quad (3.3.24)$$

Moreover, from (4.2.5), we deduce that

$$\|F_0(\tilde{\Phi}^\varepsilon)\|_{C^0([0, T], B^m)} \leq C_M. \quad (3.3.25)$$

Hence, from (3.3.2), (3.3.24) and (3.3.25), we get

$$\|\partial_t \tilde{\Phi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^{m-2})} \leq \frac{C_M}{\varepsilon}. \quad (3.3.26)$$

Therefore, applying Lemmas 3.3.4 and 3.3.5 and using (3.3.7), (3.3.24), (3.3.25) and (3.3.26) yield

$$\sup_{t \in [0, T]} \left\| A \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) \tilde{\Phi}^\varepsilon(t) \right\|_{B^{2n_0+5}} \leq C_M, \quad (3.3.27)$$

$$\varepsilon \sup_{t \in [0, T]} \left\| A \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) \left(-\Delta_{x,y} \tilde{\Phi}^\varepsilon(t) + F_0(\tilde{\Phi}^\varepsilon(t)) \right) \right\|_{B^1} \leq \varepsilon C_M \quad (3.3.28)$$

and

$$\sup_{t \in [0, T]} \left\| \int_0^t \left(A \left(\frac{s}{\varepsilon^2} \right) a \left(\frac{s}{\varepsilon^2} \right) + i \partial_x^2 \right) \tilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds + i \int_0^t A_0 \tilde{\Phi}^\varepsilon(s) ds \right\|_{B^1} \leq \varepsilon C_M, \quad (3.3.29)$$

where we used that $m \geq 4n_0 + 17$, thus in particular $m \geq 4n_0 + 13$ and $m \geq 2n_0 + 11$. Hence, from (3.3.27), we deduce (3.3.19) and

$$\|\partial_y^2(\widetilde{\Phi}^\varepsilon - \widehat{\Phi}^\varepsilon)\|_{C^0([0,T],B^1)} + \left\| F_0(\widetilde{\Phi}^\varepsilon) - F_0(\widehat{\Phi}^\varepsilon) \right\|_{C^0([0,T],B^1)} \leq \varepsilon C_M, \quad (3.3.30)$$

where we also used the estimate (3.2.15). Moreover, from (3.3.5) and (3.3.27), we get

$$\|A_0(\widetilde{\Phi}^\varepsilon - \widehat{\Phi}^\varepsilon)\|_{C^0([0,T],B^1)} \leq \varepsilon C_M. \quad (3.3.31)$$

Finally, inserting (3.3.28), (3.3.29), (3.3.30), (3.3.31) in (3.3.18) yields (3.3.20) with the estimate (3.3.21).

Step 3 : a stability result for the limit system. First notice that (3.3.20) implies that $\widehat{\Phi}^\varepsilon$ satisfies in the strong sense the equation

$$i\partial_t \widehat{\Phi}^\varepsilon = A_0 \widehat{\Phi}^\varepsilon - \partial_y^2 \widehat{\Phi}^\varepsilon + F_0(\widehat{\Phi}^\varepsilon) + \varepsilon f^\varepsilon, \quad \Phi(t=0) = \widetilde{\Psi}_0.$$

which has the following mild formulation :

$$\widehat{\Phi}^\varepsilon(t) = e^{-it(A_0 - \partial_y^2)} \widetilde{\Psi}_0 - i \int_0^t e^{-i(t-s)(A_0 - \partial_y^2)} \left(F_0(\widehat{\Phi}^\varepsilon(s)) + \varepsilon f^\varepsilon \right) ds. \quad (3.3.32)$$

Apply now Proposition 3.3.1 (ii) with $\widetilde{\Psi}_0$ as initial data : there exists a maximal solution $\widetilde{\Phi} \in C^0([0, T_{max}), B^1)$ to the equation (3.3.6). Assume that T is such that $0 < T < T_{max}$. Substracting (3.3.6) to (3.3.32) leads, for all $t \leq T$, to

$$\begin{aligned} \|\widehat{\Phi}^\varepsilon(t) - \widetilde{\Phi}(t)\|_{B^1} &\leq \int_0^t \left\| F_0(\widehat{\Phi}^\varepsilon(s)) - F_0(\widetilde{\Phi}(s)) \right\|_{B^1} ds + \varepsilon \|f^\varepsilon\|_{C^0([0,T],B^1)} \\ &\leq C_M \left(\varepsilon + \int_0^t \left\| \widehat{\Phi}^\varepsilon(s) - \widetilde{\Phi}(s) \right\|_{B^1} ds \right), \end{aligned}$$

where we used (3.2.15), (3.3.21) and $\|\widehat{\Phi}^\varepsilon\|_{C^0([0,T],B^1)} \leq C_M$. Therefore, the Gronwall lemma gives the estimate (3.3.8) and the proof of Proposition 3.3.2 is complete. \square

3.4 Proof of the main theorem

This section is devoted to the proof of the main Theorem 3.1.3. Remark that the statement (i) is already proved in Proposition 3.3.1. Let us prove the statement (ii) of Theorem 3.1.3.

Let $\Psi_0 \in B^1$. Denote by $\Psi^\varepsilon \in C^0([0, +\infty), B^1)$ the solution of (3.1.1), (3.1.2), (3.1.3) and let $T_0 \in (0, +\infty]$ be the maximal time given by Proposition 3.2.1 (i).

We also introduce the maximal solution $\Phi \in C^0([0, T_{max}), B^1)$ of the limit system (3.3.4), given by Proposition 3.3.1. Pick T such that

$$0 < T < \min(T_0, T_{max})$$

and let $\eta > 0$.

Since $T < T_{max}$, according to Remark 3.3.3, one can define $\delta_{\eta/3, T} > 0$ such that the following holds true. For all $\tilde{\Psi}_0$ satisfying

$$\|\Psi_0 - \tilde{\Psi}_0\|_{B^1} \leq \delta_{\eta/3, T},$$

the equation (3.3.6) admits a unique solution $\tilde{\Psi} \in C^0([0, T], B^1)$ and we have (3.3.11) :

$$\sup_{t \in [0, T]} \|\Phi(t) - \tilde{\Phi}(t)\|_{B^1} \leq \eta/3.$$

Next, we fix $m \geq 2$ according to Proposition 3.3.2 and $\delta > 0$ by

$$\delta = \min\left(\frac{\eta}{3}, \delta_{\eta/3, T}\right). \quad (3.4.1)$$

Since $T < T_0$, Proposition 3.2.1 (ii) enables to choose $\tilde{\Psi}_0 \in B^m$ and ε_δ such that the corresponding solution $\tilde{\Psi}^\varepsilon$ of the intermediate system (3.2.1), (3.2.2), (3.2.3) satisfies (3.2.5) and (3.2.6) for all $\varepsilon \leq \varepsilon_\delta$:

$$\|\Psi^\varepsilon - \tilde{\Psi}^\varepsilon\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq \delta \leq \frac{\eta}{3} \quad (3.4.2)$$

and $\tilde{\Psi}^\varepsilon$ is bounded in $C^0([0, T], B^m)$ uniformly with respect to ε .

Now, we remark that by (3.4.2) this initial data $\tilde{\Psi}_0$ satisfies

$$\|\Psi_0 - \tilde{\Psi}_0\|_{B^1} \leq \delta \leq \delta_{\eta/3, T}.$$

Hence, Remark 3.3.3 gives that the solution $\tilde{\Phi}$ of the equation (3.3.6) satisfies

$$\|\Phi - \tilde{\Phi}\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq \frac{\eta}{3},$$

or, equivalently,

$$\|e^{-itH_z/\varepsilon^2} \Phi - e^{-itH_z/\varepsilon^2} \tilde{\Phi}\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq \frac{\eta}{3}, \quad (3.4.3)$$

Moreover, the uniform bound of $\tilde{\Psi}^\varepsilon$ in $C^0([0, T], B^m)$ enables to apply Proposition 3.3.2, which gives that the function $\tilde{\Psi}^\varepsilon$ satisfies

$$\|\tilde{\Psi}^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2} \tilde{\Phi}\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq \delta \leq \frac{\eta}{3}, \quad (3.4.4)$$

for $\varepsilon \leq \varepsilon_\delta$, where $\tilde{\Phi}$ solves (3.3.6). Finally, (3.4.2), (3.4.3) and (3.4.4) yield the existence of ε_0 such that, for all $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ we have

$$\|\Psi^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2}\tilde{\Phi}\|_{C^0([0,T],B^1)} \leq \eta. \quad (3.4.5)$$

To conclude, it remains to remark that $T_0 \geq T_{max}$. Indeed, if $T_0 < T_{max}$, then we have, by Proposition 3.2.1 (i),

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \|\Psi^\varepsilon\|_{C^0([0,T_0],B^1)} = +\infty,$$

which implies by (3.4.5) that

$$\lim_{T \rightarrow T_0} \|\Phi(T)\|_{B^1} = +\infty.$$

This contradicts $T_0 < T_{max}$. The proof of Theorem 3.1.3 is complete. \square

3.A Proof of Lemma 3.2.4

First, by integrating by parts and applying Cauchy-Schwarz, we obtain

$$\|Bz\partial_x u\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^3} B^2 z^2 |\partial_x u|^2 dx dy dz = \int_{\mathbb{R}^3} (B^2 z^2 u)(-\partial_x^2 u) dx dy dz \leq \|u\|_{B^2}^2.$$

Hence, the first properties stated in the Lemma are obvious from the definition (3.2.9), and we shall only detail the proof of the equivalence of norms.

Step 1 : the case $m = 1$. From the definition (3.2.9) and the assumption (4.1.6) on V_c , we deduce that

$$\begin{aligned} \|H_\varepsilon^{1/2} u\|_{L^2}^2 &= ((-\partial_z^2 + V_c)u, u)_{L^2} + \|(\varepsilon\partial_x + iBz)u\|_{L^2}^2 \\ &= ((-\partial_z^2 + V_c)u, u)_{L^2} + B^2 \|zu\|_{L^2}^2 + \varepsilon^2 \|\partial_x u\|_{L^2}^2 - 2\varepsilon B \Im(zu, \partial_x u)_{L^2} \\ &\geq \frac{1}{2} ((-\partial_z^2 + V_c)u, u)_{L^2} + \left(\frac{a^2}{2} + B^2\right) \|zu\|_{L^2}^2 + \varepsilon^2 \|\partial_x u\|_{L^2}^2 - 2\varepsilon B \|zu\|_{L^2} \|\partial_x u\|_{L^2} \\ &\geq \frac{1}{2} ((-\partial_z^2 + V_c)u, u)_{L^2} + \frac{a^2}{4} \|zu\|_{L^2}^2 + \frac{a^2}{a^2 + 4B^2} \varepsilon^2 \|\partial_x u\|_{L^2}^2 \\ &\geq C \|H_z^{1/2} u\|_{L^2}^2 + C\varepsilon^2 \|\partial_x u\|_{L^2}^2. \end{aligned}$$

Conversely, from (3.1.22) and (3.2.9), we estimate directly

$$(H_\varepsilon u, u)_{L^2} \leq C' \|H_z^{1/2} u\|_{L^2}^2 + C'\varepsilon^2 \|\partial_x u\|_{L^2}^2.$$

For all $\varepsilon \in (0, 1]$, this yields the equivalence of norms (3.2.10).

For $m \geq 2$, we will proceed by induction. For the clarity of the proof, let us introduce two notations. For $m \in \mathbb{N}$, we denote by (\mathcal{P}_m) the property

(\mathcal{P}_m) : there exists $\varepsilon_m > 0$ such that, for all $\varepsilon \in (0, \varepsilon_m]$ and for all $u \in B^m$, we have

$$\frac{1}{2}\|u\|_{B^m}^2 \leq \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|\Delta_{x,y}^{m/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|H_\varepsilon^{m/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq 2\|u\|_{B^m}^2,$$

and by (\mathcal{Q}_m) the property

(\mathcal{Q}_m) : there exists $C_m > 0$ such that, for all $u \in B^m$ and $\varepsilon \in (0, 1]$,
the operator $A_m = \frac{1}{\varepsilon}(H_\varepsilon^m - H_z^m)$ satisfies $|(A_m u, u)_{L^2}| \leq C_m \|u\|_{B^m}^2$.

Note that the lemma will be proved if we show that (\mathcal{P}_m) holds true for all $m \geq 0$. Note also that, up to a possible modification of the sequence $(\varepsilon_m)_{m \in \mathbb{N}}$, this sequence can be chosen nonincreasing.

Step 2 : (\mathcal{Q}_m) implies (\mathcal{P}_m) . Let $m \geq 0$ be fixed. From (\mathcal{Q}_m) , we deduce that

$$\begin{aligned} \|H_\varepsilon^{m/2}u\|_{L^2}^2 &= (H_\varepsilon^m u, u)_{L^2} = (H_z^m u, u)_{L^2} + \varepsilon(A_m u, u)_{L^2} \\ &= \|H_z^{m/2}u\|_{L^2}^2 + \varepsilon(A_m u, u)_{L^2}, \end{aligned}$$

thus

$$\|H_z^{m/2}u\|_{L^2}^2 - \varepsilon C_m \|u\|_{B^m}^2 \leq \|H_\varepsilon^{m/2}u\|_{L^2}^2 \leq \|H_z^{m/2}u\|_{L^2}^2 + \varepsilon C_m \|u\|_{B^m}^2. \quad (3.A.1)$$

Setting

$$\varepsilon_m = \frac{1}{2C_m},$$

we deduce directly from (3.1.37) and (3.A.1) that, for $\varepsilon \leq \varepsilon_m$,

$$\frac{1}{2}\|u\|_{B^m}^2 \leq \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|\Delta_{x,y}^{m/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 + \|H_\varepsilon^{m/2}u\|_{L^2(\mathbb{R}^3)}^2 \leq 2\|u\|_{B^m}^2.$$

We have proved (\mathcal{P}_m) .

Step 3 : proof of (\mathcal{Q}_m) for $m = 0$ and 1. For $m = 0$, choose $A_0 = 0$ and (\mathcal{Q}_0) is obvious. Let us prove (\mathcal{Q}_1) . From (3.2.9), we have

$$H_\varepsilon = H_z + \varepsilon A_1, \quad \text{with } A_1 = -2iBz\partial_x - \varepsilon\partial_x^2. \quad (3.A.2)$$

For all $u \in B^1$, we have

$$|(A_1 u, u)_{L^2}| = | -2iB(\partial_x u, zu)_{L^2} + \varepsilon\|\partial_x u\|_{L^2}^2 | \leq C(\|zu\|_{L^2}^2 + \|\partial_x u\|_{L^2}^2) \leq C_1\|u\|_{B^1}^2,$$

where we applied Cauchy-Schwarz and Lemma 3.2.3. We have proved (\mathcal{Q}_1) .

Step 4 : proof of (\mathcal{Q}_m) for $m \geq 2$. We shall now proceed by induction. Let $m \geq 2$ and assume that (\mathcal{Q}_{m-2}) and (\mathcal{Q}_{m-1}) hold true. Let us prove (\mathcal{Q}_m) . We compute

$$\begin{aligned} H_\varepsilon^m &= (H_z + \varepsilon A_1)H_\varepsilon^{m-2}(H_z + \varepsilon A_1) \\ &= H_z H_\varepsilon^{m-2} H_z + \varepsilon A_1 H_\varepsilon^{m-1} + \varepsilon H_\varepsilon^{m-1} A_1 \\ &= H_z^m + \varepsilon H_z A_{m-2} H_z + \varepsilon A_1 H_\varepsilon^{m-1} + \varepsilon H_\varepsilon^{m-1} A_1 \end{aligned}$$

where we have applied (\mathcal{Q}_{m-2}) . Hence, denoting

$$A_m = H_z A_{m-2} H_z + A_1 H_\varepsilon^{m-1} + H_\varepsilon^{m-1} A_1, \quad (3.A.3)$$

we obtain

$$H_\varepsilon^m = H_z^m + \varepsilon A_m$$

and, for all $u \in B^m$, we get from the definition (3.A.3) that

$$|(A_m u, u)_{L^2}| \leq |(H_z A_{m-2} H_z u, u)_{L^2}| + 2|(H_\varepsilon^{m-1} u, A_1 u)_{L^2},$$

where we used that H_ε^{m-1} and the operator A_1 defined by (3.A.2) are selfadjoint. It remains to estimate the two terms in the right-hand side of this inequality. The first one can be estimated as follows :

$$|(H_z A_{m-2} H_z u, u)_{L^2}| = |(A_{m-2} H_z u, H_z u)_{L^2}| \leq C_{m-2} \|H_z u\|_{B^{m-2}}^2 \leq C_{m-2} \|u\|_{B^m}^2,$$

where we used (\mathcal{Q}_{m-2}) and (3.2.8). The second one can be estimated as follows :

$$\begin{aligned} |(H_\varepsilon^{m-1} u, A_1 u)_{L^2}| &= |(H_\varepsilon^{m-1} u, (i\partial_x)(-2Bzu + i\partial_x u))_{L^2}| \\ &= \left| \left(H_\varepsilon^{\frac{m-1}{2}} (i\partial_x u), H_\varepsilon^{\frac{m-1}{2}} (-2Bzu + i\partial_x u) \right) \right|_{L^2} \\ &\leq \left\| H_\varepsilon^{\frac{m-1}{2}} (i\partial_x u) \right\|_{L^2} \left\| H_\varepsilon^{\frac{m-1}{2}} (-2Bzu + i\partial_x u) \right\|_{L^2} \\ &\leq C \|\partial_x u\|_{B^{m-1}} \|zu\|_{B^{m-1}} + C \|\partial_x u\|_{B^{m-1}}^2 \\ &\leq C \|u\|_{B^m}^2, \end{aligned}$$

where we used that H_ε commutes with ∂_x , the Cauchy-Schwarz inequality, the property (\mathcal{P}_{m-1}) and, at the last step, (3.2.8). Therefore, we have proved that

$$|(A_m u, u)_{L^2}| \leq C_m \|u\|_{B^m}^2,$$

which proves (\mathcal{Q}_m) . The proof of the lemma is complete.

3.B Proof of Lemma 3.2.5

For readability, we introduce in this appendix the following notation :

$$\forall (x, y, z) \in \mathbb{R}^3, \forall \alpha \in \{0, 1\}, \forall \varepsilon \in (0, 1), \quad r_\alpha^\varepsilon(x, y, z) = \sqrt{x^2 + y^2 + \alpha \varepsilon^2 z^2}.$$

With this notation, for all $u \in B^1$, and $\alpha \in \{0, 1\}$, the nonlinearity $F_\alpha(u)$ defined in (3.2.12) reads

$$F_\alpha(u) = \left(\frac{1}{4\pi r_\alpha^\varepsilon} * (|u|^2) \right) u.$$

In order to prove the estimates stated in Lemma 3.2.5, we prove the following technical lemma on the Poisson nonlinearity.

Lemma 3.B.1. *The following estimates hold.*

(i) *There exists a positive constant C that does not depend on $\varepsilon \in (0, 1]$ or $\alpha \in \{0, 1\}$ such that*

$$\forall u, v \in H^1(\mathbb{R}^3), \left\| \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (uv) \right\|_{L^\infty} \leq C \|u\|_{H^1} \|v\|_{H^1}. \quad (3.B.1)$$

(ii) *There exists a positive constant C that does not depend on $\varepsilon \in (0, 1]$ or $\alpha \in \{0, 1\}$ such that, if D denotes a derivative with respect to x, y or z ,*

$$\forall u, v \in H^1(\mathbb{R}^3), \forall v \in H^1(\mathbb{R}^3), \left\| D \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (uv) \right) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty} \leq C \|u\|_{H^1} \|v\|_{H^1} \quad (3.B.2)$$

(iii) *For any integer k , let $\beta = (\beta_x, \beta_y, \beta_z) \in \mathbb{N}^3$ be a multiinteger of length $|\beta| = \beta_x + \beta_y + \beta_z = k$ and let $D^\beta = \partial_x^{\beta_x} \partial_y^{\beta_y} \partial_z^{\beta_z}$ be the associated derivative. Then there exists a positive constant C_k depending only on k such that*

$$\forall u \in H^k, \left\| D^\beta \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * |u|^2 \right) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty} \leq C_k \|u\|_{H^1} \|u\|_{H^k}. \quad (3.B.3)$$

Proof. Noting that, for all $(x, y) \in \mathbb{R}^2$,

$$\left\| \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (uv) \right) (x, y, \cdot) \right\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2}} \|uv(x', y', \cdot)\|_{L^1(\mathbb{R})} dx' dy', \quad (3.B.4)$$

we only need estimates for the convolution with $\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}$ in \mathbb{R}^2 . Here, we refer the reader to Lemma B.1 of [7] where it was shown that for any $f \in L^p(\mathbb{R}^2) \cap L^1(\mathbb{R}^2)$ with $2 < p \leq \infty$, the following bound holds :

$$\left\| \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} * f \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^2)} \leq C_p \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^2)}^\theta \|f\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}^{1-\theta} \quad (3.B.5)$$

where $\theta = p/(2p-2)$. Moreover, from Cauchy-Schwarz and Sobolev embeddings, we deduce that for all $p \in [1, +\infty)$,

$$\begin{aligned} \left\| \|uv(x, y, \cdot)\|_{L^1(\mathbb{R})} \right\|_{L^p(\mathbb{R}^2)} &\leq \left\| \|u(x, y, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R})} \|v(x, y, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R})} \right\|_{L^p(\mathbb{R}^2)} \\ &\leq \|u\|_{L_{x,y}^{2p} L_z^2} \|v\|_{L_{x,y}^{2p} L_z^2} \leq \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^3)} \|v\|_{H^1(\mathbb{R}^3)}. \end{aligned}$$

Combined with (3.B.4) and (3.B.5), this proves Item (i).

In order to prove Item (ii), consider a first order derivative D with respect to x, y or z and let $u, v \in H^1(\mathbb{R}^3)$. Usual properties of the convolution give

$$D \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (uv) \right) = \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * D(uv) = \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (D(u)v + uD(v)).$$

Using (3.B.4) combined with the generalized Young formula gives

$$\begin{aligned} \left\| \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (D(u)v + uD(v)) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty} &\leq \left\| \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} * \|D(u)v + uD(v)\|_{L_z^1} \right\|_{L_{x,y}^3} \\ &\leq C \left\| \|D(u)v + uD(v)\|_{L_z^1} \right\|_{L_{x,y}^{6/5}} \end{aligned} \quad (3.B.6)$$

since the function $x \mapsto \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}$ belongs to $L_w^2(\mathbb{R}^2)$. We end the proof of Item (ii) noting that, thanks to Sobolev embeddings,

$$\begin{aligned} \left\| \|D(u)v + uD(v)\|_{L_z^1} \right\|_{L_{x,y}^{6/5}} &\leq C \|D(u)\|_{L^2} \|v\|_{L_{x,y}^3 L_z^2} + C \|D(v)\|_{L^2} \|u\|_{L_{x,y}^3 L_z^2} \\ &\leq C \|u\|_{H^1} \|v\|_{H^1}. \end{aligned}$$

In order to prove Item (iii), we follow the same lines with derivatives of higher orders. Consider the derivative D^β where $\beta = (\beta_x, \beta_y, \beta_z) \in \mathbb{N}^3$ is a multiinteger of length $|\beta| = \beta_x + \beta_y + \beta_z = k$. Usual properties of the convolution gives

$$\left\| D^\beta \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (|u|^2) \right) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty} = \left\| \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * D^\beta (|u|^2) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty}.$$

Again, using (3.B.4) combined to the generalized Young's formula lead to :

$$\left\| \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * D^\beta (|u|^2) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty} \leq \left\| \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} * \|D^\beta (|u|^2)\|_{L_z^1(\mathbb{R})} \right\|_{L_{x,y}^3} \leq C \|D^\beta (|u|^2)\|_{L_{x,y}^{6/5} L_z^1}. \quad (3.B.7)$$

We now write

$$D^\beta (u\bar{u}) = \sum_{\beta' \leq \beta} C_{\beta'} D^{\beta'} (u) D^{\beta - \beta'} (\bar{u}),$$

where the sum is over the set of multiintegers $\beta' = (\beta'_x, \beta'_y, \beta'_z)$ such that $\beta'_x \leq \beta_x$, $\beta'_y \leq \beta_y$ and $\beta'_z \leq \beta_z$. Thus, combining (3.B.7) with Sobolev embeddings gives as above

$$\begin{aligned} \left\| D^\beta \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (|u|^2) \right) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty} &\leq C \sum_{|\beta'|=k} \|D^{\beta'} (u)\|_{L^2} \|u\|_{L_{x,y}^3 L_z^2} \\ &\quad + C \sum_{|\beta'|=\ell, 0 \leq \ell < k} \|D^{\beta'} u\|_{L_{x,y}^3 L_z^2} \|D^{\beta - \beta'} (\bar{u})\|_{L^2} \\ &\leq C \|u\|_{H^k} \|u\|_{H^1} + C \sum_{\ell=0}^{k-1} \|u\|_{H^{\ell+1}} \|u\|_{H^{k-\ell}}. \end{aligned}$$

We conclude noting that, by interpolation, for all $\ell \leq k - 1$,

$$\|u\|_{H^{\ell+1}} \|u\|_{H^{k-\ell}} \leq \|u\|_{H^k} \|u\|_{H^1}. \quad (3.B.8)$$

□

Proof of Lemma 3.2.5. We first prove (3.2.15). In that view, let us fix u and v in B^1 , $\varepsilon \in (0, 1)$ and $\alpha \in \{0, 1\}$, and note that

$$F_\alpha(u) - F_\alpha(v) = \left(\frac{1}{4\pi r_\alpha^\varepsilon} * [(|u| + |v|)(|u| - |v|)] \right) u + \left(\frac{1}{4\pi r_\alpha^\varepsilon} * (|v|^2) \right) (u - v) \quad (3.B.9)$$

Hence (3.2.15) is a straightforward consequence of the following claim. There exists a positive constant C such that for all u_1, u_2 and $u_3 \in B^1$

$$\left\| \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right\|_{B^1} \leq C \|u_1\|_{B^1} \|u_2\|_{B^1} \|u_3\|_{B^1}. \quad (3.B.10)$$

Proof of the claim (3.B.10). According to Lemma 3.2.3 we have

$$\left\| \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right\|_{B^1} \leq C \left\| \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right\|_{H^1} + C \left\| \sqrt{V_c} \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right\|_{L^2} \quad (3.B.11)$$

First, applying (3.B.1) and then Lemma 3.2.3,

$$\left\| \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right\|_{L^2} \leq \left\| \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right\|_{L^\infty} \|u_3\|_{L^2} \leq C \|u_1\|_{B^1} \|u_2\|_{B^1} \|u_3\|_{B^1}. \quad (3.B.12)$$

Similarly, we have

$$\begin{aligned} \left\| \sqrt{V_c} \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right\|_{L^2} &\leq \left\| \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right\|_{L^\infty} \|\sqrt{V_c} u_3\|_{L^2} \\ &\leq C \|u_1\|_{B^1} \|u_2\|_{B^1} \|u_3\|_{B^1} \end{aligned} \quad (3.B.13)$$

Moreover, if D denotes any differential operator of order 1,

$$D \left(\left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right) = D \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 + \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) D(u_3). \quad (3.B.14)$$

Applying the Hölder inequality leads to

$$\begin{aligned} \left\| D \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) u_3 \right\|_{L^2} &\leq \left\| D \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) \right\|_{L^3_{x,y} L^\infty_z} \|u_3\|_{L^6_{x,y} L^2_z} \\ &\leq C \|u_1\|_{B^1} \|u_2\|_{B^1} \|u_3\|_{B^1}, \end{aligned} \quad (3.B.15)$$

where we used (3.B.2). Finally, using (3.B.1),

$$\begin{aligned} \left\| \left(\frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right) D(u_3) \right\|_{L^2} &\leq \left\| \frac{1}{r_\alpha^\varepsilon} * (u_1 u_2) \right\|_{L^\infty} \|D(u_3)\|_{L^2} \\ &\leq C \|u_1\|_{B^1} \|u_2\|_{B^1} \|u_3\|_{B^1}. \end{aligned} \quad (3.B.16)$$

We deduce the claim (3.B.10) by combining (3.B.11) with (3.B.12), (3.B.13), (3.B.14), (3.B.15) and (3.B.16).

In order to prove (4.2.5), consider a positive integer m and fix $u \in B^m$. According to Lemma 3.2.3, we only need to estimate $\|F_\alpha(u)\|_{H^m}$ and $\|V_c^{m/2}F_\alpha(u)\|_{L^2}$. In that view, we readily have

$$\begin{aligned} \left\| (1 + V_c^{m/2})F_\alpha(u) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} &\leq \left\| \frac{1}{4\pi r_\alpha^\varepsilon} * |u|^2 \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^3)} \left\| (1 + V_c^{m/2})u \right\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \\ &\leq C \|u\|_{B^1(\mathbb{R}^3)}^2 \|u\|_{B^m} \end{aligned} \quad (3.B.17)$$

where we applied (3.B.1) and Lemma 3.2.3.

Now, let D^β denote any derivative of length m and write

$$D^\beta(F_\alpha(u)) = \sum_{\beta' \leq \beta} C_{\beta'} D^{\beta'} \left(\frac{1}{4\pi r_\alpha^\varepsilon} * |u|^2 \right) D^{\beta-\beta'}(u).$$

Hence,

$$\begin{aligned} \|D^\beta F_\alpha(u)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} &\leq C \sum_{|\beta'|=m} \left\| \frac{1}{4\pi r_\alpha^\varepsilon} * |u|^2 \right\|_{L^\infty} \|D^{\beta'} u\|_{L^2} \\ &\quad + C \sum_{1 \leq |\beta'| \leq m} \left\| D^{\beta'} \left(\frac{1}{4\pi r_\alpha^\varepsilon} * |u|^2 \right) \right\|_{L_{x,y}^3 L_z^\infty} \|D^{\beta-\beta'}(u)\|_{L_{x,y}^6 L_z^2} \quad (3.B.18) \\ &\leq C \|u\|_{H^1}^2 \|u\|_{H^m} + C \sum_{\ell=1}^m \|u\|_{H^1} \|u\|_{H^\ell} \|u\|_{H^{m-\ell+1}} \end{aligned}$$

where we applied (3.B.1), (3.B.3) and Sobolev embeddings. Using the interpolation estimate (3.B.8) gives

$$\|D^m F_\alpha(u)\|_{L^2(\mathbb{R}^3)} \leq C \|u\|_{H^1}^2 \|u\|_{H^m} \leq C \|u\|_{B^1}^2 \|u\|_{B^m}. \quad (3.B.19)$$

We conclude the proof of (4.2.5) combining (4.2.12) and (3.B.19). This ends the proof of Lemma 3.2.5. \square

3.C Proof of Lemma 3.2.7

In this section, we set for simplicity $X = (x, y) \in \mathbb{R}^2$. In order to prove estimate (3.2.23), we first study the difference between both convolution kernels.

First Step : Difference between the convolution kernels

Let u, v be two functions of B^2 . Denote

$$\delta(u, v)(X, z) = \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2(z - z')^2}} - \frac{1}{|X - X'|} \right) u(X', z') v(X', z') dz' dX'. \quad (3.C.1)$$

We split the integral as follows :

$$\delta(u, v)(X, z) = \delta^+(u, v)(X, z) + \delta^-(u, v)(X, z) = \int_{X' \in \Omega^+} \int_{z' \in \mathbb{R}} + \int_{X' \in \Omega^-} \int_{z' \in \mathbb{R}},$$

where

$$\Omega^+ = \{X' \in \mathbb{R}^2, |X - X'| > \varepsilon\}, \quad \Omega^- = \{X' \in \mathbb{R}^2, |X - X'| < \varepsilon\}.$$

For all $\eta, \mu \in \mathbb{R}$, and $X' \neq X$, we have

$$\frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 \eta^2}} - \frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 \mu^2}} = \int_{\varepsilon \mu}^{\varepsilon \eta} \frac{-\xi}{(|X - X'|^2 + \xi^2)^{3/2}} d\xi \quad (3.C.2)$$

and

$$\frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 \eta^2}} - \frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 \mu^2}} \leq \frac{2}{|X - X'|}, \quad (3.C.3)$$

Besides, a simple study gives

$$\forall X' \neq X, \forall \xi \in \mathbb{R}, \frac{|\xi|}{(|X - X'|^2 + \xi^2)^{3/2}} \leq \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{1}{|X - X'|}. \quad (3.C.4)$$

Equation (3.C.2), combined with (3.C.3) and (3.C.4) allows us to claim that for all $\theta \in (0, 1)$,

$$\left| \frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 \eta^2}} - \frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 \mu^2}} \right| \leq C \varepsilon^\theta |\eta - \mu|^\theta \frac{1}{|X - X'|^{1+\theta}}. \quad (3.C.5)$$

Now, applying (3.C.5) with $\eta = z - z'$, $\mu = z'$ and $\theta = 3/8$ leads to

$$\begin{aligned} & \left| \int_{\Omega^+} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 (z - z')^2}} - \frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 z'^2}} \right) u(X', z') v(X', z') dz' dX' \right| \\ & \leq C \varepsilon^{3/8} |z|^{3/8} \int_{\Omega^+} \frac{1}{|X - X'|^{11/8}} \|u(X', \cdot) v(X', \cdot)\|_{L^1_{\mathbb{R}}} dX' \\ & \leq C \varepsilon^{3/8} |z|^{3/8} \frac{1}{\varepsilon^{1/24}} \|u\|_{L^6_X L^2_z} \|v\|_{L^6_X L^2_z} \leq C \varepsilon^{1/3} |z|^{3/8} \|u\|_{B^1} \|v\|_{B^1}. \end{aligned}$$

where we used the Hölder inequality and Sobolev embeddings. Similarly, applying (3.C.5) with $\eta = z'$, $\mu = 0$ and $\theta = 3/4$ leads to

$$\begin{aligned} & \left| \int_{\Omega^+} \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{\sqrt{|X - X'|^2 + \varepsilon^2 z'^2}} - \frac{1}{|X - X'|} \right) |u(X', z')| |v(X', z')| dz' dX' \right| \\ & \leq C \varepsilon^{3/4} \int_{\Omega^+} \frac{1}{|X - X'|^{7/4}} \| |z'|^{3/4} u(X', \cdot) v(X', \cdot) \|_{L^1_{\mathbb{R}}} dX' \\ & \leq C \varepsilon^{3/4} \frac{1}{\varepsilon^{5/12}} \|z^{3/8} u\|_{L^6_X L^2_z} \|v\|_{L^6_X L^2_z} \\ & \leq C \varepsilon^{1/3} \|u\|_{B^2} \|v\|_{B^1}. \end{aligned}$$

We have proved that

$$|\delta^+(u, v)(X, z)| \leq C\varepsilon^{1/3}(1 + |z|^{3/8})\|u\|_{B^2}\|v\|_{B^1} \quad (3.C.6)$$

Consider now δ^- . Using (3.C.2) again leads to

$$|\delta^-(u, v)(X, z)| \leq \int_{\Omega^-} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \frac{|\xi|}{(|X - X'|^2 + \xi^2)^{3/2}} |u(X', z')| |v(X', z')| d\xi dz' dX'. \quad (3.C.7)$$

Moreover, a simple computation gives

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{|\xi|}{(|X - X'|^2 + \xi^2)^{3/2}} d\xi = \frac{2}{|X - X'|}.$$

Hence, (3.C.7) gives

$$\begin{aligned} |\delta^-(u, v)(X, z)| &\leq C \int_{\Omega^-} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{|X - X'|} |u(X', z')| |v(X', z')| dz' dX' \\ &\leq C\varepsilon^{1/3} \|u\|_{L_X^6 L_z^2} \|v\|_{L_X^6 L_z^2} \\ &\leq C\varepsilon^{1/3} \|u\|_{B^1} \|v\|_{B^1}. \end{aligned} \quad (3.C.8)$$

Combining (3.C.6) and (3.C.8) allows to conclude that

$$|\delta(u, v)(X, z)| \leq C\varepsilon^{1/3}(1 + \sqrt{V_c(z)})\|u\|_{B^2}\|v\|_{B^1}, \quad (3.C.9)$$

where we have used $z^{3/8} \leq C(1 + \sqrt{V_c(z)})$, deduced from (4.1.6).

Step 2 : Difference between the nonlinearities. In order to prove Lemma 3.2.7, we need to estimate the following quantity in B^1 :

$$F_1(u) - F_0(u) = \delta(u, \bar{u}) u, \quad (3.C.10)$$

where $u \in B^2$ is given. According to Lemma 3.2.3, we have

$$\|F_1(u) - F_0(u)\|_{B^1} \leq C\|\sqrt{V_c}(F_1(u) - F_0(u))\|_{L^2} + C\|F_1(u) - F_0(u)\|_{H^1}.$$

First, we deduce from (3.C.9) that

$$\|(1 + \sqrt{V_c})\delta(u, \bar{u}) u\|_{L^2} \leq C\varepsilon^{1/3}\|(1 + V_c)u\|_{L^2}\|u\|_{B^2}\|v\|_{B^1} \leq C\varepsilon^{1/3}\|u\|_{B^2}^3, \quad (3.C.11)$$

where we used Lemma 3.2.3. Let now D denote a first order derivative with respect to x , y or z . We clearly have

$$\begin{aligned} &\|D(F_1(u) - F_0(u))\|_{L^2} \\ &\leq \left\| \left(\frac{1}{\sqrt{|X|^2 + \varepsilon^2 z^2}} - \frac{1}{|X|} \right) * (D(u)\bar{u} + uD(\bar{u})) u \right\|_{L^2} + \|\delta(u, \bar{u})D(u)\|_{L^2} \\ &\leq 2\|\delta(\bar{u}, D(u))u\|_{L^2} + \|\delta(u, \bar{u})D(u)\|_{L^2}. \end{aligned} \quad (3.C.12)$$

According to (3.C.9), we have

$$\|\delta(\bar{u}, D(u))u\|_{L^2} \leq C\varepsilon^{1/3} \|(1 + \sqrt{V_c})u\|_{L^2} \|u\|_{B^2} \|D(u)\|_{B^1} \leq C\varepsilon^{1/3} \|u\|_{B^2}^3 \quad (3.C.13)$$

and

$$\|\delta(u, \bar{u})D(u)\|_{L^2} \leq C\varepsilon^{1/3} \|(1 + \sqrt{V_c})D(u)\|_{L^2} \|u\|_{B^2} \|u\|_{B^1} \leq C\varepsilon^{1/3} \|u\|_{B^2}^3, \quad (3.C.14)$$

where we used again Lemma 3.2.3. Combining (3.C.10), (3.C.11), (3.C.12), (3.C.13) and (3.C.14) gives (3.2.23). The proof of Lemma 3.2.7 is complete. \square

3.D Proof of the technical Lemmas 3.3.4 and 3.3.5

Let us develop the operators a and A defined by (5.3.14) and (3.3.15) on the eigenbasis χ_p . We have

$$a(\tau)u = - \sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} e^{i\tau(E_p - E_q)} a_{pq} i\partial_x u_q \chi_p$$

where we have introduced the coefficients

$$a_{pq} = \langle 2Bz\chi_p\chi_q \rangle. \quad (3.D.1)$$

Recall that, by Assumption 4.1.1, the potential V_c is even, so for all p , the function $(\chi_p(z))^2$ is even. Therefore, we have

$$\forall p \in \mathbb{N}, \quad a_{pp} = \langle 2Bz\chi_p^2 \rangle = 0,$$

thus

$$a(\tau)u = - \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} e^{i\tau(E_p - E_q)} a_{pq} i\partial_x u_q \chi_p. \quad (3.D.2)$$

Let us now integrate this formula in order to compute the operator A defined by (3.3.15) :

$$A(\tau)u = i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \frac{e^{i\tau(E_p - E_q)} - 1}{E_p - E_q} a_{pq} i\partial_x u_q \chi_p. \quad (3.D.3)$$

Before proving Lemmas 3.3.4 and 3.3.5, let us give a useful estimate on coefficients a_{pq} . For all $p \in \mathbb{N}$, $q \in \mathbb{N}$, $k \in \mathbb{N}$ we have

$$|a_{pq}| \leq C \frac{E_q^{(k+1)/2}}{E_p^{k/2}}. \quad (3.D.4)$$

Indeed, we have

$$\begin{aligned} \left| E_p^{k/2} a_{pq} \right| &= 2B \left| \left(H_z^{k/2} \chi_p, z\chi_q \right)_{L^2} \right| = 2B \left| (\chi_p, H_z^{k/2}(z\chi_q))_{L^2} \right| \\ &\leq 2B \|H_z^{k/2}(z\chi_q)\|_{L^2} \\ &\leq 2B \|z\chi_q\|_{B^k} \\ &\leq C \|\chi_q\|_{B^{k+1}} \leq C E_q^{(k+1)/2}, \end{aligned}$$

where we applied Lemma 3.2.3.

Proof of Lemma 3.3.4. Let n_0 be as in Assumption 3.1.2, let $\ell \in \mathbb{N}$ and $u \in C^0([0, T], B^{2n_0+8+\ell})$. Denoting

$$u_p = \langle u \chi_p \rangle, \quad \mu_p^2 = \|u_p \chi_p\|_{C^0([0, T], B^{2n_0+8+\ell})}^2, \quad (3.D.5)$$

we have

$$\|u\|_{C^0([0, T], B^{2n_0+8+\ell})}^2 = \sum_{p \geq 0} \mu_p^2 < +\infty. \quad (3.D.6)$$

From (3.D.3), we obtain

$$\|A \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) u(t)\|_{C^0([0, T], B^\ell)} \leq C \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} (1+q)^{n_0} |a_{pq}| \|u_q \chi_p\|_{C^0([0, T], B^{\ell+1})},$$

where we used Assumption 3.1.2. Besides, applying Lemma 3.2.3 gives

$$\begin{aligned} \|u_q\|_{C^0([0, T], H^s(\mathbb{R}^2))} &= \frac{1}{E_q^{n_0+4+(\ell-s)/2}} \|H_z^{n_0+4+(\ell-s)/2} (I + (-\Delta_{x,y})^{s/2})(u_q \chi_q)\|_{C^0([0, T], L^2)} \\ &\leq C \frac{E_q^{s/2}}{E_q^{n_0+4+\ell/2}} \mu_q \end{aligned} \quad (3.D.7)$$

for all $s \leq 2n_0 + 8 + \ell$. Hence, from the definition (3.1.37), we get

$$\begin{aligned} \|u_q \chi_p\|_{C^0([0, T], B^{\ell+1})} &\leq C E_p^{(\ell+1)/2} \|u_q\|_{C^0([0, T], L^2(\mathbb{R}^2))} + C \|u_q\|_{C^0([0, T], H^{\ell+1}(\mathbb{R}^2))} \\ &\leq C \frac{E_p^{(\ell+1)/2} + E_q^{(\ell+1)/2}}{E_q^{n_0+4+\ell/2}} \mu_q. \end{aligned}$$

and, by using (3.D.4) and (3.3.9),

$$(1+q)^{n_0} |a_{pq}| \|u_q \chi_p\|_{C^0([0, T], B^{\ell+1})} \leq C \frac{E_q^{n_0}}{E_p^2} |a_{pq}| \frac{E_p^{(\ell+5)/2} + E_q^{(\ell+1)/2} E_p^2}{E_q^{n_0+4+\ell/2}} \mu_q \leq C \frac{1}{E_p^2} \frac{\mu_q}{E_q}.$$

Therefore,

$$\|A \left(\frac{t}{\varepsilon^2} \right) u(t)\|_{C^0([0, T], B^\ell)} \leq C \left(\sum_{p \geq 0} \frac{1}{E_p^2} \right) \left(\sum_{q \geq 0} \frac{\mu_q}{E_q} \right) \leq C \left(\sum_{p \geq 0} \frac{1}{E_p^2} \right)^{3/2} \left(\sum_{q \geq 0} \mu_q^2 \right)^{1/2}$$

by Cauchy-Schwarz. To conclude, it suffices to use (3.3.9) and (3.D.6) : the series converge and we obtain the desired estimate (3.3.22).

Proof of Lemma 3.3.5. Let $m = 4n_0 + 17$ and let $u \in C^0([0, T], B^m)$ such that $\partial_t u \in C^0([0, T], B^{m-2})$. Denoting now

$$u_p = \langle u \chi_p \rangle, \quad \nu_p^2 = \|u_p \chi_p\|_{C^0([0, T], B^m)}^2 + \|\partial_t u_p \chi_p\|_{C^0([0, T], B^{m-2})}^2, \quad (3.D.8)$$

we have

$$\|u\|_{C^0([0,T],B^m)}^2 + \|\partial_t u\|_{C^0([0,T],B^{m-2})}^2 = \sum_{p \geq 0} \nu_p^2 < +\infty. \quad (3.D.9)$$

Applying Lemma 3.2.3 as above yields

$$E_p^{(m-s)/2} \|u_p\|_{C^0([0,T],H^s(\mathbb{R}^2))} + E_p^{(m-2-s)/2} \|\partial_t u_p\|_{C^0([0,T],H^s(\mathbb{R}^2))} \leq C \nu_p \quad (3.D.10)$$

for all $s \leq m$. By composing the expressions (3.D.3) and (3.D.2) for A and a , we obtain

$$\begin{aligned} A(\tau)a(\tau)u &= i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \sum_{n \neq q} \frac{e^{i\tau(E_p - E_q)} - 1}{E_p - E_q} e^{i\tau(E_q - E_n)} a_{pq} a_{qn} \partial_x^2 u_n \chi_p \\ &= i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \frac{1 - e^{i\tau(E_q - E_p)}}{E_p - E_q} (a_{pq})^2 \partial_x^2 u_p \chi_p \\ &\quad + i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \sum_{\substack{n \neq q \\ n \neq p}} \frac{e^{i\tau(E_p - E_n)} - e^{i\tau(E_q - E_n)}}{E_p - E_q} a_{pq} a_{qn} \partial_x^2 u_n \chi_p \end{aligned}$$

Now, remark that, by (3.1.24) and (3.D.1), we have for all $p \in \mathbb{N}$ the identity

$$1 + \sum_{q \neq p} \frac{(a_{pq})^2}{E_p - E_q} = \alpha_p.$$

Therefore we get, using the definition (3.3.3),

$$\begin{aligned} (A(\tau)a(\tau) + i\partial_x^2)u &= -iA_0u \\ &\quad - i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} e^{i\tau(E_q - E_p)} \frac{(a_{pq})^2}{E_p - E_q} \partial_x^2 u_p \chi_p \\ &\quad + i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \sum_{\substack{n \neq q \\ n \neq p}} (e^{i\tau(E_p - E_n)} - e^{i\tau(E_q - E_n)}) \frac{a_{pq} a_{qn}}{E_p - E_q} \partial_x^2 u_n \chi_p \end{aligned}$$

and, integrating,

$$\begin{aligned} &\int_0^t \left(A\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) + i\partial_x^2 \right) a\left(\frac{s}{\varepsilon^2}\right) u(s) ds + i \int_0^t A_0 u(s) ds \\ &= -i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \frac{(a_{pq})^2}{E_p - E_q} \chi_p \int_0^t e^{is(E_q - E_p)/\varepsilon^2} \partial_x^2 u_p(s) ds \\ &\quad + i \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \sum_{\substack{n \neq q \\ n \neq p}} \frac{a_{pq} a_{qn}}{E_p - E_q} \chi_p \int_0^t \left(e^{is(E_p - E_n)/\varepsilon^2} - e^{is(E_q - E_n)/\varepsilon^2} \right) \partial_x^2 u_n(s) ds \end{aligned} \quad (3.D.11)$$

In order to estimate the right-hand side of this identity, we claim that, for all $p \in \mathbb{N}$, $q \in \mathbb{N}$ and $\lambda \neq 0$, we have

$$\left\| \chi_p(z) \int_0^t e^{i\lambda s/\varepsilon^2} \partial_x^2 u_q(s, x, y) ds \right\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq C_T \frac{\varepsilon^2}{|\lambda|} \frac{E_p^{1/2} + E_q^{1/2}}{E_q^{(m-4)/2}} \nu_q \quad (3.D.12)$$

where C_T only depends on T and ν_n is defined by (3.D.8). This claim is proved below. As a consequence, we can estimate (3.D.11) as follows :

$$\begin{aligned} & \left\| \int_0^t \left(A \left(\frac{s}{\varepsilon^2} \right) a \left(\frac{s}{\varepsilon^2} \right) + i \partial_x^2 \right) u(s) ds + i \int_0^t A_0 u(s) ds \right\|_{C^0([0, T], B^1)} \\ & \leq C \varepsilon^2 \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \frac{(a_{pq})^2}{|E_p - E_q|^2} \frac{1}{E_p^{(m-5)/2}} \nu_p \\ & \quad + C \varepsilon^2 \sum_{p \geq 0} \sum_{q \neq p} \sum_{\substack{n \neq q \\ n \neq p}} \frac{|a_{pq}| |a_{qn}|}{|E_p - E_q|} \left(\frac{1}{|E_p - E_n|} + \frac{1}{|E_q - E_n|} \right) \frac{E_p^{1/2} + E_n^{1/2}}{E_n^{(m-4)/2}} \nu_n \\ & \leq C \varepsilon^2 \sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} \frac{E_p^3}{E_q^2} \frac{(1+p)^{2n_0}}{E_p^{(m-5)/2}} \nu_p \\ & \quad + C \varepsilon^2 \sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} \sum_{n \geq 0} (1+q)^{n_0} (1+n)^{n_0} \frac{E_n^{n_0+11/2}}{E_p^2 E_q^{n_0+2}} \frac{1}{E_n^{(m-4)/2}} \nu_n \\ & \leq C \varepsilon^2 \sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} \frac{1}{(1+q^2)} \frac{\nu_p}{1+p^3} + C \varepsilon^2 \sum_{p \geq 0} \sum_{q \geq 0} \sum_{n \geq 0} \frac{1}{(1+p^2)} \frac{1}{(1+q^2)} \frac{\nu_n}{1+n} \end{aligned}$$

where we used Assumption 3.1.2, (3.D.4), (3.3.9) and recall that $m = 4n_0 + 17$. Hence we deduce (3.3.23) by using Cauchy-Schwarz and (3.D.9). It remains to prove the claim.

Proof of the claim (3.D.12). Let

$$v(t, x, y, z) = \chi_p(z) \int_0^t e^{i\lambda s/\varepsilon^2} \partial_x^2 u_q(s, x, y) ds, \quad (3.D.13)$$

for $p \in \mathbb{N}$, $q \in \mathbb{N}$ and $\lambda \neq 0$. An integration by parts in (3.D.13) yields

$$v(t, x, y, z) = i \frac{\varepsilon^2}{\lambda} \chi_p \left(\int_0^t e^{i\lambda s/\varepsilon^2} \partial_x^2 \partial_t u_q(s, x, y) ds + e^{i\lambda t/\varepsilon^2} \partial_x^2 u_q(t, x, y) - \partial_x^2 u_q(0, x, y) \right).$$

Hence, by using (3.D.10), we obtain

$$\|v\|_{C^0([0, T], B^1)} \leq C_T \frac{\varepsilon^2}{|\lambda|} \frac{E_p^{1/2} + E_q^{1/2}}{E_q^{(m-4)/2}} \nu_q,$$

where C_T only depends on T . This concludes the proof of (3.D.12).

The proof of Lemma 3.3.5 is complete. □

Acknowledgement. The authors were supported by the Agence Nationale de la Recherche, ANR project QUATRAIN. They wish to thank N. Ben Abdallah and F. Castella for fruitful discussions.

Bibliographie

- [1] Allaire, G ; Piatnitski, A. *Homogenization of the Schrödinger equation and effective mass theorems*, Comm. Math. Phys. 258 (2005), no. 1, 1-22.
- [2] Ando, T. ; Fowler, B. ; Stern, F. *Electronic properties of two-dimensional systems*, Rev. Mod. Phys., **54** (1982), 437–672.
- [3] Bao, W. ; Markowich, P. A. ; Schmeiser, C. ; Weishäupl, R. *On the Gross-Pitaevski equation with strongly anisotropic confinement : formal asymptotics and numerical experiments*, Math. Models Methods Appl. Sci. **15** (2005), no. 5, 767–782.
- [4] Bastard, G. *Wave Mechanics Applied to Semi-conductor Heterostructures*, Les Éditions de Physique, EDP Sciences, Les Ulis Cedex, France, 1992.
- [5] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Delebecque-Fendt, F. ; Méhats, F. *The strongly confined Schrödinger-Poisson system for the transport of electrons in a nanowire.*, SIAM J. Appl. Math. **69** (2009), no. 4, 1162-1173.
- [6] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Méhats, F. *Time averaging for the strongly confined nonlinear Schrödinger equation, using almost periodicity.*, J. Diff. Eq. **245** (2008), no 1, 154-200
- [7] Ben Abdallah, N. ; Méhats, F. ; Pinaud, O. *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement*, SIAM J. Math. Anal, 36 (2005), 986-1013.
- [8] Ben Abdallah, N. ; Méhats, F. ; Schmeiser, C. ; Weishäupl, R. M. *The nonlinear Schrödinger equation with strong anisotropic harmonic potential*, SIAM J. Math. Anal. **37** (2005), no. 1, 189–199.
- [9] Bony, J.-M. ; Chemin, J.-Y. *Espaces fonctionnels associés au calcul de Weyl-Hörmander*, Bull. Soc. Math. France **122** (1994), no. 1, 77-118.
- [10] Brezzi F. ; Markowich, P. A. *The three dimensional Wigner -Poisson Problem : existence, uniqueness and approximation*, Math. Methods Appl. Sci. **14** (1991), no. 1, 35–61.
- [11] Carles, R. *Linear vs. nonlinear effects for nonlinear Schrödinger equations with potential*, Commun. Contemp. Math. **7** (2005), no. 4, 483-508.
- [12] Carles, R. ; Markowich, P. A. ; Sparber, C. *On the Gross-Pitaevskii equation for trapped dipolar quantum gases*. Nonlinearity **21** (2008), no. 11, 2569–2590.

- [13] Cazenave, T. *Semilinear Schrödinger Equations*, Lecture Notes AMS, (2003).
- [14] Cazenave, T. ; Esteban, M. J. *On the stability of stationary states for nonlinear Schrödinger equations with an external magnetic field*, Mat. Apl. Comput. **7** (1988), 155–168.
- [15] da Costa, R. C. T. *Quantum mechanics for a constraint particle*, Phys. Rev. A **23** (1981), no. 4, 1982–1987.
- [16] de Bouard, A. *Nonlinear Schrödinger equations with magnetic fields*, Differential Integral Equations **4** (1991), no. 1, 73–88.
- [17] Degond, P. ; Parzani, C., Vignal, M.-H. *A Boltzmann model for trapped particles in a surface potential*, Multiscale Modeling & Simulation, SIAM **5** (2006) no. 2, 364–392.
- [18] Duclos, P. ; Exner, P. *Curvature-induced bound states in quantum waveguides in two and three dimensions*. Rev. Math. Phys. **7** (1995), no. 1, 73–102.
- [19] Egorov, Yu. V. ; Shubin, M. A. *Partial differential equations*. I, Encyclopaedia Math. Sci., 30, Springer, Berlin, 1992.
- [20] Ferry, D.K. ; Goodnick, S.M. *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997.
- [21] Froese, R. ; Herbst, I. *Realizing holonomic constraints in classical and quantum mechanics*. Comm. Math. Phys. **220** (2001), no. 3, 489–535.
- [22] Helffer, B. ; Nier, F. *Hypoelliptic estimates and spectral theory for Fokker-Planck operators and Witten Laplacians*, Springer, 2005.
- [23] Illner, R. ; Zweifel, P. F. ; Lange, H. *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.
- [24] Messiah, A. ; *Mécanique quantique, tome 1*, Dunod, Paris, 2003
- [25] Pinaud, O. *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement : the stationary case*, J. Math. Phys. **45** (2004), no. 5, 2029–2050.
- [26] Reed, M. ; Simon, B. *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. 1–4, Academic Press, New York, San Francisco, London, 1972–1979.
- [27] Sanders, J. A. ; Verhulst, F. *Averaging Methods in Nonlinear Dynamical Systems*, Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Tokyo (1985).
- [28] Smrčka, L. ; T. Jungwirth, T. *In-plane magnetic-field-induced anisotropy of 2D Fermi contours and the field-dependent cyclotron mass*, J. Phys. Condens. Matter **6** (1994), 55–64.
- [29] Sparber, C. *Effective mass theorems for nonlinear Schrödinger equations*, SIAM J. Appl. Math. **66** (2006), no. 3, 820–842

- [30] Teufel, S. *Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics*, Lecture Notes in Mathematics 1821, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2003.
- [31] Vinter, B. ; Weisbuch, C. *Quantum Semiconductor Structures : Fundamentals & Applications*, Academic Press, 1991.

Chapitre 4

Modélisation du transport d'un gaz d'électrons dans une plaque fine

Sommaire

4.1 Introduction	129
4.1.1 The singular perturbation problem	129
4.1.2 From the physical problem to the singular perturbation problem.	131
4.1.3 Heuristic approach of the asymptotic model	133
4.1.4 Statement of the main results and sketch of the proof	137
4.2 Approximation by the intermediate system	139
4.2.1 Preliminaries : the functional framework	140
4.2.2 A priori estimates	143
4.2.3 Convergence towards the intermediate system	146
4.3 Time averaging of the intermediate system	150
4.4 Proof of the main theorem	164
4.A Proof of Lemma 4.2.4	167

Ce chapitre reproduit un article soumis, intitulé *An asymptotic model for the transport of a bidimensional electron gas in a slab.*

4.1 Introduction

4.1.1 The singular perturbation problem

In this paper, we study the behaviour of a quantum gas that evolves in a fine slab. These confined electron gas are of great interest for the nanoelectronic industry as the functioning of many nanoelectronic devices relies on the confined transport of electron gas. Here, we are interested in monodimensional confinement, meaning that the transport of charged particles remains typically bidimensional. This work is more precisely devoted to the rigorous derivation of a dynamic two-dimensional quantum model with space-charge effects describing the transport of electrons confined in a fine slab, say of thickness ε .

Even if the transport of the electron gas seems typically bidimensional in our case, the space-charge effects that have to be dealt with remain three dimensional. Our starting model is thus the 3D Schrödinger-Poisson system. Given a small parameter $\varepsilon > 0$, which is the typical extension of the 2DEG in the z direction, the three dimensional space variables are denoted by $(x, z) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$. The electron gas is confined along the horizontal x directions and **strongly** confined along the vertical z direction between the planes $\{z = 0\}$ and $\{z = \varepsilon\}$. The electron gas is therefore subject to three different effects : both confinements, along the respective vertical z direction and the horizontal x directions, and the self-consistent Poisson potential. The choice of a scale between these three effects will be made clear later on.

In order to model both confinements, the first idea is to introduce, in the 3D Schrödinger-Poisson system, two smooth confining exterior potentials at two different scales.

- the horizontal confinement (in the x directions), is modeled by the potential $V_1(x)$ where V_1 is meant to be a real positive function that goes to infinity with $|x|$ (the assumptions on V_1 will be made precise later on).
- the vertical confinement (in the z direction) is modeled by a smooth potential $V_z^\varepsilon(z)$ of form $V_z^\varepsilon(z) = \frac{1}{\varepsilon^2} V_2(\frac{z}{\varepsilon})$ to which we add homogeneous Dirichlet conditions on both planes $\{z = 0\}$ and $\{z = \varepsilon\}$. In that context, V_2 is meant to be a smooth positive function.

This leads us to use as a starting model the following dimensionless Schrödinger-Poisson system (where a rescaling in the z direction has been performed) :

$$i\partial_t \Psi^\varepsilon = (-\Delta_x + V_1(x)) \Psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} (-\partial_z^2 + V_2(z)) \Psi^\varepsilon + V^\varepsilon \Psi^\varepsilon \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (4.1.1)$$

$$\Psi^\varepsilon(t, x, 0) = \Psi^\varepsilon(t, x, 1) = 0 \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2 \quad (4.1.2)$$

$$\Psi^\varepsilon(0, x, z) = \Psi_0^\varepsilon(x, z) \quad (x, z) \in \Omega \quad (4.1.3)$$

$$-\partial_z^2 V^\varepsilon - \varepsilon^2 \Delta_x V^\varepsilon(t) = |\Psi^\varepsilon(t)|^2 \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (4.1.4)$$

$$V^\varepsilon(t, x, 0) = V^\varepsilon(t, x, 1) = 0 \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2. \quad (4.1.5)$$

The unknown is the pair $(\Psi^\varepsilon, V^\varepsilon)$ made of the electronic wave function Ψ^ε and the self-consistent potential V^ε that models the space-charge effects. The set Ω is the dimensionless set that corresponds to the physical extension $\mathbb{R}^2 \times (0, \varepsilon)$ of the gas :

$$\Omega := \mathbb{R}^2 \times (0, 1).$$

The main modeling assumptions in this context are therefore the choice of a scale between both confinement terms $V_1(x)$ and $\frac{1}{\varepsilon^2}V_2(\frac{z}{\varepsilon})$ (see subsection 4.1.2) as well as precise assumptions on both functions V_1 and V_2 . Let us first give the following assumptions on both potentials V_1 and V_2 .

Assumption 4.1.1. *Both potentials V_1 and V_2 are \mathcal{C}^∞ nonnegative functions. Moreover, the longitudinal V_1 potential satisfies*

$$V_1(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \infty. \tag{4.1.6}$$

Note that a smooth potential of the form $V_1(x) = C|x|^s$ for $|x| \geq |x_0|$, with $C > 0$, $s > 0$, satisfies these assumptions. In particular, we keep in mind throughout the paper the example of the harmonic potential $V_1 = a^2|x|^2$ which fits these conditions.

For later functional analysis purposes, we shall assume a reinforced version of the longitudinal confinement (in the $x \in \mathbb{R}^2$ directions). We will make them clear later on (see Assumption 4.1.4).

This paper aims at exhibiting an asymptotic bidimensional system for equations (4.1.1)-(4.1.5) as $\varepsilon \rightarrow 0$. Let us now give short bibliographical notes. First of all, confined quantum electron gas have been studied in a linear setting for a long time and by several authors (see [12, 14, 16, 25] and references therein). Nonlinear problems linked to the confinement of an electron gas have been studied more recently. Indeed, the approximation of the Schrödinger-Poisson system describing an electron gas constraint in a plane was studied in [3, 21], and when the gas is confined along a line in [2].

The problem of finding a hierarchy of asymptotic models for the transport of an electron gas confined along a plane has been treated in [3]. In that paper, the authors model the confinement on a plane with a 3D Schrödinger-Poisson system on the whole space \mathbb{R}^3 singularly perturbed with a confinement potential of form $\frac{1}{\varepsilon^2}V_c(\frac{z}{\varepsilon})$. The key tools are a refined analysis of the Poisson nonlinearity and techniques based on the projection upon the eigenmodes of the transverse Hamiltonian. The main difference with our current problem here comes from the fact that the solution to the Poisson equation is not of the same order whether the equation holds on the whole space \mathbb{R}^3 or on $\mathbb{R}^2 \times (0, 1)$. It indeed leads to two different range of densities : *high densities* or *densities of order 1* (see the further discussion).

In [13], the authors give an asymptotic model for the Schrödinger-Poisson system describing a 3D electron gas confined on a plane and subject to a strong uniform magnetic field in the plane of the gas. In that view, they use second order long-time

averaging techniques in order to deal with the fast oscillations due to the magnetic potential and a Sobolev scale adapted to the confinement operator.

When the nonlinearity depends locally on the density, (it is not the case of the Poisson nonlinearity here), asymptotic model for confined Bose-Einstein condensates are studied in [4, 1]. In [7], the authors present a model describing Bose-Einstein condensation of trapped dipolar quantum gases. This model takes the form of a time-dependent Schrödinger equation including a cubic nonlinearity and a non-local nonlinearity under the form of a convolution of the density with a dipole-interaction kernel.

4.1.2 From the physical problem to the singular perturbation problem.

In order to make clear the choice of a scale between both confinements, let us derive equations (4.1.1)-(4.1.5) from the Schrödinger-Poisson system written in physical variables. This system reads :

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + e\mathbf{V}_1(\mathbf{x})\Psi + \mathbf{V}_2(\mathbf{z})\Psi + \mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z})\Psi \quad (4.1.7)$$

$$-\Delta\mathbf{V} = \frac{e}{\epsilon_0} |\Psi|^2, \quad (4.1.8)$$

where m is the effective mass, e the elementary charge of the electron and ϵ_0 denotes the electric permittivity of the material. Now, each dimensionless quantity used in (4.1.1)-(4.1.5) is the associated physical quantity normalized by a typical scale as follows :

$$t = \frac{\mathbf{t}}{\bar{t}}, \quad x = \frac{\mathbf{x}}{\bar{x}}, \quad z = \frac{\mathbf{z}}{\bar{z}}, \quad V_1 = \frac{\mathbf{V}_1}{\bar{V}_1}, \quad V_2 = \frac{\mathbf{V}_2}{\bar{V}_2}, \quad V^\varepsilon = \frac{\mathbf{V}}{\bar{V}}, \quad \Psi^\varepsilon = \frac{\Psi}{\sqrt{N}}. \quad (4.1.9)$$

We now define two energy scales that will define the different scales of the three main effects that are the horizontal confinement, the vertical confinement and the self-consistent Poisson potential. The definition of these scales allows us to convey a physical meaning to the dimensionless equations (4.1.1)-(4.1.5) and a posteriori justify its expression. In that view, we define a strong energy E_{conf} , which will correspond to the energy of the vertical confinement (in z), and a transport energy E_{transp} , which will be the typical energy of the longitudinal transport (in x) and the one of the self-consistent effects.

We then define the small dimensionless parameter ε as the following quotient :

$$\varepsilon := \left(\frac{E_{transp}}{E_{conf}} \right)^{1/2} \ll 1. \quad (4.1.10)$$

We now come to the scaling assumptions. We first set to the scale E_{conf} the vertical confinement potential V_2 and the kinetic energy along z :

$$E_{conf} := e\bar{V}_2 = \frac{\hbar^2}{2m\bar{z}^2}.$$

Then, we set to the scale E_{transp} the horizontal confinement potential V_1 , the kinetic energy along the $x = (x_1, x_2)$ directions, the self-consistent potential V^ε , and we choose a time-scale adapted to this energy :

$$E_{transp} := e\bar{V}_1 = e\bar{V} = \frac{\hbar^2}{2m\bar{x}^2} = \frac{\hbar}{t}.$$

Note that these choices of energy scales imply that ε is also the ratio between the transversal and longitudinal scales :

$$\varepsilon = \frac{\bar{z}}{\bar{x}}.$$

Inserting the dimensionless quantities defined by (4.1.9) in the physical equations (4.1.7) leads to :

$$i\partial_t\Psi^\varepsilon = -\Delta_x\Psi^\varepsilon - \frac{E_{conf}}{E_{transp}}\partial_z^2\Psi^\varepsilon + V_1(x)\Psi^\varepsilon + \frac{E_{conf}}{E_{transp}}V_2(z)\Psi^\varepsilon + V^\varepsilon\Psi^\varepsilon.$$

Combined with the definition of the parameter ε given in (4.1.10), this provides us with equation (4.1.1).

The same arguments give

$$-\varepsilon^2\Delta_x V^\varepsilon - \partial_z^2 V^\varepsilon = \frac{e^2\bar{x}^2}{\epsilon_0 E_{transp}} N \varepsilon^2 |\Psi^\varepsilon|^2.$$

Therefore, in order to avoid a trivial formal limit of the Poisson equation, we choose to work with **high densities** and set

$$N = \frac{\epsilon_0 E_{transp}}{e^2\bar{x}\bar{z}} \frac{1}{\varepsilon}.$$

This additional assumption allows us to derive the dimensionless equation (4.1.4) from the physical equations.

Remark 4.1.2. Consider now the case, studied in [3] and [21] where the authors study the transport of an electron gas that is strongly confined in the z direction. In that case, we again choose two different energy scales : a strong energy that correspond to the vertical confinement E_{conf} and a transport energy E_{transp} that is the typical energy of both transport in the x directions and self-consistent effects.

Therefore, starting with the adapted equation (4.1.7) :

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \mathbf{V}_c(\mathbf{z})\Psi + \mathbf{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z})\Psi \quad (4.1.11)$$

$$-\Delta\mathbf{V} = \frac{e}{\epsilon_0} |\Psi|^2. \quad (4.1.12)$$

and defining the same dimensionless quantities (4.1.9) and the same quotient (4.1.10), let us define the following adapted energies.

$$E_{conf} := e\bar{V}_c = \frac{\hbar^2}{2m\bar{z}^2}, \quad E_{transp} := e\bar{V} = \frac{\hbar^2}{2m\bar{x}^2} = \frac{\hbar}{t}.$$

Combining with (4.1.11),(4.1.12), (4.1.9) and (4.1.10) still leads to the following dimensionless Schrödinger-Poisson system :

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi^\varepsilon &= -\Delta_x\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} (-\partial_z^2 + V_c(z)) \psi^\varepsilon + V^\varepsilon\psi^\varepsilon \\ -\varepsilon^2\Delta_x V^\varepsilon - \partial_z^2 V^\varepsilon &= \frac{e^2\bar{x}^2}{\epsilon_0 E_{transp}} N\varepsilon^2|\psi^\varepsilon|^2. \end{aligned}$$

Here comes the main difference between what is usually called the "**hard wall potential case**", where we add Dirichlet boundary condition in the z direction, and the same system with no Dirichlet boundary conditions, usually called "**soft wall potential case**". Indeed, in [3, 21, 13], the authors choose in the soft wall potential case to work with **low densities** and set

$$N = \frac{\epsilon_0 E_{transp}}{e^2\bar{x}\bar{z}}.$$

The starting dimensionless *soft wall potential 3D Schrödinger-Poisson confined system* studied in these papers therefore reads

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi^\varepsilon &= -\Delta_x\psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} (-\partial_z^2 + V_c(z)) \psi^\varepsilon + V^\varepsilon\psi^\varepsilon \\ -\varepsilon^2\Delta_x V^\varepsilon - \partial_z^2 V^\varepsilon &= \varepsilon|\psi^\varepsilon|^2. \end{aligned}$$

4.1.3 Heuristic approach of the asymptotic model

In this section, we focus on the formal asymptotic model for the Schrödinger-Poisson system with Dirichlet conditions (4.1.1)-(4.1.5). First of all, Equation (4.1.4) allows us to expect the formal limit of the three-dimensional Poisson potential V^ε to be the solution $W(|\psi^\varepsilon|^2)$ of the following equation

$$-\partial_z^2 W(t, \cdot) = |\psi^\varepsilon(t, \cdot)|^2, \quad t \geq 0, (x, z) \in \Omega \quad (4.1.13)$$

$$W(t, x, 0) = W(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2. \quad (4.1.14)$$

In that case, $W(|\psi^\varepsilon|^2)$ is explicit and reads, for $t > 0$ and $(x, z) \in \Omega$:

$$W(|\psi^\varepsilon|^2)(t, x, z) = \int_0^1 [z(1 - z') - (z - z')\mathbf{1}_{z' \leq z}] |\psi^\varepsilon(t, x, z')|^2 dz'.$$

Let us define the following kernel, in order to simplify notations

$$\forall z, z' \in (0, 1), K(z, z') := z(1 - z') - (z - z')\mathbf{1}_{z' \leq z}$$

then, $W(|\psi^\varepsilon|^2)$ reads

$$W(|\psi^\varepsilon|^2)(t, x, z) = \int_0^1 K(z, z') |\psi^\varepsilon(t, x, z')|^2 dz'. \quad (4.1.15)$$

The first step of our work will therefore be to make precise the functional framework for the convergence of (4.1.1)-(4.1.5) towards the following model in which the former Poisson nonlinearity is replaced by its formal asymptotic $W(|\psi^\varepsilon|^2)$ defined by (4.1.13)-(4.1.14) and state such a convergence result.

Consider the following model in which the Poisson equation (4.1.4)-(4.1.5) is replaced by its formal asymptotic (4.1.13)-(4.1.14). It will be referred to as the *intermediate model* in the sequel.

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = H_x \psi^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} H_z \psi^\varepsilon + W(|\psi^\varepsilon|^2) \psi^\varepsilon, \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (4.1.16)$$

$$\psi^\varepsilon(t, x, 0) = \psi^\varepsilon(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2. \quad (4.1.17)$$

Here, H_x and H_z respectively denote the longitudinal Hamiltonian defined by :

$$H_x := -\Delta_x + V_1(x) \quad (4.1.18)$$

with domain

$$\mathcal{D}(H_x) := \{u \in H^2(\mathbb{R}^2), V_1 u \in L^2(\mathbb{R}^2)\} \quad (4.1.19)$$

and the transversal Hamiltonian defined by :

$$H_z := -\partial_z^2 + V_2(z) \text{ with homogeneous Dirichlet boundary conditions} \quad (4.1.20)$$

and with domain

$$\mathcal{D}(H_z) := \{u \in L^2(0, 1), \partial_z^2 u \in L^2(0, 1), u(0) = u(1) = 0\} = H^2 \cap H_0^1(0, 1). \quad (4.1.21)$$

Thanks to Assumption 4.1.1, $V_2(z)$ is a smooth nonnegative function, and thus, the operator H_z has a discrete spectrum. In the sequel, the collection of its eigenvalues is denoted by $E_p \geq 0$ and their associated eigenfunctions, chosen so as to form a Hilbertian basis of $\mathcal{D}(H_z)$ are denoted by $\chi_p(z)$, as p runs in \mathbb{N} . They satisfy, for any index p ,

$$H_z \chi_p = (-\partial_z^2 + V_2(z)) \chi_p = E_p \chi_p.$$

The second step consists in studying the asymptotics of this intermediate model as ε goes to zero. The probably most natural approach is to first project the Schrödinger equation (4.1.16) over the orthonormal basis $(\chi_p)_{p \geq 0}$. Its decomposition over $(\chi_p)_{p \geq 0}$ reads

$$\psi^\varepsilon(t, x, z) = \sum_{p \geq 0} \psi_p^\varepsilon(t, x) \chi_p(z) \text{ with } \psi_p^\varepsilon(t, x) = \langle \psi^\varepsilon(t, x, \cdot) \chi_p \rangle$$

where we used the notation

$$\langle f \rangle := \int_0^1 f(z) dz.$$

Now, inserting this decomposition in the Schrödinger equation (4.1.16) and formally projecting over the $(\chi_p)_{p \geq 0}$ basis leads to the following infinite system of coupled, nonlinear Schrödinger equations

$$i \partial_t \psi_p^\varepsilon = H_x \psi_p^\varepsilon + \frac{E_p}{\varepsilon^2} \psi_p^\varepsilon + \sum_{s \geq 0} \psi_s^\varepsilon \langle W(|\sum_{q \geq 0} \psi_q^\varepsilon \chi_q|^2) \chi_s \chi_p \rangle. \quad (4.1.22)$$

In view of (4.1.22), $\partial_t \psi_p^\varepsilon$ has size $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$. For this reason, it seems natural to filter out the time oscillations induced by the $\frac{E_p}{\varepsilon^2} \psi_p^\varepsilon$ term. Therefore, let ϕ_p^ε be defined as the filtered ψ_p^ε :

$$\phi_p^\varepsilon(t, x) = \exp(itE_p/\varepsilon^2) \psi_p^\varepsilon(t, x).$$

The ϕ_p^ε 's then satisfy the filtered system :

$$i \partial_t \phi_p^\varepsilon = H_x \phi_p^\varepsilon + \sum_{s \geq 0} e^{-it \frac{E_s - E_p}{\varepsilon^2}} \langle W(|\sum_{q \geq 0} e^{-i \frac{t}{\varepsilon^2} E_q} \phi_q^\varepsilon \chi_q|^2) \chi_s \chi_p \rangle \phi_s^\varepsilon. \quad (4.1.23)$$

However, according to definition (4.1.15), we have :

$$\begin{aligned} W(|\sum_{q \geq 0} e^{-i \frac{t}{\varepsilon^2} E_q} \phi_q^\varepsilon \chi_q|^2) &= W\left(\sum_{q \geq 0} \sum_{r \geq 0} e^{-it \frac{E_r - E_q}{\varepsilon^2}} \phi_r^\varepsilon \overline{\phi_q^\varepsilon} \chi_r \chi_q\right) \\ &= \sum_{q \geq 0} \sum_{r \geq 0} \langle K(z, \cdot) \chi_r \chi_q \rangle e^{-it \frac{E_r - E_q}{\varepsilon^2}} \phi_r^\varepsilon \overline{\phi_q^\varepsilon}. \end{aligned} \quad (4.1.24)$$

Finally, combining (4.1.23) with (4.1.24) allows us to conclude under nice regularity assumptions, and provided the series at hand in (4.1.24) converge, that the ϕ_p^ε satisfy the following infinite system

$$\forall p \geq 0, \quad i \partial_t \phi_p^\varepsilon = H_x \phi_p^\varepsilon + \sum_{s \geq 0} \sum_{q \geq 0} \sum_{r \geq 0} \alpha_{p,q,r,s} e^{it(E_p + E_q - E_r - E_s)/\varepsilon^2} \phi_r^\varepsilon \overline{\phi_q^\varepsilon} \phi_s^\varepsilon \quad (4.1.25)$$

$$\phi_p^\varepsilon(0, x) = \psi_{0,p} := \langle \psi_0(x, \cdot) \chi_p \rangle \quad (4.1.26)$$

where

$$\forall p, q, r, s \geq 0, \quad \alpha_{p,q,r,s} := \int_0^1 \int_0^1 K(z, z') \chi_r(z') \chi_q(z') \chi_s(z) \chi_p(z) dz dz'. \quad (4.1.27)$$

Now that each $\partial_t \phi_p^\varepsilon$ is of order $\mathcal{O}(1)$, notice that the infinite system of coupled nonlinear Schrödinger equation satisfied by the ϕ_p^ε 's ($p \in \mathbb{N}$) is of form :

$$\partial_t u^\varepsilon = Au^\varepsilon + B(t/\varepsilon^2, u^\varepsilon), \quad (4.1.28)$$

where the nonlinearity B happens to have some kind of periodicity in time due to the oscillatory $e^{it(E_p+E_q-E_r-E_s)/\varepsilon^2}$ factor. More precisely, as we will see in the following parts, the nonlinearity is *almost periodic* in time.

It now becomes quite tempting to average in time Equation (4.1.23) or, equivalently the toy model (4.1.28). Here, we use a key tool developed in [1], adapted from the well detailed work on the ODE's in [23] and from Schochet's work [24]. Assume that the function $B(\tau, u)$ entering in (4.1.28) possesses some ergodicity in time, i.e that one can define, in a functional framework we have to make precise later, the limit

$$B_{av}(u) = \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T B(\tau, u) d\tau.$$

Then, the toy-system (4.1.28) converges, as ε goes to zero towards the following limit system :

$$\partial_t u = Au + B_{av}(u). \quad (4.1.29)$$

For these reasons, and despite the differential system satisfied by the ϕ_p^ε 's is infinite, we can expect the ϕ_p^ε 's solving (4.1.23) to converge at least formally towards the solution of the following infinite averaged system :

$$i\partial_t \phi_p = H_x \phi_p + \sum_{(q,r,s) \in \Lambda_p} \alpha_{p,q,r,s} \phi_r \overline{\phi_q} \phi_s, \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (4.1.30)$$

$$\phi_p(0, x) = \langle \psi_0(x, \cdot) \chi_p \rangle, \quad x \in \mathbb{R}^2 \quad (4.1.31)$$

where

$$\forall p \geq 0, \Lambda_p := \{(q, r, s) \in \mathbb{N}^3, E_p + E_q = E_r + E_s\}. \quad (4.1.32)$$

This paper therefore aims at rigorously proving the convergence towards (4.1.30) in an appropriate framework.

Remark 4.1.3. Re-consider now the case where no Dirichlet conditions are imposed, referred to as the "soft wall potential case", in Remark (4.1.2) and where the Poisson equation is given upon the whole space \mathbb{R}^3 by :

$$\left(-\Delta_x - \frac{1}{\varepsilon^2} \partial_z^2 \right) V^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} |\psi^\varepsilon|^2, \quad (x, z) \in \mathbb{R}^3.$$

Its solution V^ε can be written with a convolution as

$$V^\varepsilon := \frac{1}{4\pi \sqrt{|x|^2 + \varepsilon^2 z^2}} * |\psi^\varepsilon|^2.$$

The asymptotic of the Poisson potential is thus given by :

$$V^\varepsilon(t, x, z) \sim \frac{1}{4\pi|x|} * |\psi^\varepsilon(t, x, z)|^2 = \frac{1}{4\pi|x|} *_x \left(\int_{\mathbb{R}} |\psi^\varepsilon(t, \cdot, z')|^2 dz' \right)$$

(the reader can refer to [13] for more information). Therefore, in the "soft wall potential case", the asymptotic of the Poisson potential does not depend on z . Note that, on the contrary, in our "hard wall potential case" the nonlinearity $W(|\psi^\varepsilon|^2)$ defined by (4.1.15) obviously depends on z . This dependence in z is crucial as it radically changes the nature of the analysis at hand in our work. Indeed, it induces fast oscillating in time terms that will not be dealt with as easily as previously.

4.1.4 Statement of the main results and sketch of the proof

Let us add the following technical assumptions on the longitudinal confinement potential $V_1(x)$:

Assumption 4.1.4.

$$\begin{aligned} \forall \alpha \in \mathbb{N}^2, \quad & \frac{\partial^\alpha V_1}{\partial x^\alpha}(x) = \mathcal{O}(V_1(x)) \quad \text{as } |x| \rightarrow \infty \\ \exists M_x > 0, \quad & V_1(x) = \mathcal{O}(|x|^{M_x}) \quad \text{as } |x| \rightarrow \infty \\ \exists M'_x > 0, \quad & \frac{|\nabla_x V_1(x)|}{V_1(x)} = \mathcal{O}(|x|^{-M'_x}) \quad \text{as } |x| \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Note that these assumptions are purely technical helps in order to carry out a functional analysis, inspired by [1], that will help us identifying the Sobolev spaces well-adapted to our operators H_x and H_z .

Theorem 4.1.5. *Convergence towards the asymptotic model.*

Under Assumption 4.1.1 and Assumption 4.1.4, fix $\varepsilon > 0$ and consider a function $\psi_0(x, z)$ in

$$\mathcal{X} := \{u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega), V_1 u \in L^2(\Omega)\} \quad (4.1.33)$$

equipped with the norm :

$$\|u\|_{\mathcal{X}}^2 := \|u\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|V_1 u\|_{L^2(\Omega)}^2. \quad (4.1.34)$$

Then, there exists $T > 0$ depending only on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$ such that the following holds.

- *The initial Schrödinger-Poisson system (4.1.1)-(4.1.5) with initial datum ψ_0 possess a unique solution denoted by $(\psi^\varepsilon, V^\varepsilon)$, that is bounded in $\mathcal{C}([0, T], \mathcal{X})$ uniformly in ε .*
- *The asymptotic system (4.1.30)-(4.1.31) with initial datum ψ_0 admits a unique solution denoted by the set of functions $(\phi_p)_{p \geq 0} \in \mathcal{C}([0, T], \mathcal{D}(H_x))$ where $\mathcal{D}(H_x)$ is defined by (4.1.19).*

– If ψ^ε and $(\phi_p)_{p \geq 0}$ denote the respective solutions to (4.1.1)-(4.1.5) and (4.1.30)-(4.1.31), then the following convergence holds :

$$\left\| \psi^\varepsilon(t, x, z) - \sum_{p \geq 0} \phi_p(t, x) e^{-itE_p/\varepsilon^2} \chi_p(z) \right\|_{\mathcal{C}([0, T], \mathcal{X})} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (4.1.35)$$

Sketch of the proof. The present paper is devoted to rigorously proving the convergence of (4.1.1)-(4.1.5) towards (4.1.30)-(4.1.31) with given initial data, in three steps. As a first step, we follow the ideas already used in [2] in the case of a Schrödinger-Poisson equation with a confinement potential that models the 2 dimensional confinement in a nanowire, and in [13] in the case of a strongly confined bidimensional electron gas under a strong magnetic field. The first key tool is a refined analysis of the rescaled Poisson potential, defined in (4.1.4),(4.1.5) and its asymptotics. First, we prove tame estimates for both nonlinearities V^ε and W respectively defined by (4.1.4)-(4.1.5) and (4.1.13)-(4.1.14). These estimates allow us to study the well-posedness and regularity of solutions to both initial (4.1.1)-(4.1.5) and intermediate (4.1.16),(4.1.17),(4.1.13),(4.1.14) models (see 4.2.4). Then, we rewrite (4.1.1) as a perturbation of (4.1.16) by re-writing $V^\varepsilon(t, x, z)$ as a perturbation of W and estimating the remainder $V^\varepsilon - W$ as ε goes to zero.

As a second step, we prove the convergence of the solution of the intermediate system towards the function $\sum_p \phi_p e^{-itE_p/\varepsilon^2} \chi_p$ where the $(\phi_p)_{p \geq 0}$ solve (4.1.30)-(4.1.31). The difficulty of making the heuristic arguments rigorous is twofold. First, it requires to decompose ψ^ε over the χ_p 's and therefore to write down series expansion of form $\sum_p \dots$ as in (4.1.23),(4.1.24) or (4.1.25). However, it happens to be very difficult to control the convergence of these series expansions, even when nice estimates on the ψ_p^ε 's are at hand. This is due to the lack of information on the behavior of the term $\langle W(|\psi^\varepsilon|^2) \chi_r, \chi_p \rangle$ for large values of p and r . Secondly, independently of the Schrödinger equation, when proving the convergence of systems of form (4.1.28) towards (4.1.29), one usually needs *small denominator estimates* which turn out to be very difficult to handle with in the present context. Here, in order to avoid having to deal with small denominator estimates, we follow the same lines as is done in [1] in the case of a general nonlinear Schrödinger equation with a nonlinearity of form $F(u)$ where F is a \mathcal{C}^∞ function. To sum up, the first idea is to filter out the time-oscillations in (4.1.16) by defining

$$\phi^\varepsilon(t, x, z) := e^{itH_z/\varepsilon^2} \psi^\varepsilon(t, x, z). \quad (4.1.36)$$

It now satisfies

$$i\partial_t \phi^\varepsilon = H_x \phi^\varepsilon + e^{itH_z/\varepsilon^2} V \left(|e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon|^2 \right) e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi^\varepsilon. \quad (4.1.37)$$

Then, introducing the nonlinearity

$$\tau \geq 0 \mapsto G(\tau, u) := e^{i\tau H_z} W \left(|e^{-i\tau H_z} u|^2 \right) e^{-i\tau H_z} u, \quad (4.1.38)$$

equation (4.1.37) can therefore be approached, thanks to the first step by

$$i\partial_t\phi^\varepsilon = H_x\phi^\varepsilon + G\left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon\right) \quad (4.1.39)$$

which is of form (4.1.28). The key point is therefore to define a functional framework, say a functional space Z such that if $u \in Z$, then the to-be-averaged function $G(\tau, u)$ is *almost-periodic in time with values in Z* . This roughly means that $G(\tau, u)$ has *comptably many frequencies in τ* , which in fact translates the fact that H_z has a discrete spectrum. Indeed, the only oscillation terms that appear in the definition of $G(\tau, u)$ are due to the propagator $e^{\pm i\tau H_z}$. The important fact about almost-periodic functions is that they possess a *well-defined long time average*, and the formula

$$G_{av}(u) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T G(\tau, u) d\tau$$

makes sense in appropriate functionnal spaces. Section 4.3 is therefore devoted to the time-averaging of equation (4.1.39). In order to carry out the time-averaging procedure, we prove that we are dealing with almost-periodic nonlinearities (hence the possibility of defining long-time averages), with values in good Sobolev spaces (spaces that are adapted to our operators and allow us to carry out the nonlinear analysis). These spaces are defined in subsection 4.2.1, and the properties of almost periodicity of our nonlinearities are proved in Proposition 4.3.4. The time-averaging process leads to the convergence Proposition 4.3.6. In this proposition, we prove the convergence result (4.1.35) for an initial datum that lies in a regularized space denoted by \mathcal{Y} .

As a third step, section 4.4 is devoted to gathering the results of both first and second step. In this section, we therefore state a convergence result in \mathcal{X} of the initial system towards the limit one in Proposition 4.4.1 with an initial datum in the regularized space \mathcal{Y} . The second part of section 4.4 therefore consists in a regularizing procedure that finally ends the proof of the main theorem.

4.2 Approximation by the intermediate system

In this section, we focus our study on the first step, which is the convergence of the initial system (4.1.1)-(4.1.5) towards the intermediate system (4.1.16)(4.1.17)-(4.1.13)-(4.1.14). We first introduce a functional framework that is well-adapted to the operators H_x and H_z in order to deal with both nonlinearities $V^\varepsilon(|\psi^\varepsilon|^2)$ and $W(|\psi^\varepsilon|^2)$ defined by (4.1.4)-(4.1.5) and (4.1.13)(4.1.14) respectively. Then, Lemma 4.2.4 states regularity results for a general equation that allow us to prove tame estimates on both nonlinearities in Corollary 4.2.5. Finally, Proposition 4.2.6 proves the convergence of the initial system (4.1.1)-(4.1.2)-(4.1.4)-(4.1.5) towards the intermediate system (4.1.16)-(4.1.17).

4.2.1 Preliminaries : the functional framework

In this section, we identify the Sobolev spaces adapted to the operators H_x and H_z . More specifically, we identify the norm

$$\|u\|_{\mathfrak{X}}^2 \sim \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_x u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_z u\|_{L^2(\Omega)}^2$$

whenever u is smooth enough.

Moreover, we also define a regularization space that we denote \mathfrak{Y} , and, in that view, we also identify the norm

$$\|u\|_{\mathfrak{Y}}^2 := \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_x u\|_{\mathfrak{X}}^2 + \|H_z^{1+\alpha/2} u\|_{L^2(\Omega)}^2$$

where $\alpha \in \mathbb{R}$, such that $0 < \alpha < \frac{1}{2}$.

The identification of both norms $\|u\|_{\mathfrak{X}}$ and $\|u\|_{\mathfrak{Y}}$ may be technically delicate, yet, it is absolutely crucial in our work. Indeed, the only uniform-in- ε bound at hand on ψ^ε , solution to (4.1.1)-(4.1.5) reads :

$$\|\psi^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_x \psi^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_z \psi^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 = \mathcal{O}(1)$$

on some non-trivial time interval $[0, t]$ whenever the initial datum belongs to \mathfrak{X} . All other energy estimates, (obtained by simply applying the operators $\partial_z, \nabla_x, V_1(x)$ or $V_2(z)$ to equation (4.1.1)-(4.1.5) and integrating by part) give rise to commutators, hence diverging factors of order $\mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon^2})$ due to the term $\frac{1}{\varepsilon^2} H_z$. Therefore, as they only give access to bounds of order $\mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$, they are barely useless here.

In order to identify these spaces, we refer the reader to the work done in [1]. In this paper, the authors identify the Sobolev scale adapted to their own operators that are $-\Delta_x + V_1(x)$ with domain $\{u \in L^2(\mathbb{R}^2), -\Delta_x u \in L^2(\mathbb{R}^3), V_1 u \in L^2(\mathbb{R}^2)\}$, and $-\partial_z^2 + V_2$ with domain $\{u \in L^2(\mathbb{R}), \partial_z^2 u \in L^2(\mathbb{R}), V_2 u \in L^2(\mathbb{R})\}$. The only difference with our situation is therefore the fact that the transverse operator acts on $L^2(\mathbb{R})$, instead of $L^2(0, 1)$ with boundary Dirichlet conditions. The key tool they use is the Weyl-Hörmander calculus, and, following the same arguments, we can state the following lemma :

Lemma 4.2.1. [Equivalence of norms]

For all $u \in \mathfrak{X}$, where $(\mathfrak{X}, \|\cdot\|_{\mathfrak{X}})$ is defined in (4.1.33)-(4.1.34), if $u = \sum_p u_p \chi_p$ with $u_p(x) := \int_0^1 u(x, z) \chi_p(z) dz$, the following equivalence holds :

$$\|u\|_{\mathfrak{X}}^2 \sim \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_x u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_z u\|_{L^2(\Omega)}^2 \tag{4.2.1}$$

$$= \sum_{p \geq 0} (1 + E_p^2) \|u_p\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 + \|H_x u\|_{L^2(\Omega)}^2. \tag{4.2.2}$$

Moreover, fix $0 < \alpha < \frac{1}{2}$ and define

$$\mathfrak{Y} := \{u \in H_0^1(\Omega), H_x u \in \mathfrak{X}, H_z^{1+\alpha/2} u \in L^2(\Omega)\}$$

then, for all $u \in \mathcal{Y}$, if $u = \sum_{p \geq 0} u_p \chi_p$ with $u_p(x) = \int_0^1 u(x, z) \chi_p(z) dz$, then the following equivalence holds :

$$\|u\|_{\mathcal{Y}}^2 := \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_x u\|_{\mathcal{X}}^2 + \|H_z^{1+\alpha/2} u\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad (4.2.3)$$

$$= \sum_{p \geq 0} (1 + E_p^{2+\alpha}) \|u_p\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 + \|H_x u\|_{\mathcal{X}}^2 \quad (4.2.4)$$

$$\sim \|u\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|\Delta_x u\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|V_1^2 u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{p \geq 0} E_p^{2+\alpha} \|u_p\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \quad (4.2.5)$$

$$\sim \|u\|_{H^{2+\alpha}(\Omega)}^2 + \|H_x u\|_{\mathcal{X}}^2. \quad (4.2.6)$$

Proof. This lemma can be proved by combining Proposition 2.5 in [1] in order to prove the following equivalence :

$$H_x u \in L^2(\Omega) \text{ if and only if } \|u\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|V_1 u\|_{L^2(\Omega)}^2$$

and the following result that can be found in [17] or [18] :

$$\text{if } 0 < \alpha < \frac{1}{2}, \text{ (} u \in H_0^1(\Omega) \text{ and } H_z^{1+\alpha/2} u \in L^2(\Omega) \text{)} \iff \sum_{p \geq 0} E_p^{2+\alpha} \|u_p\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 < \infty.$$

□

Lemma 4.2.2. [Properties of the Sobolev spaces \mathcal{X} and \mathcal{Y}]

For any fixed $0 < \alpha < \frac{1}{2}$, \mathcal{X} and \mathcal{Y} are continuously injected in $L^\infty(\Omega)$. Moreover, \mathcal{X} and \mathcal{Y} are algebras, and the embedding $\mathcal{Y} \subset \mathcal{X}$ is compact.

Proof. The fact that \mathcal{X} and \mathcal{Y} are continuously injected in $L^\infty(\Omega)$ readily comes from the fact that they are continuously embedded in $H^2(\Omega)$ that is continuously embedded in $L^\infty(\Omega)$.

Secondly, it is clear that $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ is an algebra. Therefore, \mathcal{X} clearly is an algebra too according to definition (4.1.33). As far as \mathcal{Y} is concerned, take $u, v \in \mathcal{Y}$, then, $uv \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, $V_1^2 uv \in L^2(\Omega)$ since $V_1^2 u \in L^2(\Omega)$ and $\mathcal{Y} \subset L^\infty(\Omega)$ with continuous embedding. The same arguments allows us to prove that, if

$$uv = \sum_{p \geq 0} (uv)_p \chi_p, \quad \text{with } (uv)_p := \int_0^1 u(x, z) v(x, z) \chi_p(z) dz$$

then,

$$\begin{aligned} \sum_{p \geq 0} E_p^{2+\alpha} \|(uv)_p\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 &\leq \|u\|_{L^\infty}^2 \sum_{p \geq 0} E_p^{2+\alpha} \|v_p\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \\ &\leq C \|u\|_{\mathcal{Y}}^2 \|v\|_{\mathcal{Y}}^2. \end{aligned}$$

In order to prove that $uv \in \mathcal{Y}$, we need to prove that $\Delta_x(uv) \in \mathcal{Y}$. In that view, let us write

$$\Delta_x(uv) = (\Delta_x u)v + u(\Delta_x v) + 2 \nabla_x u \cdot \nabla_x v.$$

However, $\Delta_x u \in H^2(\Omega)$ and $v \in H^2(\Omega)$, therefore,

$$(\Delta_x u)v \in H^2(\Omega) \text{ and } \|(\Delta_x u)v\|_{H^2(\Omega)} \leq \|u\|_{\mathcal{Y}}^2 \|v\|_{\mathcal{Y}}^2.$$

Similarly, $u(\Delta_x v) \in H^2(\Omega)$. Finally, as $uv \in \mathcal{Y}$, then

$$\nabla_x u, \nabla_x v \in H^2(\Omega) \text{ and } \|\nabla_x u \cdot \nabla_x v\|_{H^2(\Omega)}^2 \leq 2\|u\|_{\mathcal{Y}}^2 \|v\|_{\mathcal{Y}}^2.$$

Consequently,

$$\Delta_x(uv) \in H^2(\Omega), \quad \|\Delta_x(uv)\|_{H^2(\Omega)} \leq C\|u\|_{\mathcal{Y}}\|v\|_{\mathcal{Y}}$$

where $C > 0$ does not depend on u or v . To conclude, the spaces \mathcal{X} and \mathcal{Y} are both algebras and we have :

$$\begin{aligned} \forall u, v \in \mathcal{X} \quad \|uv\|_{\mathcal{X}} &\leq C\|u\|_{\mathcal{X}}\|v\|_{\mathcal{X}} \\ \forall u, v \in \mathcal{Y}, \quad \|uv\|_{\mathcal{Y}} &\leq C\|u\|_{\mathcal{Y}}\|v\|_{\mathcal{Y}} \end{aligned}$$

where $C > 0$ does not depend on u and v .

Finally, we clearly have the embedding $\mathcal{Y} \subset \mathcal{X}$. Its compactness is due to the fact that the embedding $H^{2+\alpha}(\Omega) \cap H_0^1(\Omega) \subset H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ is locally compact since $2 < 2 + \alpha < \frac{5}{2}$ together with the fact that $V_1(x)$ goes to infinity at infinity. \square

We end this section by the following lemma :

Lemma 4.2.3.

$$\forall u \in \mathcal{Y}, \quad \|\nabla_x u\|_{\mathcal{X}}^2 \leq C\|u\|_{\mathcal{X}}\|u\|_{\mathcal{Y}}.$$

Proof. In order to prove this estimate, let us consider $u \in \mathcal{Y}$. Then,

$$\|\nabla_x u\|_{\mathcal{X}}^2 \leq \|H_x^{1/2}u\|_{\mathcal{X}}^2 := \|H_x^{1/2}u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_x^{3/2}u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|H_z H_x^{1/2}u\|_{L^2(\Omega)}^2. \quad (4.2.7)$$

However,

$$\begin{aligned} \|H_x^{1/2}u\|_{L^2(\Omega)}^2 &:= \langle H_x^{1/2}u, H_x^{1/2}u \rangle_{L^2(\Omega)} = |\langle H_x u, u \rangle_{L^2(\Omega)}| \\ &\leq \|H_x u\|_{L^2(\Omega)} \|u\|_{L^2(\Omega)} \leq C\|u\|_{\mathcal{X}}^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|H_x^{3/2}u\|_{L^2(\Omega)}^2 &:= \langle H_x^{3/2}u, H_x^{3/2}u \rangle_{L^2(\Omega)} = |\langle H_x^2 u, H_x u \rangle_{L^2(\Omega)}| \\ &\leq \|H_x^2 u\|_{L^2(\Omega)} \|H_x u\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u\|_{\mathcal{Y}} \|u\|_{\mathcal{X}} \end{aligned}$$

and, finally, using the fact that both operators H_x and H_z commute, we get :

$$\begin{aligned} \|H_z H_x^{1/2}u\|_{L^2(\Omega)}^2 &:= \langle H_z H_x^{1/2}u, H_z H_x^{1/2}u \rangle_{L^2(\Omega)} = |\langle H_x H_z u, H_z u \rangle_{L^2(\Omega)}| \\ &\leq \|H_z H_x u\|_{L^2(\Omega)} \|H_z u\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u\|_{\mathcal{Y}} \|u\|_{\mathcal{X}} \end{aligned}$$

which, combined with (4.2.7) allows us to conclude. \square

4.2.2 A priori estimates

In this subsection, we state a priori estimates on both nonlinearities V^ε and W defined in (4.1.4)-(4.1.5) and (4.1.13)-(4.1.14) respectively. In that view, we state the following regularity result.

Lemma 4.2.4. *Consider any real number $\varepsilon \in [0, 1]$, any function $f \in \mathcal{X}$. Then, the following system*

$$-\partial_z^2 u^\varepsilon - \varepsilon^2 \Delta_x u^\varepsilon = f \quad (x, z) \in \Omega, \quad (4.2.8)$$

$$u^\varepsilon(x, 0) = u^\varepsilon(x, 1) = 0 \quad x \in \mathbb{R}^2. \quad (4.2.9)$$

admits a unique solution u^ε and the following holds :

$$\|u^\varepsilon\|_X \leq C \|f\|_X, \quad (4.2.10)$$

$$\|\partial_z^2 u^\varepsilon\|_X \leq C \|f\|_X. \quad (4.2.11)$$

To be more readable, the proof of this lemma is postponed to Appendix (4.A).

Corollary 4.2.5. *Let $\varepsilon \in [0, 1]$, and define the nonlinearity $F^\varepsilon(u)$ as either $V^\varepsilon(|u|^2)$ or $W(|u|^2)$. Then, the following holds :*

$$\forall u \in \mathcal{X}, \|F^\varepsilon(u)\|_X \leq C \|u\|_X^2 \quad (4.2.12)$$

$$\forall u \in \mathcal{X}, \|F^\varepsilon(u)u\|_X \leq C \|u\|_X^3 \quad (4.2.13)$$

$$\forall u, v \in \mathcal{X}, \|F^\varepsilon(u)u - F^\varepsilon(v)v\|_X \leq C (\|u\|_X^2 + \|v\|_X^2) \|u - v\|_X. \quad (4.2.14)$$

Moreover :

$$\forall u \in \mathcal{Y}, \|W(|u|^2)\|_Y \leq C \|u\|_Y \|u\|_X \quad (4.2.15)$$

$$\forall u, v \in \mathcal{Y}, \|W(uv)\|_Y \leq C \|u\|_Y \|v\|_Y \quad (4.2.16)$$

$$\forall u \in \mathcal{Y}, \|W(|u|^2)u\|_Y \leq C \|u\|_X^2 \|u\|_Y \quad (4.2.17)$$

$$\forall u, v \in \mathcal{Y}, \|W(|u|^2)u - W(|v|^2)v\|_Y \leq C (\|u\|_Y^2 + \|v\|_Y^2) \|u - v\|_Y. \quad (4.2.18)$$

Proof of Corollary 4.2.5 In order to prove the first part of Corollary 4.2.5, we fix $\varepsilon \geq 0$, $u \in \mathcal{X}$, and we apply Lemma 4.2.4 to the nonlinearity $F^\varepsilon(u)$. Indeed, $V^\varepsilon(|u|^2)$ and $W(|u|^2)$ solve the system (4.2.8)-(4.2.9) for $f = u$, $\varepsilon = 1$ and $\varepsilon = 0$ respectively. We therefore get :

$$\|F^\varepsilon(u)\|_X \leq C \| |u|^2 \|_X \leq C \|u\|_X^2$$

and

$$\|F^\varepsilon(u)u\|_X \leq C \|u\|_X^3$$

where we used the fact that \mathcal{X} is an algebra. Estimates (4.2.12) and (4.2.13) are proved.

As far as the estimate (4.2.14) is concerned, first note that, if $u, v \in \mathcal{X}$,

$$F^\varepsilon(u)u - F^\varepsilon(v)v = (F^\varepsilon(u) - F^\varepsilon(v))u + F^\varepsilon(v)(v - u). \quad (4.2.19)$$

Moreover, $F^\varepsilon(u) - F^\varepsilon(v)$ readily satisfies the following system :

$$\begin{aligned} -\partial_z^2(F^\varepsilon(u) - F^\varepsilon(v)) - \varepsilon^2 \Delta_x(F^\varepsilon(u) - F^\varepsilon(v)) &= |u|^2 - |v|^2, \\ (F^\varepsilon(u) - F^\varepsilon(v))(x, 0) &= (F^\varepsilon(u) - F^\varepsilon(v))(x, 1) = 0 \end{aligned}$$

Therefore, applying Lemma 4.2.4 yields :

$$\begin{aligned} \|F^\varepsilon(u) - F^\varepsilon(v)\|_{\mathcal{X}} &\leq C\||u|^2 - |v|^2\|_{\mathcal{X}} \leq C\|(|u| + |v|)(|u| - |v|)\|_{\mathcal{X}} \\ &\leq C(\|u\|_{\mathcal{X}} + \|v\|_{\mathcal{X}})\|u - v\|_{\mathcal{X}}. \end{aligned} \quad (4.2.20)$$

Combining (4.2.19) and (4.2.20) with (4.2.12) finally provides us with estimate (4.2.14).

In order to prove the second part of the corollary, let us consider $u \in \mathcal{Y}$. We have already proved that

$$\|W(|u|^2)u\|_{\mathcal{X}} \leq C\|u\|_{\mathcal{X}}^3. \quad (4.2.21)$$

Applying operator H_x to equation (4.1.13)-(4.1.14) gives :

$$\begin{aligned} -\partial_z^2 H_x(W(|u|^2)) &= H_x(|u|^2), \quad (x, z) \in \Omega \\ H_x(W(|u|^2))(x, 0) &= H_x(W(|u|^2))(x, 1) = 0 \end{aligned}$$

Therefore, applying Lemma 4.2.4 gives :

$$\|H_x(W(|u|^2))\|_{\mathcal{X}} \leq C\|H_x(|u|^2)\|_{\mathcal{X}} \leq C\|u\|_{\mathcal{Y}}\|u\|_{\mathcal{X}} \quad (4.2.22)$$

where we finally used Lemma 4.2.3. Now, note that

$$H_z(W(|u|^2)) = -\partial_z^2 W(|u|^2) + V_2 W(|u|^2) = |u|^2 + V_2 W(|u|^2) \in \mathcal{X}.$$

Moreover, we readily have :

$$\|H_z^2(W(|u|^2))\|_{L^2(\Omega)} \leq \|H_z(W(|u|^2))\|_{\mathcal{X}}$$

which, applying the estimate (4.2.11) of Lemma 4.2.4 leads to :

$$\|H_z^2(W(|u|^2))\|_{L^2(\Omega)} \leq C\|W(|u|^2)\|_{\mathcal{X}} + C\|\partial_z^2(W(|u|^2))\|_{\mathcal{X}} \leq C\|u\|_{\mathcal{X}}^2. \quad (4.2.23)$$

Now, define

$$W(|u|^2)_p(x) = \langle W(|u|^2)(x, \cdot) \chi_p \rangle,$$

definition (4.2.4) gives :

$$\begin{aligned} \|H_z^{1+\alpha/2}(W(|u|^2))\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \sum_{p \geq 0} E_p^{2+\alpha} \|W(|u|^2)_p\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq \left(\sum_{p \geq 0} E_p^4 \|W(|u|^2)_p\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2} \times \left(\sum_{p \geq 0} E_p^{2\alpha} \|W(|u|^2)_p\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \|H_z^2(W(|u|^2))\|_{L^2(\Omega)} \times \left(\sum_{p \geq 0} E_p^2 \|W(|u|^2)_p\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2} \\ &\leq C\|u\|_{\mathcal{X}}^2 \|H_z(W(|u|^2))\|_{L^2(\Omega)} \leq C\|u\|_{\mathcal{X}}^4 \end{aligned}$$

where we used (4.2.23), the fact that $\alpha < 1/2$ and that E_p is increasing and goes to infinity with p . Finally :

$$\|H_z^{1+\alpha/2}(W(|u|^2))\|_{L^2(\Omega)} \leq C\|u\|_X^2. \quad (4.2.24)$$

Combining (4.2.21) with (4.2.22) and (4.2.24) finally provides us with the following tame estimate, according to (4.2.3) :

$$\forall u \in \mathcal{Y}, \|W(|u|^2)\|_{\mathcal{Y}} \leq C\|u\|_{\mathcal{Y}}\|u\|_X$$

where $C > 0$ does not depend on u . Following the exact same lines, (4.2.16) can also easily be proved. Now, let us consider any function $u \in \mathcal{Y}$ and prove estimate (4.2.17) thanks to the equivalence (4.2.6). First, we know that :

$$\begin{aligned} \|W(|u|^2)u\|_{H^{2+\alpha}(\Omega)} &\leq \|W(|u|^2)\|_{H^{2+\alpha}(\Omega)}\|u\|_{L^\infty(\Omega)} + \|u\|_{H^{2+\alpha}(\Omega)}\|W(|u|^2)\|_{L^\infty(\Omega)} \\ &\leq \|W(|u|^2)\|_{\mathcal{Y}}\|u\|_X + \|u\|_{\mathcal{Y}}\|W(|u|^2)\|_X \end{aligned}$$

where we used the continuous embeddings $\mathcal{X} \subset L^\infty(\Omega)$ and $\mathcal{Y} \subset H^{2+\alpha}(\Omega)$. Applying (4.2.15) and (4.2.12) gives :

$$\|W(|u|^2)u\|_{H^{2+\alpha}(\Omega)} \leq C\|u\|_X^2\|u\|_{\mathcal{Y}}. \quad (4.2.25)$$

As far as the norm $H_x(W(|u|^2)u)$ is concerned, we readily have :

$$H_x(W(|u|^2)u) = H_x(W(|u|^2))u - W(|u|^2)\Delta_x u - 2\nabla_x(W(|u|^2)) \cdot \nabla_x u. \quad (4.2.26)$$

However, since \mathcal{X} is an algebra,

$$\begin{aligned} \|H_x(W(|u|^2))u\|_X &\leq C\|H_x(W(|u|^2))\|_X\|u\|_X \\ &\leq C\|u\|_{\mathcal{Y}}\|u\|_X^2 \end{aligned} \quad (4.2.27)$$

where we used (4.2.17) and the equivalence (4.2.6).

Moreover,

$$\begin{aligned} \|W(|u|^2)\Delta_x u\|_X &\leq C\|W(|u|^2)\|_X\|\Delta_x u\|_X \\ &\leq C\|u\|_{\mathcal{Y}}\|u\|_X^2 \end{aligned} \quad (4.2.28)$$

where we used (4.2.12), and the equivalence (4.2.6). Finally,

$$\nabla_x(W(|u|^2)) \cdot \nabla_x u = \sum_{i=1}^2 \partial_i(W(|u|^2))u + W(|u|^2)\partial_i u. \quad (4.2.29)$$

Fix $i \in \{1, 2\}$, we readily have

$$\partial_i(W(|u|^2)) = W(\partial_i(|u|^2))$$

and, applying Lemma 4.2.4 with $f = \partial_1(|u|^2)$ and $\varepsilon = 0$ yields

$$\|W(\partial_i(|u|^2))\|_X \leq C\|\partial_i(|u|^2)\|_X.$$

Therefore, combined with (4.2.29), this leads to

$$\|\nabla_x(W(|u|^2)) \cdot \nabla_x u\|_X \leq C \sum_{i=1}^2 \|\partial_i(|u|^2)\|_X \|\partial_i u\|_X \leq C \sum_{i=1}^2 \|\partial_i u\|_X^2 \|u\|_X. \quad (4.2.30)$$

Applying Lemma 4.2.3, combined with (4.2.30) allows us to conclude that

$$\|\nabla_x(W(|u|^2)) \cdot \nabla_x u\|_X \leq C\|u\|_X^2 \|u\|_Y. \quad (4.2.31)$$

Finally, combining (4.2.31) with (4.2.26), (4.2.27) and (4.2.28) yields

$$\|H_x(W(|u|^2)u)\|_X \leq C\|u\|_X^2 \|u\|_Y,$$

which, combined with (4.2.25) and the equivalence (4.2.6) concludes the proof of (4.2.17). Estimates (4.2.15) and (4.2.17) are now proved. As far as (4.2.18) is concerned, we write :

$$W(|u|^2)u - W(|v|^2)v = (W(|u|^2) - W(|v|^2))u + W(|v|^2)(u - v).$$

Then, as \mathcal{Y} is an algebra, then

$$\begin{aligned} \|W(|u|^2)u - W(|v|^2)v\|_Y &\leq \|W(|u|^2) - W(|v|^2)\|_Y \|u\|_Y + \|W(|v|^2)\|_Y \|u - v\|_Y \\ &\leq \|W(|u| + |v|)\|_Y \|u - v\|_Y + \|W(|v|^2)\|_Y \|u - v\|_Y \\ &\leq C(\|u\|_Y + \|v\|_Y) \|u - v\|_Y + C\|v\|_X \|v\|_Y \|u - v\|_Y \end{aligned}$$

where we used (4.2.16) and (4.2.15). Therefore, we get

$$\|W(|u|^2)u - W(|v|^2)v\|_Y \leq C(\|u\|_Y^2 + \|v\|_Y^2) \|u - v\|_Y$$

which ends the proof of (4.2.18) □

Now that we have obtained a priori estimates on both V^ε and W nonlinearities, we focus on the existence and uniqueness results for both initial (4.1.1)-(4.1.2)-(4.1.4)-(4.1.5) and intermediate system (4.1.16)-(4.1.17)-(4.1.13)-(4.1.14).

4.2.3 Convergence towards the intermediate system

Proposition 4.2.6. *Let $\varepsilon > 0$ be fixed and consider two initial data $\psi_0 \in \mathcal{X}$ and $\widetilde{\psi}_0 \in \mathcal{Z}$ where \mathcal{Z} denotes either \mathcal{X} or \mathcal{Y} .*

Then, there exists a common $T_0 > 0$ depending only on $\|\psi_0\|_X$ and $\|\widetilde{\psi}_0\|_X$ such that both initial Schrödinger-Poisson system (4.1.1)-(4.1.2)-(4.1.4)-(4.1.5) with initial datum ψ_0 and intermediate system (4.1.16)-(4.1.17)-(4.1.13)-(4.1.14) with initial

datum $\widetilde{\psi}_0$ possess unique solutions respectively denoted by $\psi^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})$ and $\widetilde{\psi}^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{Z})$.

Moreover, there exists a common bound $M > 0$ depending only on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$ and $\|\widetilde{\psi}_0\|_{\mathcal{Z}}$ such that

$$\sup_{0 < \varepsilon < 1} \left(\|\psi^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})}, \|\widetilde{\psi}^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{Z})} \right) \leq M \quad (4.2.32)$$

Besides, if $\widetilde{\psi}_0 \in \mathcal{Y}$, then, the following holds :

$$\forall t \in [0, T_0], \left\| \psi^\varepsilon(t, \cdot) - \widetilde{\psi}^\varepsilon(t, \cdot) \right\|_{\mathcal{X}} \leq C \left(\|\psi_0 - \widetilde{\psi}_0\|_{\mathcal{X}} + \varepsilon^2 \right) \quad (4.2.33)$$

where $C > 0$ does not depend on ε .

Remark 4.2.7. Note that this proposition asserts that there is a common non-trivial time interval, such that all the solutions to

$$i\partial_t \widetilde{\psi}^\varepsilon = H_x \widetilde{\psi}^\varepsilon + \varepsilon^{-2} H_z \widetilde{\psi}^\varepsilon + W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) \widetilde{\psi}^\varepsilon$$

with initial datum $\widetilde{\psi}_0$ and homogeneous Dirichlet boundary conditions and

$$i\partial_t \psi^\varepsilon = H_x \psi^\varepsilon + \varepsilon^{-2} H_z \psi^\varepsilon + V(|\psi^\varepsilon|^2) \psi^\varepsilon$$

with ψ_0 as initial datum and homogeneous Dirichlet boundary conditions exist on the *same time interval* $[0, T_0]$ when ε fluctuates. Of course, each maximal times of existence T_ε and $\widetilde{T}_\varepsilon$ associated to each solutions ψ^ε and $\widetilde{\psi}^\varepsilon$ for each fixed ε a priori depend on ε . The point of this proposition is that $\inf_{\varepsilon > 0} (T_\varepsilon, \widetilde{T}_\varepsilon) \geq T_0$.

Proof of Proposition 4.2.6 As a first step, let us prove the existence and uniqueness of solutions ψ^ε (respectively $\widetilde{\psi}^\varepsilon$) to (4.1.1)-(4.1.5) (respectively (4.1.14)-(4.1.16)) on time intervals $[0, T_\varepsilon)$ (respectively $[0, \widetilde{T}_\varepsilon)$) In that view, we define the following problem, in which

$$F^\varepsilon(u^\varepsilon) \text{ denotes either } V^\varepsilon(|u^\varepsilon|^2) \text{ or } W(|u^\varepsilon|^2),$$

$$i\partial_t u^\varepsilon = H_x u^\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon^2} H_z u^\varepsilon + F^\varepsilon(u^\varepsilon) u^\varepsilon \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (4.2.34)$$

$$u^\varepsilon(t, x, 0) = u^\varepsilon(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2 \quad (4.2.35)$$

$$u^\varepsilon(0, x, z) = u_0, \quad (x, z) \in \Omega. \quad (4.2.36)$$

Of course, we look for a solution u^ε of this Cauchy problem as a solution to the following fixed point equation given by the Duhamel formula :

$$u^\varepsilon(t, x, z) = e^{-itH^\varepsilon} u_0(x, z) - i \int_0^t e^{-i(t-s)H^\varepsilon} F^\varepsilon(u^\varepsilon) u^\varepsilon(s, x, z) ds \quad (4.2.37)$$

where $H^\varepsilon := H_x + \frac{1}{\varepsilon^2}H_z$. In order to state the existence of a unique solution in \mathcal{X} or \mathcal{Y} on a time interval $[0, T_\varepsilon]$ to this fixed point equation, we use the tame estimates (4.2.14) and (4.2.18) stated in Lemma 4.2.5.

Even more, if $t > 0$ is fixed and if $u, v \in \mathcal{C}([0, t], \mathcal{X})$, thanks to the fact that e^{itH^ε} is unitary in \mathcal{X} (as H_z and H_x commute with H^ε), the following Lipschitz estimate holds true :

$$\begin{aligned} & \left\| \int_0^t e^{-i(t-s)H^\varepsilon} [F^\varepsilon(u)u(s) - F^\varepsilon(v)v(s)] ds \right\|_{\mathcal{X}} \\ & \leq t \times \sup_{s \in [0, t]} \|F^\varepsilon(u)u(s) - F^\varepsilon(v)v(s)\|_{\mathcal{X}} \\ & \leq t \times C (\|u\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{X})}^2 + \|v\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{X})}^2) \|u - v\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{X})}, \end{aligned}$$

where we used the tame estimate (4.2.14) at hand on $F^\varepsilon(u^\varepsilon)$. Similarly, we prove thanks to the tame estimate (4.2.18) at hand for $W(|u^\varepsilon|^2)$ that, for all $u, v \in \mathcal{C}([0, t], \mathcal{Y})$,

$$\begin{aligned} & \left\| \int_0^t e^{-i(t-s)H^\varepsilon} [W(|u|^2)u(s) - W(|v|^2)v(s)] ds \right\|_{\mathcal{Y}} \\ & \leq t \times C (\|u\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{Y})}^2 + \|v\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{Y})}^2) \|u - v\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{Y})}. \end{aligned}$$

With these ingredients at hand, it is easy (see e.g [9]) to deduce that for any $\varepsilon > 0$, there exists a possibly small time $T_\varepsilon > 0$, and a unique solution $u^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_\varepsilon], \mathcal{X})$ to the integral equation (4.2.37), and this solution incidently provides the unique solution to the nonlinear Schrödinger system (4.2.34)-(4.2.35)-(4.2.36). We similarly prove the existence and uniqueness on a possibly small time interval $[0, T_\varepsilon]$ of a solution $u^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_\varepsilon], \mathcal{Y})$ to the system (4.2.34)-(4.2.35)-(4.2.36) where $u_0 \in \mathcal{Y}$ and $F^\varepsilon(u^\varepsilon) = W(|u^\varepsilon|^2)$. This task is let to the reader.

Let us now prove that there is a common lower bound T_0 for all these T_ε as ε fluctuates, i.e $T_\varepsilon \geq T_0$, for any $\varepsilon > 0$. If u^ε is the solution of the integral equation given by the Duhamel formula (4.2.37) with initial datum $u_0 \in \mathcal{X}$, then :

$$\begin{aligned} \|u^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{X}} & \leq \|u_0\|_{\mathcal{X}} + \int_0^t \|F^\varepsilon(u^\varepsilon)u^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} ds \\ & \leq \|u_0\|_{\mathcal{X}} + C \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}}^3 ds \end{aligned} \tag{4.2.38}$$

where we applied (4.2.13). Hence, we get

$$\|u^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{X})} \leq \|u_0\|_{\mathcal{X}} + Ct \|u^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, t], \mathcal{X})}^3.$$

Therefore, thanks to a bootstrap argument (see e.g lemma 5.5 in [7]), we prove the existence of such a T_0 , and we obtain :

$$\forall t \in (0, T_0), \|u^\varepsilon(t, \cdot)\|_{\mathcal{X}} \leq C \|u_0\|_{\mathcal{X}} \tag{4.2.39}$$

where $C > 0$ does not depend on ε .

In the case where $u_0 \in \mathcal{Y}$ and $F^\varepsilon(u^\varepsilon) = W(|u^\varepsilon|^2)$, the previous work ensures the existence of $T_0 > 0$ depending only on $\|u_0\|_{\mathcal{X}}$ such that (4.2.39) holds true. Let $t \in (0, T_0)$ be fixed. Using the Duhamel formula (4.2.37), the tame estimate (4.2.17) at hand on $W(|u|^2)u$ in \mathcal{Y} and (4.2.39) leads to

$$\|u^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{Y}} \leq \|u_0\|_{\mathcal{Y}} + C \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}}^2 \|u^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{Y}} ds \leq \|u_0\|_{\mathcal{Y}} + C \|u_0\|_{\mathcal{X}}^2 \int_0^t \|u^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{Y}} ds.$$

The Gronwall lemma allows us to conclude that there exists a common existence time $T_1 < T_0$ that only depends on $\|u_0\|_{\mathcal{X}}$ and that,

$$\forall t \in (0, T_1), \quad \|u^\varepsilon(t, \cdot)\|_{\mathcal{Y}} \leq C \|u_0\|_{\mathcal{Y}}$$

where C does not depend on ε . Both estimates therefore also provide us with a common bound $M > 0$ that only depends on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$ and $\|\widetilde{\psi}_0\|_{\mathcal{Y}}$ and end the proof of (4.2.32).

In order to prove the convergence result (4.2.33), we set $\psi_0 \in \mathcal{X}$ and $\widetilde{\psi}_0 \in \mathcal{Y}$. Consider the initial Schrödinger-Poisson system (4.1.1)-(4.1.5) and the intermediate system (4.1.14)-(4.1.16), with initial datum ψ_0 and $\widetilde{\psi}_0$ respectively. We have already proved the existence of a common existence time T_0 depending only on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$ and $\|\widetilde{\psi}_0\|_{\mathcal{X}}$ as well as the existence and uniqueness of their respective solutions denoted by $\psi^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})$ and $\widetilde{\psi}^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{Y})$.

The difference $\omega^\varepsilon := \psi^\varepsilon - \widetilde{\psi}^\varepsilon$ satisfies the following equation : for $t \in (0, T_0)$, $(x, z) \in \Omega$

$$\begin{aligned} i\partial_t \omega^\varepsilon &= H^\varepsilon \omega^\varepsilon + V^\varepsilon(|\psi^\varepsilon|^2)\psi^\varepsilon - V^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)\widetilde{\psi}^\varepsilon + \left(V^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) - W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) \right) \widetilde{\psi}^\varepsilon, \\ \omega^\varepsilon(0, x, z) &= \psi_0(x, z) - \widetilde{\psi}_0(x, z), \quad (x, z) \in \Omega. \end{aligned}$$

The Duhamel formula reads :

$$\omega^\varepsilon(t) = e^{-itH^\varepsilon} \left(\psi_0 - \widetilde{\psi}_0 \right) - i \int_0^t e^{-i(t-s)H^\varepsilon} \left(V^\varepsilon(|\psi^\varepsilon|^2)\psi^\varepsilon - V^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)\widetilde{\psi}^\varepsilon \right) (s) + f^\varepsilon(s) ds$$

where

$$f^\varepsilon(s) := \left(V^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) - W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) \right) \widetilde{\psi}^\varepsilon.$$

Since e^{-itH^ε} is unitary on \mathcal{X} (thanks to the fact that H_x and H_z commute with H^ε) and $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$ is an algebra, then we have :

$$\begin{aligned} \|\omega^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{X}} &\leq \|\psi_0 - \widetilde{\psi}_0\|_{\mathcal{X}} + C \int_0^t \|V^\varepsilon(|\psi^\varepsilon|^2)\psi^\varepsilon - V^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)\widetilde{\psi}^\varepsilon\|_{\mathcal{X}} ds + \int_0^t \|f^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} ds \\ &\leq \|\psi_0 - \widetilde{\psi}_0\|_{\mathcal{X}} + CM^2 \int_0^t \|\omega^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} ds + \int_0^t \|f^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} ds \end{aligned} \quad (4.2.40)$$

where we used (4.2.14) and the uniform bound M given by (4.2.32).

In order to estimate $\|f^\varepsilon(s)\|_x$, we write

$$\|f^\varepsilon(s)\|_x \leq \|V^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(s) - W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(s)\|_x \|\widetilde{\psi}^\varepsilon(s)\|_x. \quad (4.2.41)$$

Note that $v^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) := V^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(s) - W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(s)$ satisfies

$$-\partial_z^2 v^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) - \varepsilon^2 \Delta_x v^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2) = \varepsilon^2 \Delta_x W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2), \quad t \in (0, T_0), \quad (x, z) \in \Omega \quad (4.2.42)$$

$$v^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(t, x, 0) = v^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(t, x, 1) = 0, \quad t \in (0, T_0), \quad x \in \mathbb{R}^2 \quad (4.2.43)$$

and therefore, applying Lemma 4.2.4 to the equation (4.2.42)-(4.2.43) gives, for all $t \in (0, T_0)$:

$$\begin{aligned} \|v^\varepsilon(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(t)\|_x &\leq C\varepsilon^2 \|\Delta_x W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(t)\|_x \leq C\varepsilon^2 \|W(|\widetilde{\psi}^\varepsilon|^2)(t)\|_y \\ &\leq C\varepsilon^2 \|\widetilde{\psi}^\varepsilon(t)\|_y^2 \leq CM^2 \varepsilon^2 \end{aligned} \quad (4.2.44)$$

where we used (4.2.15) and the uniform bound M given by (4.2.32). Finally, combining (4.2.40) with (4.2.41), (4.2.44) and (4.2.32) leads to :

$$\|\omega^\varepsilon(t)\|_x \leq \|\psi_0 - \widetilde{\psi}_0\|_x + C\varepsilon^2 + C \int_0^t \|\omega^\varepsilon(s)\|_x ds$$

which, thanks to the Gronwall Lemma concludes the proof of (4.2.33). □

4.3 Time averaging of the intermediate system

In this section, we focus on the intermediate system (4.1.16),(4.1.17). In order to filter out the time-oscillations, we denote by ϕ^ε the filtered wave function defined in (4.1.36), which solves equation (4.1.39) :

$$\begin{aligned} i\partial_t \phi^\varepsilon(t) &= H_x \phi^\varepsilon(t) + G\left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(t)\right), & t > 0, (x, z) \in \Omega \\ \phi^\varepsilon(t, x, 0) &= \phi^\varepsilon(t, x, 1) = 0, & t > 0, x \in \mathbb{R}^2 \\ \phi^\varepsilon(0, x, z) &= \psi_0(x, z), & (x, z) \in \Omega, \end{aligned}$$

where we recall that the nonlinearity denoted by G is defined by (4.1.38) :

$$\tau \mapsto G(\tau, u) := e^{i\tau H_z} W(|e^{-i\tau H_z} u|^2) e^{-i\tau H_z} u.$$

In this section, we aim at stating almost-periodicity properties for the nonlinearity G . In that view, let us first recall various known facts about almost-periodic functions

(in time) with values in \mathcal{Z} (in space) that will be generally denoted as $\Theta(\tau)$. The key fact is the existence of their long-time averaging

$$\Theta_{av} := \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \Theta(\tau) d\tau,$$

and the point is, no small divisor estimate is needed to define these long-time averages, as recalled in Proposition 4.3.3. Then, Proposition 4.3.4 states several key facts about the nonlinearity G , in particular, we state some tame estimates on G (see (4.3.1) and (4.3.2)) and we prove that G is almost periodic in time with values in \mathcal{Z} (see point (i)) and therefore has a long-time average G_{av} (see (4.3.3)) which we also compute (see (4.3.4)). It also allows to prove that G_{av} inherits the tame estimates at hand for G (see (4.3.5) and (4.3.6)).

This proposition therefore allows us to state existence, uniqueness and regularity results for both intermediate and averaged systems in Corollary 4.3.5. Finally, Proposition 4.3.6 states the convergence of the filtered intermediate model towards the limit model in \mathcal{X} with additional \mathcal{Y} regularity assumptions on the initial datum. This point will be solved in the next section thanks to a regularization procedure.

Let us begin with the following definition, borrowed from [1] and [20].

Definition 4.3.1. *Let \mathcal{Z} denote either \mathcal{X} or \mathcal{Y} . A function $\Theta : \tau \in \mathbb{R} \mapsto \Theta(\tau)$, with $\Theta \in \mathcal{C}(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$ is said to be almost-periodic, and we note $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$, whenever the set of translates*

$$\{\tau \mapsto \Theta(\tau + h), h \in \mathbb{R}\}$$

has compact closure in the norm $L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$.

This definition using the precompactness criterion is usually referred to as Bochner's criterion for almost-periodicity. It is proved in [20] and in any textbook about almost-periodic functions, and recalled in [1] that this definition is equivalent to a criterion based on the approximation by trigonometric polynomials.

Proposition 4.3.2. *Equivalently, $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$ if and only if $\Theta(\tau)$ is the strong limit of trigonometric polynomials, i.e for any $\delta > 0$, there exists a trigonometric polynomial*

$$\Theta^\delta(\tau) := \sum_{n=1}^{N_\delta} \theta_{n,\delta} e^{i\lambda_{n,\delta}\tau}, \quad \text{such that} \quad \sup_{\tau \in \mathbb{R}} \|\Theta(\tau) - \Theta^\delta(\tau)\|_{\mathcal{Z}} \leq \delta,$$

where the $\theta_{n,\delta}$'s belong to \mathcal{Z} , the $\lambda_{n,\delta}$'s belong to \mathbb{R} and N_δ is some finite integer.

With this definition, it turns out that one may be willing to do some kind of Fourier analysis on almost-periodic functions, and, in particular, the long-time averaging (that stands for the mean mode in the Fourier analysis) is well defined as is stated in the following proposition borrowed from [1] and [20].

Proposition 4.3.3. Consider $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$. Then, the following strong limit exists in \mathcal{Z} ,

$$\Theta_{av} := \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \frac{1}{T} \Theta(\tau) d\tau.$$

Moreover, for any $\lambda \in \mathbb{R}$, the Fourier-like coefficient

$$\widehat{\Theta}(\lambda) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \Theta(\tau) e^{-i\lambda\tau},$$

is well-defined as a limit in \mathcal{Z} . Last, the following Bessel-like inequality holds : for any sequence $\{\lambda_n\}_{n \in \mathbb{N}} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}}$, we have

$$\sum_{n \in \mathbb{N}} \left\| \widehat{\Theta}(\lambda_n) \right\|_{\mathcal{Z}}^2 \leq \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|\Theta(\tau)\|_{\mathcal{Z}}^2 d\tau \leq \|\Theta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})}^2.$$

Note that a simple particular case of almost-periodic functions is given by *quasi-periodic* functions, that is to say functions which, for any given finite-dimensionnal frequency-vector $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_N)$ whose components are assumed to be pairwise rationally independent, can be written as the finite sum of N trigonometric monomials as explained in [1].

Let us now state a few consequences of Propositions 4.3.2 and 4.3.3 that will be of great use in the study of our to-be-averaged nonlinearity G defined in (4.1.38).

Proposition 4.3.4. Consider any function $u \in \mathcal{Z}$, then, the following holds :
(i) G is in $AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$: the function

$$\tau \mapsto e^{i\tau H_z} W(|e^{-i\tau H_z} u|^2) e^{-i\tau H_z} u := G(\tau, u)$$

belongs to $AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$, where $W(|e^{-i\tau H_z} u|^2)$ is defined by (4.1.13), (4.1.14).

(ii) Tame estimate for G in \mathcal{Z} : The function $u \mapsto G(\tau, u)$ is locally Lipschitz in \mathcal{Z} and satisfies the following tame estimates

$$\forall u \in \mathcal{Z}, \forall \tau > 0, \quad \|G(\tau, u)\|_{\mathcal{Z}} \leq C \|u\|_{\mathcal{X}}^2 \|u\|_{\mathcal{Z}} \quad (4.3.1)$$

and,

$$\forall u, v \in \mathcal{Z}, \forall \tau > 0, \quad \|G(\tau, u) - G(\tau, v)\|_{\mathcal{Z}} \leq C (\|u\|_{\mathcal{Z}}^2 + \|v\|_{\mathcal{Z}}^2) \|u - v\|_{\mathcal{Z}} \quad (4.3.2)$$

where C is a positive constant that only depends on the nonlinearity G .

(iii) Long-time averaging for $G(\tau, u)$ in \mathcal{Z} : One may define its long time averaging as the strong limit in \mathcal{Z} ,

$$G_{av}(u) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T G(\tau, u) d\tau. \quad (4.3.3)$$

Moreover, $G_{av}(u)$ is given by

$$G_{av}(u) = \sum_{p \geq 0} \sum_{(q,r,s) \in \Lambda_p} \alpha_{pqrs} \overline{u_q} u_r u_s \chi_p \quad (4.3.4)$$

where, for all $k \geq 0$, $u_k := \langle u, \chi_k \rangle_{L^2(0,1)}$, $\Lambda_p := \{(q, r, s) \in \mathbb{N}^3, E_p + E_q = E_r + E_s\}$, and

$$\alpha_{pqrs} = \int_0^1 \int_0^1 K(z, z') \chi_r(z') \chi_q(z') \chi_s(z) \chi_p(z) dz' dz.$$

(iv) Tame estimate for G_{av} in \mathcal{Z} : The function $u \in \mathcal{Z} \mapsto G_{av}(u)$ is locally Lipschitz in \mathcal{Z} and satisfies the following tame estimates

$$\forall u \in \mathcal{Z}, \quad \|G_{av}(u)\|_{\mathcal{Z}} \leq C \|u\|_{\mathcal{X}}^2 \|u\|_{\mathcal{Z}} \quad (4.3.5)$$

and,

$$\forall u, v \in \mathcal{Z}, \quad \|G_{av}(u) - G_{av}(v)\|_{\mathcal{Z}} \leq C (\|u\|_{\mathcal{Z}}^2 + \|v\|_{\mathcal{Z}}^2) \|u - v\|_{\mathcal{Z}} \quad (4.3.6)$$

where C is a positive constant that only depends on the nonlinearity G .

Gathering these properties on the nonlinearities G and G_{av} now allows us to state the following corollary that proves the existence, uniqueness and smoothness of the solutions to both filtered intermediate and averaged system.

Corollary 4.3.5. *Let $\varepsilon > 0$ be fixed and consider any function ψ_0 in \mathcal{Z} . There exists $T_0 > 0$ that only depends on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$ such that the filtered intermediate system*

$$i\partial_t \phi^\varepsilon(t) = H_x \phi^\varepsilon(t) + G\left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(t)\right), \quad t > 0, (x, z) \in \Omega \quad (4.3.7)$$

$$\phi^\varepsilon(t, x, 0) = \phi^\varepsilon(t, x, 1) = 0, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2 \quad (4.3.8)$$

$$\phi^\varepsilon(0, x, z) = \psi_0(x, z), \quad (x, z) \in \Omega, \quad (4.3.9)$$

and the averaged system

$$i\partial_t \phi(t) = H_x \phi(t) + G_{av}(\phi(t)) \quad t > 0, (x, z) \in \Omega, \quad (4.3.10)$$

$$\phi(t, x, 0) = \phi(t, x, 1) = 0 \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^2, \quad (4.3.11)$$

$$\phi(0, x, z) = \psi_0(x, z) \quad (x, z) \in \Omega. \quad (4.3.12)$$

both admit a unique solution in $\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{Z})$, respectively denoted by ϕ^ε and ϕ . Moreover, there exists $M > 0$ depending only on $\|\psi_0\|_{\mathcal{Z}}$ such that :

$$\sup_{0 < \varepsilon < 1} (\|\phi^\varepsilon\|_{\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{Z})} + \|\phi\|_{\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{Z})}) \leq M. \quad (4.3.13)$$

Proof of Proposition 4.3.4

Points (i) and (iii). We first claim that, given any $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$, the function $\tau \mapsto \exp^{\pm i\tau H_z} \Theta$ also belongs to $AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$. In that view, applying Proposition 4.3.2, we use the characterization of almost-periodic functions as the strong limit in \mathcal{H}^ℓ of trigonometric polynomials. Fix a small $\delta > 0$ and $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$, we may find a trigonometric polynomial

$$\Theta^\delta(\tau) = \sum_{n=1}^{N_\delta} \theta_{n,\delta} e^{i\lambda_{n,\delta}\tau}, \quad \text{such that } \|\Theta - \Theta^\delta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})} \leq \delta \quad (4.3.14)$$

where the $\theta_{n,\delta}$ belong to \mathcal{Z} and the $\lambda_{n,\delta}$ are real numbers. As the operator $e^{\pm i\tau H_z}$ preserves the \mathcal{Z} norm, we obtain

$$\|e^{\pm i\tau H_z} \Theta - e^{\pm i\tau H_z} \Theta^\delta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})} \leq \delta.$$

Now, since the $\theta_{n,\delta}$'s coincide with the Fourier-Like coefficients $\widehat{\Theta}^\delta(\lambda_{n,\delta})$ defined in Proposition 4.3.3, the Bessel-like inequality (4.3.1) reads

$$\sum_{n=1}^{N_\delta} \|\theta_{n,\delta}\|_{\mathcal{X}}^2 \leq \|\Theta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})}.$$

Besides, for δ small enough, we clearly have from (4.3.15) the uniform in time following bound :

$$\|\Theta^\delta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})} \leq C \quad (4.3.15)$$

where C does not depend on δ . Thanks to the definition of the \mathcal{X} and \mathcal{Y} norms given in (4.2.1) and (4.2.3), estimate (4.3.15) reads :

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{N_\delta} \sum_{p \geq 0} (1 + E_p^{2+\alpha}) \|\langle \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 + \sum_{n=1}^{N_\delta} \sum_{p \geq 0} (1 + E_p^2) \|\langle H_x \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \\ + \sum_{n=1}^{N_\delta} \sum_{p \geq 0} \|\langle H_x^2 \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \leq C. \end{aligned} \quad (4.3.16)$$

Let us now approximate the infinite sum $\Theta^\delta = \sum_{p \geq 0} \langle \Theta^\delta, \chi_p \rangle \chi_p$ by a finite sum. In that view, one may find $P_\delta \in \mathbb{N}$ such that

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{N_\delta} \sum_{p > P_\delta} (1 + E_p^{2+\alpha}) \|\langle \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 + \sum_{n=1}^{N_\delta} \sum_{p > P_\delta} (1 + E_p^2) \|\langle H_x \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \\ + \sum_{n=1}^{N_\delta} \sum_{p > P_\delta} \|\langle H_x^2 \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \leq \delta. \end{aligned}$$

In particular, with this choice for P_δ , and thanks to the definitions (4.2.2) and (4.2.4) of the \mathfrak{X} and \mathfrak{Y} norms, we recover the estimate

$$\sup_{\tau \in \mathbb{R}} \left\| \Theta^\delta(\tau) - \sum_{p=0}^{P_\delta} \langle \Theta^\delta(\tau), \chi_p \rangle \chi_p \right\|_{\mathfrak{Z}} \leq \delta,$$

which readily leads to

$$\sup_{\tau \in \mathbb{R}} \left\| e^{\pm i\tau H_z} \Theta^\delta(\tau) - \sum_{p=0}^{P_\delta} e^{\pm i\tau E_p} \langle \Theta^\delta, \chi_p \rangle \chi_p \right\|_{\mathfrak{Z}} \leq \delta.$$

Finally, the function

$$\sum_{p=0}^{P_\delta} e^{\pm i\tau E_p} \langle \Theta^\delta, \chi_p \rangle \chi_p = \sum_{n=0}^{N_\delta} \sum_{p=0}^{P_\delta} e^{\pm i\tau(E_p + \lambda_{n,\delta})} \langle \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle \chi_p$$

provides us with a trigonometric polynomial with coefficients in \mathfrak{Z} that is a good approximation of $e^{\pm i\tau H_z} \Theta(\tau)$ in \mathfrak{Z} . Indeed, it satisfies the estimate

$$\sup_{\tau \in \mathbb{R}} \left\| e^{\pm i\tau H_z} \Theta(\tau) - \sum_{n=0}^{N_\delta} \sum_{p=0}^{P_\delta} e^{\pm i\tau(E_p + \lambda_{n,\delta})} \langle \theta_{n,\delta}, \chi_p \rangle \chi_p \right\|_{\mathfrak{Z}} \leq 2\delta.$$

This proves that the function $\tau \mapsto e^{\pm i\tau H_z} \Theta(\tau)$ belongs to $AP(\mathbb{R}, \mathfrak{Z})$.

To finish the proof of point (i), we only need to prove that, given $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathfrak{Z})$, then $W(|\Theta|^2)$ still belongs to $AP(\mathbb{R}, \mathfrak{Z})$. In that view, we recall the explicit form of $W(|\Theta|^2)$ given in (4.1.15) :

$$W(|\Theta|^2)(t, x, z) = \int_0^1 K(z, z') |\Theta(t, x, z')|^2 dz'. \quad (4.3.17)$$

Fix $\tau \in \mathbb{R}$, then, in order to approximate $|\Theta|^2$ by a trigonometric polynomial with coefficients in \mathcal{H}^ℓ , we use (4.3.14) :

$$\begin{aligned} & \left\| |\Theta(\tau)|^2 - |\Theta^\delta(\tau)|^2 \right\|_{\mathfrak{Z}} \leq (\|\Theta(\tau)\|_{\mathfrak{Z}} + \|\Theta^\delta(\tau)\|_{\mathfrak{Z}}) \|\Theta(\tau) - \Theta^\delta(\tau)\|_{\mathfrak{Z}} \\ & \leq (\|\Theta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathfrak{Z})} + \|\Theta^\delta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathfrak{Z})}) \|\Theta - \Theta^\delta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathfrak{Z})} \\ & \leq (2C + \delta)\delta \end{aligned}$$

where we applied (4.3.14) and (4.3.15), and where $\|\Theta\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathfrak{Z})} \leq C$. Moreover, as \mathfrak{Z} is an algebra, then it is obvious that $|\Theta^\delta(\tau)|^2$ is a trigonometric polynomial in time with coefficients in \mathfrak{Z} . To conclude, thanks to (4.3.17), it is clear that

$$\int_0^1 K(z, z') |\Theta^\delta(\tau)|^2 dz'$$

is a trigonometric polynomial with coefficients in \mathcal{Z} that approaches $W(|\Theta(\tau)|^2)(t, x, z)$ in $L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$ as δ goes to zero. Finally, since $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$, Θ is the limit in $L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$ of trigonometric polynomials $\Theta^\delta(\tau)$ as in (4.3.14), using the fact that \mathcal{Z} is an algebra, for each $\delta > 0$, the function

$$W(|\Theta^\delta(\tau)|^2)\Theta^\delta(\tau)$$

is a trigonometric polynomial (in time), with coefficient in \mathcal{Z} that approaches $W(|\Theta(\tau)|^2)\Theta(\tau)$ as $\delta \rightarrow 0$ in the space $L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$. This ends the proof of (i).

Combining this point (i) and Proposition 4.3.3, one may define the long time averaging of G in \mathcal{Z} , which proves the first part of point (iii). In order to prove (4.3.4), consider $u \in \mathcal{Z}$. Then, if $\Theta(\tau)$ denotes $\Theta(\tau) := e^{-i\tau H_z}u \in \mathcal{Z}$, then, $\Theta \in AP(\mathbb{R}, \mathcal{Z})$. Indeed, as $u \in \mathcal{Z}$ and $(\chi_p)_p$ is an Hilbertian basis of $L^2(0, 1)$, then

$$u(x, z) := \sum_{p \geq 0} \langle u(x, \cdot), \chi_p \rangle \chi_p(z) := \sum_{p \geq 0} u_p(x) \chi_p(z)$$

where the limit holds in \mathcal{Z} . As a consequence, $\Theta(\tau) = \sum_{p \geq 0} u_p(x) e^{-i\tau E_p} \chi_p(z)$ can be approached in \mathcal{Z} , for any fixed $\delta > 0$ by a finite sum

$$\Theta^\delta(\tau) := \sum_{p=0}^{P_\delta} u_p e^{-iE_p \tau} \chi_p. \quad (4.3.18)$$

Therefore, we are here in a simple case where the frequencies of the approaching sequence of trigonometric polynomials do not depend on δ .

Computing $e^{i\tau H_z} W(|\Theta^\delta|^2) \Theta^\delta$ with (4.3.18) leads to

$$\sum_{p=0}^{\infty} \sum_{0 \leq q, r, s \leq P_\delta} \sum u_r(x) u_s(x) \overline{u_q}(x) e^{-i(E_r + E_s - E_q - E_p)\tau} \alpha_{pqrs} \chi_p(z) \quad (4.3.19)$$

which can be approached uniformly in time, choosing as previously an appropriate truncature P_δ for the first sum in (4.3.19), by

$$\sum_{0 \leq p, q, r, s \leq P_\delta} \sum u_r(x) u_s(x) \overline{u_q}(x) e^{-i(E_r + E_s - E_q - E_p)\tau} \alpha_{pqrs} \chi_p(z).$$

Now, its long time-average is given by

$$\sum_{\substack{0 \leq p, q, r, s \leq P_\delta \\ (q, r, s) \in \Lambda_p}} \sum u_r(x) u_s(x) \overline{u_q}(x) \alpha_{pqrs} \chi_p(z)$$

where α_{pqrs} and Λ_p are defined by

$$\alpha_{pqrs} := \int_0^1 \int_0^1 K(z, z') \chi_r(z') \chi_q(z') \chi_s(z) \chi_p(z) dz' dz$$

and

$$\forall p \geq 0, \quad \Lambda_p := \{(q, r, s) \in \mathbb{N}^3, E_p + E_q = E_r + E_s\}.$$

As the convergence of $e^{i\tau H_z} W(|\Theta^\delta|^2) \Theta^\delta$ towards $e^{i\tau H_z} W(|\Theta|^2) \Theta$ is uniform in time, the limit $\delta \rightarrow 0$ and the average procedure can easily be interverted, which readily leads to formula (4.3.4) and ends the proof of (iii). \square

Proof of points (ii) and (iv).

Consider any $u \in \mathcal{Z}$, and fix $\tau > 0$. Then, since $e^{-i\tau H_z}$ is unitary in the \mathcal{Z} norm, we readily have :

$$\|G(\tau, u)\|_{\mathcal{Z}} \leq \|W(|e^{-i\tau H_z} u|^2) e^{-i\tau H_z} u\|_{\mathcal{Z}}$$

and, using (4.2.17), we get :

$$\|G(\tau, u)\|_{\mathcal{Z}} \leq C \|e^{-i\tau H_z} u\|_{\mathcal{X}}^2 \|e^{-i\tau H_z} u\|_{\mathcal{Z}} \leq C \|u\|_{\mathcal{X}}^2 \|u\|_{\mathcal{Z}}.$$

Similarly, consider $u, v \in \mathcal{Z}$ and fix $\tau > 0$, then

$$\|G(\tau, u) - G(\tau, v)\|_{\mathcal{Z}} \leq \|W(|e^{-i\tau H_z} u|^2) e^{-i\tau H_z} u - W(|e^{-i\tau H_z} v|^2) e^{-i\tau H_z} v\|_{\mathcal{Z}}.$$

Now, applying (4.2.18) leads to

$$\|G(\tau, u) - G(\tau, v)\|_{\mathcal{Z}} \leq C (\|u\|_{\mathcal{Z}}^2 + \|v\|_{\mathcal{Z}}^2) \|u - v\|_{\mathcal{Z}}$$

which ends the proof of point (ii). Let us now prove that these tame estimates hold true when we average the nonlinearity G . Consider any $u \in \mathcal{Z}$. Since G_{av} is defined in (4.3.3) as a strong limit in \mathcal{Z} , then

$$\|G_{av}(u)\|_{\mathcal{Z}} = \left\| \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T G(\tau, u) d\tau \right\|_{\mathcal{Z}} \leq \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|G(\tau, u)\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})} d\tau.$$

Therefore,

$$\|G_{av}(u)\|_{\mathcal{Z}} \leq \sup_{\tau \in \mathbb{R}} \|G(\tau, u)\|_{\mathcal{Z}} \leq C \|u\|_{\mathcal{X}}^2 \|u\|_{\mathcal{Z}}$$

which proves (4.3.5). Similarly, if u and v are given in \mathcal{Z} , as both limits $G_{av}(u)$ and $G_{av}(v)$ hold in \mathcal{Z} , then

$$\|G_{av}(u) - G_{av}(v)\|_{\mathcal{Z}} = \left\| \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T (G(\tau, u) - G(\tau, v)) d\tau \right\|_{\mathcal{Z}}$$

and therefore

$$\begin{aligned} \|G_{av}(u) - G_{av}(v)\|_{\mathcal{Z}} &\leq \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|G(\tau, u) - G(\tau, v)\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})} d\tau \\ &\leq \|G(\tau, u) - G(\tau, v)\|_{L^\infty(\mathbb{R}, \mathcal{Z})} \\ &\leq C (\|u\|_{\mathcal{Z}}^2 + \|v\|_{\mathcal{Z}}^2) \|u - v\|_{\mathcal{Z}} \end{aligned}$$

where we applied (4.2.17). This ends the proof of point (iv). \square

Proof of Corollary 4.3.5 The existence, regularity and uniqueness result is an easy task. Indeed, the existence of a common existence-time for the solutions to the intermediate system has already been established in Proposition 4.2.6. We obtain the associated solution of the filtered intermediate system by filtering out the time oscillations due to the operator H_z as in (4.1.36).

Now, as far as the averaged system is concerned, the result of existence, uniqueness and regularity is an immediate corollary of Proposition 4.3.4. Indeed, as already seen in the proof of Proposition 4.2.6 the key ingredients in order to prove the existence and uniqueness of a local-in-time solution to the nonlinear Schrödinger equation (4.3.10) is the fact that the mapping

$$u \in \mathcal{Z} \mapsto G_{av}(u) \in \mathcal{Z}$$

is locally Lipschitz, which is the case here thanks to the estimates (4.3.5) and (4.3.6) given by Proposition 4.3.4, combined with the fact that the propagator $e^{-it\Delta_x}$ is unitary in \mathcal{Z} . We again refer to [9] on these matters. \square

Gathering all these properties allow us to perform the standard nonlinear analysis of the equation obtained by averaging in time the filtered equation (4.3.7),(4.3.8), and we state the following proposition.

Proposition 4.3.6. *Let $\varepsilon > 0$ be fixed and consider any $\psi_0 \in \mathcal{Y}$. If ϕ^ε and ϕ denote the respective solutions to both filtered intermediate system (4.3.7), (4.3.8),(4.3.9) and averaged system (4.3.10),(4.3.11), (4.3.12) in $\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{Y})$ defined by Corollary 4.3.5, then, the following convergence holds :*

$$\|\phi^\varepsilon - \phi\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Remark 4.3.7. First, note that though the solutions of Proposition 4.3.5 have the smoothness $\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{Y})$, the convergence of ϕ^ε that solves the filtered intermediate equation towards ϕ that solves the averaged equation only holds in the weaker space $\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})$. The fact that $\phi^\varepsilon \rightarrow \phi$ in $\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})$ provided ψ_0 belongs to \mathcal{X} only is proven in the next section.

Proof of Proposition 4.3.6. In order to prove this convergence result, we follow the same lines as in [1]. In that view, let us introduce a "large time" that we denote $T(\varepsilon)$ in order to approach the averaged nonlinearity $G_{av}(\Psi) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T G(\tau, \Psi) d\tau$ by

$$\tilde{G}_\varepsilon(t, \Psi) := \frac{1}{T(\varepsilon)} \int_t^{t+T(\varepsilon)} G(\tau, \Psi) d\tau. \quad (4.3.20)$$

As a first step, we define the auxiliary solution $\tilde{\phi}^\varepsilon$ to

$$i\partial_t \tilde{\phi}^\varepsilon = H_x \tilde{\phi}^\varepsilon + \tilde{G}_\varepsilon \left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \tilde{\phi}^\varepsilon \right) \quad (4.3.21)$$

$$\tilde{\phi}^\varepsilon(x, 0) = \tilde{\phi}^\varepsilon(x, 1) = 0 \quad \tilde{\phi}^\varepsilon(0) = \psi_0 \quad (4.3.22)$$

and find some preliminary bounds.

Step 1 : Some preliminary bounds

Consider $\Psi_0 \in \mathcal{Y}$, the function is clearly $\Theta \in \mathcal{Y} \mapsto \tilde{G}_\varepsilon(t, \Theta)$ is locally Lipschitz in \mathcal{Y} . Moreover, fix $\Theta \in \mathcal{Y}$ and $\tau > 0$, then

$$\|\tilde{G}_\varepsilon(\tau, \Theta)\|_{\mathcal{Y}} \leq \frac{1}{T(\varepsilon)} \int_\tau^{\tau+T(\varepsilon)} \|G(s, \Theta)\|_{\mathcal{Y}} ds \leq C \|\Theta\|_{\mathcal{X}}^2 \|\Theta\|_{\mathcal{Y}}$$

where we applied (4.3.1), and with C a positive constant that does not depend on ε .

As a consequence, there exists $\tilde{T} > 0$, independent of ε such that (4.3.21),(4.3.22) admits a unique solution with smoothness $\mathcal{C}^0([0, \tilde{T}], \mathcal{Y})$. To prove it, we use the exact same arguments than in the proof of Proposition 4.2.6 that lied on both Duhamel formula and tame estimates (4.3.1) and (4.3.2). Even more, there exist a time T_0 , independent of ε that is common to the intermediate system (4.3.7)-(4.3.8), the auxiliary system (4.3.21)-(4.3.22) and the limit system (4.3.10)-(4.3.11) with the initial datum ψ_0 . This existence time, that we still denote T_0 , in fact is defined as the minimum of the former T_0 given by Corollary 4.3.5 and the existence time of the auxiliary system. Moreover, there exists a common upper-bound $M > 0$ in \mathcal{Y} for $\phi^\varepsilon(t, \cdot)$, $\phi(t, \cdot)$ and $\tilde{\phi}^\varepsilon$:

$$\sup_{0 < \varepsilon < 1} \left[\|\phi^\varepsilon\|_{\mathcal{C}((0, T_0), \mathcal{Y})} + \|\tilde{\phi}^\varepsilon\|_{\mathcal{C}((0, T_0), \mathcal{Y})} + \|\phi\|_{\mathcal{C}((0, T_0), \mathcal{Y})} \right] \leq M. \quad (4.3.23)$$

Similarly, the following uniform Lipschitz property may be stated :

$$\sup_{0 < \varepsilon < 1} \sup_{0 \leq \tau \leq \frac{T_0}{\varepsilon^2}} \sup_{\substack{\|u\|_{\mathcal{Y}} \leq M \\ \|v\|_{\mathcal{Y}} \leq M}} \left[\|G(\tau, u) - G(\tau, v)\|_{\mathcal{Z}} + \|\tilde{G}_\varepsilon(\tau, u) - \tilde{G}_\varepsilon(\tau, v)\|_{\mathcal{Z}} \right. \\ \left. + \|G_{av}(\tau, u) - G_{av}(\tau, v)\|_{\mathcal{Z}} \right] \leq CM^2 \|u - v\|_{\mathcal{Z}} \quad (4.3.24)$$

where $C > 0$ does not depend on ε and \mathcal{Z} denotes either \mathcal{X} or \mathcal{Y} .

Step 2 : estimating $\tilde{G}_\varepsilon(\tau/\varepsilon^2, u) - G_{av}(u)$ in \mathcal{Y} for $u \in \mathcal{Y}$

In order to estimate the difference $\tilde{\phi}^\varepsilon - \phi$, we estimate in this step, for any given $u \in \mathcal{Y}$, the difference $\tilde{G}_\varepsilon(\tau, u) - G_{av}(u)$ for $\tau \in (0, T_0/\varepsilon^2)$. Consider any fixed u in \mathcal{Y} , and introduce the following convergence rate :

$$\delta_2(\varepsilon, u) := \sup_{0 \leq \tau \leq 2T_0/\varepsilon^2} \left\| \frac{\varepsilon^2}{2T_0} \int_0^\tau [G(\sigma, u) - G_{av}(u)] d\sigma \right\|_{\mathcal{X}}. \quad (4.3.25)$$

We are now in position to state the following lemma :

Lemma 4.3.8. (i) For any given $u \in \mathcal{Y}$, we have

$$\delta_2(\varepsilon, u) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (4.3.26)$$

(ii) Fix $M > 0$ as in (4.3.23), and introduce the uniform δ_2 convergence rate :

$$\delta_{2,M}(\varepsilon) := \sup_{\|v\|_{\mathcal{Y}} \leq M} \delta_2(\varepsilon, v), \quad \text{then} \quad \delta_{2,M}(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (4.3.27)$$

(iii) Assume that, for ε small enough, $\varepsilon^2 T(\varepsilon) \leq T_0$, if $M > 0$ is fixed as in (4.3.23), then,

$$\sup_{\|u\|_{\mathcal{Y}} \leq M} \left\| \widetilde{G}_\varepsilon \left(\frac{t}{\varepsilon^2}, u \right) - G_{av}(u) \right\|_{\mathcal{C}^0((0, T_0), \mathcal{X})} \leq 2T_0 \frac{\delta_{2,M}(\varepsilon)}{\varepsilon^2 T(\varepsilon)}. \quad (4.3.28)$$

Remark 4.3.9. Here, let us note that the right-hand-side term in (4.3.28) does not necessarily go to zero with ε but provides us with a necessary condition for the choice of $T(\varepsilon)$ in order to have it go to zero. In fact, we will choose $T(\varepsilon)$ such that $\varepsilon^2 T(\varepsilon) \rightarrow 0$ as $\varepsilon \rightarrow 0$ (note that $\widetilde{G}_\varepsilon(t/\varepsilon^2, u) = \sqrt{\delta_{2,M}}$ will do).

Note also that the difference $\widetilde{G}_\varepsilon(t/\varepsilon^2, u) - G_{av}(u)$ can here only be estimated in \mathcal{X} when u is in \mathcal{Y} . Through this lemma, we note that a loss of two derivative is needed as point (ii) relies on a compactness argument that is the compactness of the embedding $\mathcal{Y} \subset \mathcal{X}$.

Proof of Lemma 4.3.8. For any given $u \in \mathcal{Y}$, we know, thanks to (4.3.3) that the quantity $\frac{1}{T} \int_0^T G(\sigma, u) d\sigma$ goes to $G_{av}(u)$ strongly in \mathcal{X} as $T \rightarrow +\infty$. Therefore, point (i) is proven.

In view of point (ii), we argue by contradiction and use a compactness argument. In the opposite case where $\delta_{2,M}(\varepsilon) \not\rightarrow 0$, we would be able to build up two sequences $\varepsilon_n \rightarrow 0$ and $(u_n)_n$ such that $\forall n \in \mathbb{N}$, $\|u_n\|_{\mathcal{Y}} \leq M$ with $\delta_2(\varepsilon_n, u_n) \not\rightarrow 0$. Now, since the embedding $\mathcal{Y} \subset \mathcal{X}$ is compact, then, one may extract from $(u_n)_n$ a subsequence still denoted by $(u_n)_n$ which converges towards a function u in \mathcal{X} . Moreover, we obviously have :

$$|\delta_2(\varepsilon_n, u_n) - \delta_2(\varepsilon_n, u)| \leq CM^2 \|u_n - u\|_{\mathcal{X}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0,$$

while we clearly have, according to definition (4.3.25) $\delta_2(\varepsilon_n, u) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$. Therefore, we come to the contradiction $\delta_2(\varepsilon_n, u_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$. This ends the proof of point (ii).

In order to prove point (iii), we assume that $\varepsilon^2 T(\varepsilon) \leq T_0$, and we write

$$\begin{aligned} & \sup_{\|u\|_{\mathcal{Y}} \leq M} \left\| \widetilde{G}_\varepsilon(t/\varepsilon^2, u) - G_{av}(u) \right\|_{\mathcal{C}((0, T_0), \mathcal{X})} \\ & \leq \sup_{\|u\|_{\mathcal{Y}} \leq M} \sup_{0 \leq t \leq T_0/\varepsilon^2} \frac{1}{T(\varepsilon)} \int_t^{t+T(\varepsilon)} \|G(\sigma, u) - G_{av}(u)\|_{\mathcal{X}} d\sigma \\ & \leq \frac{2T_0}{\varepsilon^2 T(\varepsilon)} \delta_{2,M}(\varepsilon). \end{aligned}$$

□

In the sequel, we choose $T(\varepsilon)$ such that

$$\varepsilon^2 T(\varepsilon) := \sqrt{\delta_{2,M}(\varepsilon)}. \quad (4.3.29)$$

Indeed, $\varepsilon^2 T(\varepsilon) = \sqrt{\delta_{2,M}(\varepsilon)} \rightarrow 0$ as ε goes to zero according to (4.3.27) of Lemma 4.3.8, and, therefore, for ε small enough, the assumption $\varepsilon^2 T(\varepsilon) \leq T_0$ holds.

Step 3 : estimating $\tilde{\phi}^\varepsilon - \phi$.

Fix $t \in (0, T_0)$, the difference $\omega^\varepsilon(t) := \tilde{\phi}^\varepsilon(t) - \phi(t)$ readily satisfies the equation

$$\begin{aligned} i\partial_t \omega^\varepsilon(t) &= H_x \omega^\varepsilon(t) + \tilde{G}_\varepsilon\left(\frac{\tau}{\varepsilon^2}, \tilde{\phi}^\varepsilon(t)\right) - G_{av}(\phi(t)), \\ \omega^\varepsilon(x, 0) &= \omega^\varepsilon(x, 1) = 0, \quad \omega^\varepsilon(0, x, z) = 0. \end{aligned}$$

The Duhamel formula for ω^ε allows us to write that, for all $t \in (0, T_0)$:

$$\begin{aligned} \|\omega^\varepsilon(t)\|_x &\leq \left\| \int_0^t e^{i(t-s)H_x} \left[\tilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \tilde{\phi}^\varepsilon(s)\right) - G_{av}(\phi(s)) \right] ds \right\|_x \\ &\leq \int_0^t \left\| \tilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \tilde{\phi}^\varepsilon(s)\right) - \tilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi(s)\right) \right\|_x ds \\ &\quad + \int_0^t \left\| \tilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi(s)\right) - G_{av}(\phi(s)) \right\|_x ds \end{aligned}$$

Applying estimate (4.3.24) allows us to deal with the first part of the sum. Moreover, estimate (4.3.28) combined with the uniform bound (4.3.23) at hand for ϕ , leads to

$$\|\omega^\varepsilon(t)\|_x \leq CM^2 \int_0^t \|\omega^\varepsilon(s)\|_x ds + 2T_0^2 \frac{\delta_{2,M}}{\varepsilon^2 T(\varepsilon)}.$$

Now, using the Gronwall lemma allows us to conclude that

$$\forall 0 \leq t \leq T_0, \quad \|\tilde{\phi}^\varepsilon(t) - \phi(t)\|_x \leq C \frac{\delta_{2,M}}{\varepsilon^2 T(\varepsilon)} \quad (4.3.30)$$

where $C > 0$ only depends on T_0 and M .

Step 4 : estimating $\phi^\varepsilon - \tilde{\phi}^\varepsilon$

This estimate is more delicate to handle with than the previous one as it relies on an appropriate integration by part in time. Let us fix $0 < T < T_0$, here, T is meant to be close to T_0 : we need to have $T + \varepsilon^2 T(\varepsilon) < T_0$ which holds true for ε small enough. Consider the difference

$$\tilde{\omega}^\varepsilon(t) := \phi^\varepsilon(t) - \tilde{\phi}^\varepsilon(t).$$

It readily satisfies the following equation :

$$i\partial_t \widetilde{\omega}^\varepsilon(t) = H_x \widetilde{\omega}^\varepsilon + G\left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(t)\right) - \widetilde{G}_\varepsilon\left(\frac{t}{\varepsilon^2}, \widetilde{\phi}^\varepsilon(t)\right), \quad \widetilde{\omega}^\varepsilon(0) = 0.$$

Hence, for all $0 \leq t \leq T$, the Duhamel formula yields

$$\|\widetilde{\omega}^\varepsilon(t)\|_x \leq \left\| \int_0^t e^{i(t-s)H_x} \left[G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) - \widetilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \widetilde{\phi}^\varepsilon(s)\right) \right] ds \right\|_x.$$

Combined with (4.3.24), for all $0 \leq t \leq T$, it leads to :

$$\begin{aligned} \|\widetilde{\omega}^\varepsilon(t)\|_x &\leq CM^2 \int_0^t \|\widetilde{\omega}^\varepsilon(s)\|_x ds \\ &\quad + \left\| \int_0^t e^{i(t-s)H_x} \left[G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) - \widetilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) \right] ds \right\|_x \end{aligned} \quad (4.3.31)$$

In order to deal with the second term, we follow the same arguments as [1], adapted to our functional framework, and so we write

$$\begin{aligned} &\int_0^t e^{i(t-s)H_x} \widetilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) ds \\ &= \int_0^t \int_0^1 e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) dud s \\ &= \int_0^t \int_0^1 e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u)\right) dud s + R_1^\varepsilon \end{aligned} \quad (4.3.32)$$

where

$$R_1^\varepsilon := \int_0^1 \int_0^t e^{i(t-s)H_x} \left[-G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u)\right) + G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) \right]$$

In order to deal with the right-hand-term of (4.3.32) we write :

$$\begin{aligned} &\int_0^t \int_0^1 e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u)\right) dud s \\ &= \int_0^1 \int_{\varepsilon^2 T(\varepsilon)u}^{t + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u} e^{i(t-s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u)H_x} G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) ds du \\ &= \int_0^1 \int_{\varepsilon^2 T(\varepsilon)u}^{t + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u} e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) ds du + R_2^\varepsilon \end{aligned} \quad (4.3.33)$$

where

$$R_2^\varepsilon := \int_0^1 \int_{\varepsilon^2 T(\varepsilon)u}^{t + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u} \left[e^{i(t-s)H_x} - e^{i(t-s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u)H_x} \right] G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) ds du \quad (4.3.34)$$

and now, thanks to (4.3.33), we obtain

$$\begin{aligned} & \int_0^t \int_0^1 e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u)\right) duds \\ &= \int_0^1 \int_0^t e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) dsdu + R_2^\varepsilon + R_3^\varepsilon \end{aligned} \quad (4.3.35)$$

where

$$\begin{aligned} R_3^\varepsilon := & - \int_0^1 \int_0^{\varepsilon^2 T(\varepsilon)u} e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) dsdu \\ & + \int_0^1 \int_t^{t+\varepsilon^2 T(\varepsilon)u} e^{i(t-s)H_x} G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) dsdu. \end{aligned} \quad (4.3.36)$$

Eventually, combining (4.3.32), (4.3.33) and (4.3.35), we have established that

$$\int_0^t e^{i(t-s)H_x} \left(\tilde{G}_\varepsilon\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) - G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) \right) ds = R_1^\varepsilon + R_2^\varepsilon + R_3^\varepsilon. \quad (4.3.37)$$

Let us now estimate the remainders R_1^ε , R_2^ε and R_3^ε . In order to estimate R_1^ε , we use the tame estimate (4.3.2)

$$\begin{aligned} \|R_1^\varepsilon\|_x &\leq \int_0^1 \int_0^t \left\| G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u)\right) - G\left(\frac{s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) \right\|_x duds \\ &\leq CM^2 \int_0^1 \int_0^t \|\phi^\varepsilon(s + \varepsilon^2 T(\varepsilon)u) - \phi^\varepsilon(s)\|_x duds \\ &\leq CM^2 \varepsilon^2 T(\varepsilon) \|\partial_t \phi^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)], \mathcal{X})}. \end{aligned}$$

Yet, the equation

$$i\partial_t \phi^\varepsilon = -H_x \phi^\varepsilon + G(s/\varepsilon^2, \phi^\varepsilon),$$

together with the bounds at hand for ϕ^ε in $\mathcal{C}([0, T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)], \mathcal{Y})$ and the uniform Lipschitz property (4.3.1) satisfied by $G(s/\varepsilon^2, \cdot)$, implies that

$$\|\partial_t \phi^\varepsilon\|_{\mathcal{C}^0([0, T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)], \mathcal{X})} \leq C$$

for some $C > 0$ that does not depend on ε , which finally provides

$$\|R_1^\varepsilon\|_x \leq C\varepsilon^2 T(\varepsilon). \quad (4.3.38)$$

Concerning R_2^ε , we notice that, thanks to (4.3.34) :

$$R_2^\varepsilon = \int_0^1 \int_{\varepsilon^2 T(\varepsilon)u}^{t+\varepsilon^2 T(\varepsilon)u} \int_0^{\varepsilon^2 T(\varepsilon)u} \frac{d}{d\sigma} \left(e^{i(t-s)\sigma H_x} G\left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s)\right) \right) d\sigma dsdu$$

and therefore

$$\begin{aligned}
\|R_2^\varepsilon\|_x &\leq (T + \varepsilon^2 T(\varepsilon))\varepsilon^2 T(\varepsilon) \left\| H_x G \left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s) \right) \right\|_{\mathcal{C}^0([0, T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)], \mathcal{X})} \\
&\leq \varepsilon^2 T(\varepsilon)(T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)) \left\| G \left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s) \right) \right\|_{\mathcal{C}^0([0, T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)], \mathcal{Y})} \\
&\leq C\varepsilon^2 T(\varepsilon)(T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)) \|\phi^\varepsilon\|_{\mathcal{C}^0([0, T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)], \mathcal{Y})}^3 \\
\|R_2^\varepsilon\|_x &\leq CM^3 \varepsilon^2 T(\varepsilon)(T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)) \leq CM^3 \varepsilon^2 T(\varepsilon)
\end{aligned} \tag{4.3.39}$$

where we applied the uniform Lipschitz estimate (4.3.24) and the uniform bound (4.3.23) at hand for ϕ^ε . Finally, concerning R_3^ε , we readily have :

$$\begin{aligned}
\|R_3^\varepsilon\|_x &\leq \int_0^{\varepsilon^2 T(\varepsilon)} \left\| G \left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s) \right) \right\|_x ds + \int_t^{t + \varepsilon^2 T(\varepsilon)} \left\| G \left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s) \right) \right\|_x ds \\
&\leq 2\varepsilon^2 T(\varepsilon) \left\| G \left(\frac{s}{\varepsilon^2}, \phi^\varepsilon(s) \right) \right\|_{\mathcal{C}^0([0, T + \varepsilon^2 T(\varepsilon)], \mathcal{X})} \\
\|R_3^\varepsilon\|_x &\leq C\varepsilon^2 T(\varepsilon) M^3
\end{aligned} \tag{4.3.40}$$

where, once again, we used the uniform Lipschitz estimate (4.3.24) and the uniform bound (4.3.23). Combining (4.3.31) with (4.3.37), (4.3.38), (4.3.39) and (4.3.40), and applying the Gronwall Lemma gives :

$$\forall 0 \leq t \leq T, \quad \|\phi^\varepsilon(t) - \tilde{\phi}^\varepsilon(t)\|_x \leq C\varepsilon^2 T(\varepsilon) \tag{4.3.41}$$

for some $C > 0$ that does not depend on ε .

Step 5 : Conclusion

Gathering the estimates (4.3.30) in Step 3 and (4.3.41) in Step 4, we recover

$$\forall 0 \leq t \leq T, \quad \|\phi^\varepsilon(t) - \phi(t)\|_x \leq C \left(\varepsilon^2 T(\varepsilon) + \frac{\delta_{2,M}(\varepsilon)}{\varepsilon^2 T(\varepsilon)} \right). \tag{4.3.42}$$

Therefore, combining the choice for $T(\varepsilon)$ made in (4.3.29) with (4.3.42), we conclude that

$$\|\phi^\varepsilon - \phi\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} \leq C \sqrt{\delta_{2,M}(\varepsilon)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \tag{4.3.43}$$

□

4.4 Proof of the main theorem

Proposition 4.4.1. *Consider any $\psi_0 \in \mathcal{Y}$, then, there exists $T_0 > 0$ depending only on $\|\psi_0\|_x$ such that ψ^ε and ϕ , the respective solutions to both initial Schrödinger-Poisson system (4.1.1)-(4.1.2)-(4.1.4)-(4.1.5) and averaged system (4.3.10),(4.3.11), (4.3.12) with initial datum ψ_0 exist and are unique in $\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{Y})$. Moreover, the following convergence holds :*

$$\|\psi^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

Proof. This proposition is easily proved gathering the convergence results that we obtained in section 4.2 and section 4.3. Indeed, thanks to Proposition 4.2.6, there exists $T_1 > 0$ depending only on $\|\psi_0\|_X$ such that both initial Schrödinger-Poisson system (4.1.1)-(4.1.2)-(4.1.4)-(4.1.5) and intermediate system (4.1.16)-(4.1.17)-(4.1.13)-(4.1.14) with initial datum ψ_0 possess unique solutions respectively denoted by $\psi^\varepsilon \in \mathcal{C}([0, T_1], \mathcal{X})$ and $\widetilde{\psi}^\varepsilon$ in $\mathcal{C}([0, T_1], \mathcal{Y})$. Moreover, the following holds :

$$\|\psi^\varepsilon - \widetilde{\psi}^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T_1], \mathcal{X})} \leq C\varepsilon^2$$

where $C > 0$ does not depend on ε .

Moreover, applying Corollary 4.3.5 with the initial datum ψ_0 , there exists $T_2 > 0$ that only depends on $\|\psi_0\|_X$ such that both filtered intermediate system (4.3.7)-(4.3.8)-(4.3.9) and averaged system (4.3.10),(4.3.11), (4.3.12) admit unique solutions in $\mathcal{C}([0, T_2], \mathcal{Y})$ that we denote ϕ^ε and ϕ . Now, as $e^{-itH_z/\varepsilon^2}\psi^\varepsilon$ satisfies (4.3.7)-(4.3.8)-(4.3.9), if $T_0 = \min(T_1, T_2)$, then, using the unicity of ϕ^ε , we get

$$\forall t \in [0, T_0], \quad \widetilde{\psi}^\varepsilon(t) = e^{-itH_z/\varepsilon^2}\phi^\varepsilon(t). \quad (4.4.1)$$

Moreover, thanks to Proposition 4.3.6, we get :

$$\forall t \in [0, T_2], \quad \|\phi^\varepsilon(t) - \phi(t)\|_X \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (4.4.2)$$

Combining (4.4.1), (4.4.2) and (4.4.1) leads, for all $t \in [0, T_0]$ to :

$$\begin{aligned} \|\psi^\varepsilon(t) - e^{-itH_z/\varepsilon^2}\phi(t)\|_X &\leq \|\psi^\varepsilon(t) - e^{-itH_z/\varepsilon^2}\phi^\varepsilon(t)\|_X \\ &\quad + \|e^{-itH_z/\varepsilon^2}\phi^\varepsilon(t) - e^{-itH_z/\varepsilon^2}\phi(t)\|_X \end{aligned}$$

and finally :

$$\|\psi^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2}\phi\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

which ends the proof. □

Proof of the main theorem Take $\psi_0 \in \mathcal{X}$ and fix a small $\delta > 0$. Now, pick a regularization $\psi_{0,\delta} \in \mathcal{Y}$ of ψ_0 such that

$$\|\psi_0 - \psi_{0,\delta}\|_X \leq \delta. \quad (4.4.3)$$

Associated to the initial datum $\psi_{0,\delta}$, let us define the functions ψ_δ^ε and $\phi_\delta(t)$ that respectively solve the initial Schrödinger-Poisson system (4.1.1)-(4.1.2)-(4.1.4)-(4.1.5) and the averaged equation (4.3.10),(4.3.11) with initial datum $\psi_{0,\delta}$. Similarly, associated to the initial datum ψ_0 , let us define ψ^ε , $\widetilde{\psi}^\varepsilon$, ϕ^ε and ϕ that respectively solve the initial Schrödinger-Poisson system (4.1.1)-(4.1.2)-(4.1.4)-(4.1.5) the intermediate system (4.1.16)-(4.1.17)-(4.1.13)-(4.1.14), the intermediate filtered equation (4.3.7),(4.3.8) and the averaged equation (4.3.10),(4.3.11).

Indeed, we already know, thanks to Proposition 4.2.6 and Corollary 4.3.5 that there exist $T_1 > 0$ that only depends on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$ such that ψ^ε and $\widetilde{\psi}^\varepsilon$ exist and are unique in $\mathcal{C}([0, T_1], \mathcal{X})$, and T_2 , depending only on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$ such that $\phi^\varepsilon(t)$ and $\phi(t)$ exist and are unique in $\mathcal{C}([0, T_2], \mathcal{X})$. If $T_0 := \min(T_1, T_2)$, we moreover know that they belong to $\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})$ uniformly in ε , thanks to the estimates (4.2.32) and (4.3.13).

Applying Proposition 4.4.1, we also know that, for each $\delta > 0$, there exists $T_{0,\delta} > 0$ depending only on $\|\psi_{0,\delta}\|_{\mathcal{X}}$ such that ψ_δ^ε and ϕ_δ belong to $\mathcal{C}^0([0, T_{0,\delta}], \mathcal{Y})$ uniformly in ε . Since $\|\psi_{0,\delta}\|_{\mathcal{X}} \leq \|\psi_0\|_{\mathcal{X}} + \delta$, we may ensure that $\|\psi_{0,\delta}\|_{\mathcal{X}}$ is as close as we wish to $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$, so that $T_{0,\delta}$ may be in turn assumed as close as needed to T_0 . For this reason, we may safely assume for the remaining part of the argument that all the functions $\psi^\varepsilon, \phi, \psi_\delta^\varepsilon$ and ϕ_δ are defined on the *same* time interval $[0, T_0]$. Similarly, according to (4.2.32) and (4.3.13), we may safely assume that they are bounded by a common $M > 0$ depending only on $\|\psi_0\|_{\mathcal{X}}$, :

$$\sup_{0 < \varepsilon < 1} \sup_{0 < \delta < 1} (\|\psi^\varepsilon\|_{\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})} + \|\psi_\delta^\varepsilon\|_{\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})} + \|\phi\|_{\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})} + \|\phi_\delta\|_{\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})}) \leq M. \quad (4.4.4)$$

We readily have

$$\begin{aligned} \|\psi^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} &\leq \|\psi^\varepsilon - \psi_\delta^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} \\ &\quad + \|\psi_\delta^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi_\delta\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})} + \|\phi_\delta - \phi\|_{\mathcal{C}([0, T_0], \mathcal{X})}. \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

where we used the fact that e^{-itH_z/ε^2} is unitary on \mathcal{X} . On the one hand, Proposition 4.4.1 asserts that

$$\|\psi_\delta^\varepsilon - e^{-itH_z/\varepsilon^2} \phi_\delta\|_{\mathcal{C}^0([0, T_0], \mathcal{X})} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0. \quad (4.4.6)$$

On the other hand, ψ^ε and ψ_δ^ε both satisfy the following equation

$$i\partial_t u^\varepsilon = H^\varepsilon u^\varepsilon + V^\varepsilon(|u^\varepsilon|^2)u^\varepsilon$$

with initial data ψ_0 and $\psi_{0,\delta}$ respectively. Therefore, $\psi^\varepsilon - \psi_\delta^\varepsilon$ satisfies equation

$$i\partial_t(\psi^\varepsilon - \psi_\delta^\varepsilon) = H^\varepsilon(\psi^\varepsilon - \psi_\delta^\varepsilon) + V^\varepsilon(|\psi^\varepsilon|^2)\psi^\varepsilon - V^\varepsilon(|\psi_\delta^\varepsilon|^2)\psi_\delta^\varepsilon$$

with the initial datum $\psi_0 - \psi_{0,\delta}$. The Duhamel formula readily gives, for all $t \in (0, T_0)$:

$$\|\psi^\varepsilon(t) - \psi_\delta^\varepsilon(t)\|_{\mathcal{X}} \leq \|\psi_0 - \psi_{0,\delta}\|_{\mathcal{X}} + \int_0^t \|V^\varepsilon(|\psi^\varepsilon|^2)\psi^\varepsilon(s) - V^\varepsilon(|\psi_\delta^\varepsilon|^2)\psi_\delta^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} ds \quad (4.4.7)$$

Now, we readily have, applying (4.2.14) (in the case where $F(u)$ denotes $V(|u|^2)$)

$$\begin{aligned} \|V^\varepsilon(|\psi^\varepsilon|^2)\psi^\varepsilon(s) - V^\varepsilon(|\psi_\delta^\varepsilon|^2)\psi_\delta^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} &\leq C (\|\psi^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}}^2 + \|\psi_\delta^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}}^2) \|\psi^\varepsilon(s) - \psi_\delta^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} \\ &\leq CM^2 \|\psi^\varepsilon(s) - \psi_\delta^\varepsilon(s)\|_{\mathcal{X}} \end{aligned} \quad (4.4.8)$$

where we used the uniform bound (4.4.4). Combining (4.4.7) and (4.4.8) with (4.4.3) and applying the Gronwall Lemma finally gives

$$\|\psi^\varepsilon - \psi_\delta^\varepsilon\|_{\mathcal{C}([0, T_0], X)} \leq e^{CM^2 T_0} \delta. \quad (4.4.9)$$

Similarly, as ϕ and ϕ_δ both solve the equation

$$i\partial_t u = -\Delta_x u + G_{av}(u)$$

with initial data ψ_0 and $\psi_{0,\delta}$ respectively, $\phi - \phi_\delta$ satisfies

$$i\partial_t(\phi - \phi_\delta) = -\Delta_x(\phi - \phi_\delta) + G_{av}(\phi) - G_{av}(\phi_\delta)$$

with initial datum $\psi_0 - \psi_{0,\delta}$. Using the Duhamel formula and the tame estimate at hand on G_{av} given by (4.3.6) leads to

$$\|\phi^\delta - \phi\|_{\mathcal{C}([0, T_0], X)} \leq \delta e^{CM^2 T_0}. \quad (4.4.10)$$

Finally, combining (4.4.5), (4.4.6), (4.4.9) and (4.4.10), having ε go to zero, and then choosing δ small enough allows us to conclude this regularization procedure. The main theorem can be deduced applying the identification of G_{av} given in (4.3.4) and projecting on the p th eigenmode of the operator H_z . \square

4.A Proof of Lemma 4.2.4

The existence of a unique solution in $L^2(\Omega)$ comes straight forward as (4.2.8)-(4.2.9) is an elliptic equation when $\varepsilon > 0$, and, when $\varepsilon = 0$, the unique solution is explicit. Let us prove the regularity results.

First, as Assumption 4.1.1 ensures that the operator H_x has a discrete spectrum, let us define the set of its eigenvalues $(\lambda_k)_{k \geq 0}$ such that :

$$\lambda_{k+1} \geq \lambda_k \geq \dots \geq \lambda_0 > 0$$

and the associated eigenfunctions chosen so as to form a Hilbert basis of $L^2(\mathbb{R}^2)$, and $H^2(\mathbb{R}^2)$:

$$\forall k \geq 0, H_x e_k = \lambda_k e_k.$$

Projecting equation (4.2.8)-(4.2.9) over the $(e_k)_{k \geq 0}$ basis with

$$u = \sum_{k \geq 0} u_k \text{ where } u_k := \langle u, e_k \rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)} e_k$$

and

$$f = \sum_{k \geq 0} f_k \text{ where } f_k := \langle f, e_k \rangle_{L^2(\mathbb{R}^2)} e_k$$

yields : for all $k \geq 0$

$$-\partial_z u_k^\varepsilon + \varepsilon^2 \lambda_k u_k^\varepsilon = f_k, \quad z \in (0, 1) \quad (4.A.1)$$

$$u_k^\varepsilon(x, 0) = u_k^\varepsilon(x, 1) = 0. \quad (4.A.2)$$

Multiplying equation (4.A.1) by $\overline{u_k^\varepsilon}$ and integrating by part on Ω yields :

$$\|\partial_z u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 + \varepsilon^2 \lambda_k \|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} f_k \overline{u_k^\varepsilon} dx dz \leq \|f_k\|_{L^2(\Omega)} \|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}. \quad (4.A.3)$$

However, as $u_k^\varepsilon \in H_0^1(\Omega)$, the Poincaré inequality gives :

$$\|\partial_z u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \geq \|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}$$

Combined with (4.A.3), this leads to :

$$\|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} + \varepsilon^2 \lambda_k \|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq \|f_k\|_{L^2(\Omega)}$$

and therefore,

$$\forall k \geq 0, \quad \|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq \|f_k\|_{L^2(\Omega)} \quad (4.A.4)$$

$$\|u^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq \|f\|_{L^2(\Omega)} \quad (4.A.5)$$

$$\forall k \geq 0, \quad \varepsilon^2 \lambda_k \|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq \|f_k\|_{L^2(\Omega)}. \quad (4.A.6)$$

Finally, equation (4.A.1) gives

$$\partial_z^2 u_k^\varepsilon = -f_k + \varepsilon^2 \lambda_k u_k^\varepsilon,$$

combined with (4.A.4) and (4.A.6), this yields

$$\forall k \geq 0, \quad \|\partial_z^2 u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|f_k\|_{L^2(\Omega)} \quad (4.A.7)$$

and readily leads to

$$\|\partial_z^2 u^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|f\|_{\mathcal{X}} \quad (4.A.8)$$

Since $f \in \mathcal{X}$, then $H_x f \in L^2(\Omega)$ and $\partial_z^2 f \in L^2(\Omega)$, and so :

$$\|H_x f\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{k \geq 0} \lambda_k^2 \|f_k\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|f\|_{\mathcal{X}}^2 \quad (4.A.9)$$

and

$$\|\partial_z^2 f\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{k \geq 0} \|\partial_z^2 f_k\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|f\|_{\mathcal{X}}^2. \quad (4.A.10)$$

Combining (4.A.4) and (4.A.9) gives :

$$\sum_{k \geq 0} \lambda_k^2 \|u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \sum_{k \geq 0} \lambda_k^2 \|f_k\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|f\|_{\mathcal{X}}^2$$

and, with (4.A.8) and (4.A.5), this yields

$$\|u^\varepsilon\|_x \leq C\|f\|_x \quad (4.A.11)$$

which proves (4.2.10).

In order to prove (4.2.11), note that, thanks to (4.A.7),

$$\sum_{k \geq 0} \lambda_k^2 \|\partial_z^2 u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C \sum_{k \geq 0} \lambda_k^2 \|f_k\|_{L^2(\Omega)} = C \|H_x f\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C \|f\|_x^2.$$

which reads

$$\|H_x(\partial_z^2 u)\|_{L^2(\Omega)} \leq C\|f\|_x. \quad (4.A.12)$$

However, equation (4.A.1) gives

$$\forall k \geq 0, \quad -\partial_z^4 u_k^\varepsilon = -\partial_z^2 f_k + \varepsilon^2 \lambda_k \partial_z^2 u_k^\varepsilon.$$

Therefore,

$$\|\partial_z^4 u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C \|\partial_z^2 f_k\|_{L^2(\Omega)}^2 + C \varepsilon^4 \lambda_k^2 \|\partial_z^2 u_k^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

By summation over k , and using (4.A.12) yields

$$\|\partial_z^4 u^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)} \leq C\|f\|_x. \quad (4.A.13)$$

Combining (4.A.7), (4.A.12) and (4.A.13) ends the proof of (4.2.11). \square

Acknowledgement. The author was supported by the Agence Nationale de la Recherche, ANR project QUATRRAIN. She wishes to warmly thank Florian Méhats for fruitful discussions on this work.

Bibliographie

- [1] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Méhats, F. *Time averaging for the strongly confined nonlinear Schrödinger equation, using almost periodicity.*, J. Diff. Eq. **245** (2008), no 1, 154-200
- [2] Ben Abdallah, N. ; Castella, F. ; Delebecque-Fendt, F. ; Méhats, F. *The strongly confined Schrödinger-Poisson system for the transport of electrons in a nanowire.*, SIAM J. Appl. Math. **69** (2009), no. 4, 1162-1173.
- [3] Ben Abdallah, N. ; Méhats, F. ; Pinaud, O. *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement*, SIAM J. Math. Anal, **36** (2005), pp. 986-1013.
- [4] Ben Abdallah, N. ; Méhats, F. ; Schmeiser, C. ; Weishäupl, R. M. *The nonlinear Schrödinger equation with strong anisotropic harmonic potential*, SIAM J. Math. Anal. **37** (2005), no. 1, 189–199.
- [5] Bidégaray-Fesquet, B. ; Castella, F. ; Degond, P. *From Bloch model to the rate equations*, Disc. Cont. Dyn. Sys., Vol. 11, N. 1, 1-26 (2004).
- [6] Bidégaray-Fesquet, B. ; Castella, F. ; Dumas, E. ; Gisclon M. *From Bloch model to the rate equations II : the case of almost degenerate energy levels*, Math. Mod. Meth. Appl. Sci., Vol. 14,1785-1817 (2004).
- [7] Carles, R. ; Markowich, P. A. ; Sparber, C. *On the Gross-Pitaevskii equation for trapped dipolar quantum gases*. Nonlinearity **21** (2008), no. 11, 2569–2590.
- [8] Castella, F. *L^2 solutions to the Schrödinger-Poisson system : Existence, uniqueness, time behaviour, and smoothing effects*, Math. Models Methods Appl. Sci., **7** (1997), pp. 1051-1083.
- [9] Cazenave, T. *Semilinear Schrödinger Equations*, Lecture Notes AMS, (2003)
- [10] Castella, F. ; Degond, P. ; Goudon, T. *Diffusion dynamics of classical systems driven by an oscillatory force*, J. Stat. Phys., Vol. 124, N. 2-4, 913-950 (2006).
- [11] Castella, F. ; Degond, P., Goudon, T. *Large time dynamics of a classical system subject to a fast varying force*, Comm. Math. Phys., Vol. 276, N. 1, 23-49 (2007).
- [12] da Costa, R. C. T. *Quantum mechanics for a constraint particle*, Phys. Rev. A **23** (1981), no. 4, 1982–1987.

- [13] Delebecque-Fendt, F. ; Méhats, F. *Effective mass theorem for a bidimensional electron gas under a strong magnetic field*, to appear in Com. Math. Phys.
- [14] Duclos, P. ; Exner, P. *Curvature-induced bound states in quantum waveguides in two and three dimensions*. Rev. Math. Phys. **7** (1995), no. 1, 73–102.
- [15] Ferry, D.K. ; Goodnick, S.M. *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997.
- [16] Froese, R. ; Herbst, I. *Realizing holonomic constraints in classical and quantum mechanics*, Comm. Math. Phys. **220** (2001), no. 3, 489–535.
- [17] Grisvard, P. *Caractérisation de quelques espaces d'interpolation*, Arch. Rational Mech. Anal., Vol. 25, 40-63 (1967).
- [18] Lions, P.L. ; Magenes, E. ; *Problèmes aux limites non homogènes et applications.*, Vol. 1, Travaux et Recherches Mathématiques, Dunod, bf 17, Paris (1968)
- [19] Lochak, P. ; Meunier, C. *Multiphase averaging for classical systems. With applications to adiabatic theorems*, Applied Mathematical Sciences, Vol. 72. Springer-Verlag,1988.
- [20] Levitan, B.M. ; Zhikov, V.V. *Almost periodic functions and differential equations*, Cambridge University Press,1982.
- [21] Pinaud, O. *Adiabatic approximation of the Schrödinger-Poisson system with a partial confinement : the stationary case*, J. Math. Phys. **45** (2004), no. 5, 2029–2050.
- [22] Reed, M. ; Simon, B. *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. 1–4, Academic Press, New York, San Francisco, London, 1972–1979.
- [23] Sanders, J.A. ; Verhulst, F. *Averaging Methods in Nonlinear Dynamical Systems*, Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Tokyo (1985).
- [24] Schochet, S. *Fast singular limits of hyperbolic PDEs*, J. Diff. Eq., Vol.114, N. 2, 476-512 (1974).
- [25] Teufel, S. *Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics*, Lecture Notes in Mathematics 1821, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2003.

Deuxième partie

Simulation numérique du transport d'un gaz quantique stationnaire dans un nanofil

Chapitre 5

Modélisation du transport d'un gaz quantique stationnaire dans un nanofil

Sommaire

5.1	Description du dispositif à deux guides d'onde	177
5.1.1	Principe général des dispositifs à guides d'onde	177
5.1.2	Principe des systèmes ouverts	178
5.1.3	Présentation du dispositif	179
5.2	Modèle de transport quantique	181
5.2.1	Modèle de transport quantique stationnaire	181
5.2.2	Modélisation des effets électrostatiques	182
5.2.3	Calcul de densité	183
5.3	Mise en équations du problème	184
5.3.1	Équation de Schrödinger dans les guides, conditions entrantes	184
5.3.2	Équation de Schrödinger dans la zone active	187
5.3.3	Calculs de densité et de courant	189

Le chapitre qui suit sert d'introduction à cette deuxième partie. On y propose un modèle de transport quantique stationnaire dans un nanofil dans le but de le simuler dans les chapitres suivants.

Nota Bene : Les références pour les trois chapitres de cette partie étant similaires, on les a regroupées à la fin de la partie.

Cette section est vouée à la simulation effective du transport d'un gaz quantique dans un nanocomposant de type nanofil quantique. Pour cela, dans un premier chapitre introductif aux modèles étudiés, on commence par décrire le dispositif à guide d'onde qui nous occupera dans cette deuxième partie de la thèse. Ensuite, on propose un modèle de transport quantique pour ce dispositif, ce qui nous mène à la mise en équations du problème.

Dans une deuxième partie, on propose un algorithme de résolution numérique du transport stationnaire des électrons dans la zone active.

Dans une dernière partie, on présente une simulation numérique d'une partie spécifique du dispositif formée par les réservoirs d'électrons. Cela nous permet alors de présenter une manière de simuler numériquement l'équilibre de la source et du drain et ainsi de donner une méthode de calcul numérique des *potentiels chimiques* associés à ces équilibres.

5.1 Description du dispositif à deux guides d'onde

5.1.1 Principe général des dispositifs à guides d'onde

Un dispositif à guides d'ondes quantique est en général un système dans lequel des ondes électroniques confinées dans les directions transverses d'un guide peuvent entrer ou sortir d'une zone privilégiée, appelée *zone active* du dispositif par l'intermédiaire d'un ou de plusieurs guides d'onde. Les dimensions de tels dispositifs étant de l'ordre de la longueur d'onde des électrons, la description du transport électronique dans de tels systèmes est nécessairement *quantique*. Dans cette partie, on s'intéresse à un dispositif simple, cylindrique, constitué d'une *zone active*, reliée à *deux réservoirs d'électrons* que l'on appellera *source* et *drain* par l'intermédiaire de *deux guides d'ondes*.

Tout d'abord, les électrons qui participent au transport électronique sont initialement stockés dans des réservoirs qui se situent aux extrémités du dispositif. Les réservoirs sont supposés être à l'équilibre thermodynamique, équilibre qui est garanti par les collisions inélastiques que subissent les électrons. A cet équilibre thermodynamique est associée une constante, que l'on appelle *potentiel chimique du réservoir*. On applique par ailleurs une différence de potentiel entre les deux réservoirs (notée V_{DS}) qui favorise l'injection d'électrons dans les guides d'ondes et permet ainsi d'amorcer le transport électronique hors des réservoirs.

Le potentiel électrostatique total (potentiel appliqué + potentiel d'interaction électrostatique) est responsable de la géométrie du transport des électrons. En effet, comme la probabilité de présence des électrons est d'autant plus faible que le potentiel électrostatique est élevé, les régions de fort potentiel électrostatique correspondent à de faibles densités d'électrons. Dans les guides d'ondes, on suppose que le potentiel électrostatique ne varie que dans les directions transverses. Ainsi, les électrons sont confinés dans les directions transverses et le transport électronique se fait dans la

direction longitudinale des guides jusqu'à entrer dans la zone active du dispositif.

Dans la zone active, on fait l'hypothèse que le transport des électrons est *ballistique*, c'est à dire qu'il se fait sans collision, approximation raisonnable dans les cas où la température est suffisamment basse ou si les électrons sont suffisamment confinés. Enfin, les électrons sont émis dans les guides d'ondes en accord avec la statistique d'un gaz de fermion caractérisée par la distribution d'énergie de Fermi-Dirac. On obtient ainsi dans la zone active un mélange statistique d'états, et la densité électronique dans la zone active s'écrit alors comme la somme de toutes les configurations possibles d'états d'énergie E dans les guides (on verra plus loin comment s'écrit la densité des électrons dans la zone active).

5.1.2 Principe des systèmes ouverts

Pour simuler numériquement ce problème de transport électronique ainsi que les interactions électrostatiques entre les électrons, on représente les électrons par le couple formé de la fonction d'onde ψ et du potentiel d'interaction électrostatique que l'on note V . On modélise le transport confiné des électrons par une équation de Schrödinger-Poisson posée dans l'ensemble du système formé par les réservoirs, les guides d'ondes et la zone active. Si ce système a été beaucoup étudié (voir par exemple [11, 13, 3, 19, 20, 21]), les cas d'études portent en général sur des systèmes où la zone active est *isolée*.

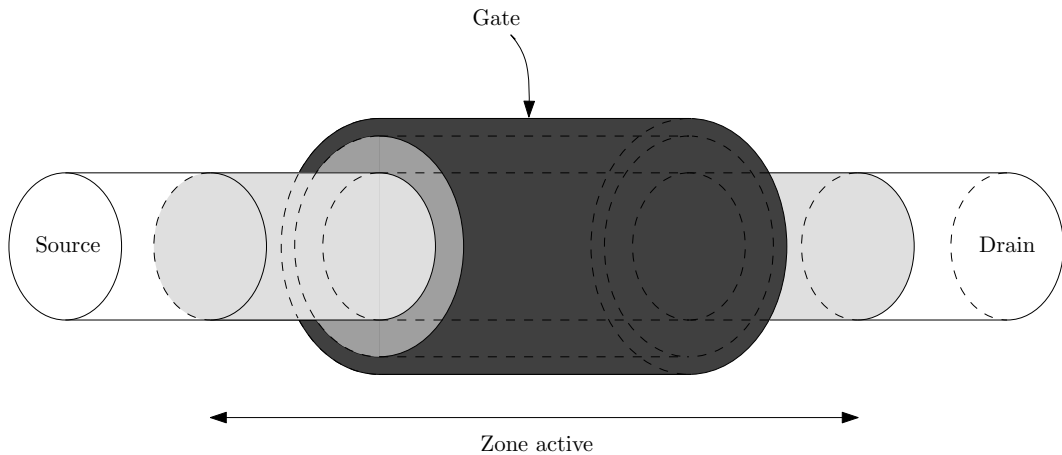
Ici, si on étudie le système sur une zone d'étude qui englobe la zone active, les réservoirs et les guides d'ondes, on limite en revanche le domaine de calcul effectif par la mise en place de conditions aux limites au niveau des interfaces entre la zone active et les guides d'ondes. Ces conditions aux limites nous permettent alors de prendre en compte les flux entrants et sortants de la zone active. Cette problématique a déjà fait l'objet de plusieurs études, notamment dans des cas dépendant du temps où plusieurs travaux ont permis la mise en place de conditions *absorbantes* au bord du domaine d'étude pour permettre la prise en compte de *flux sortants*. Ces conditions absorbantes simulent en effet la "sortie de la zone active" de ces flux afin d'éviter les réflexions artificielles au bord du domaine de calcul. On renvoie pour cela le lecteur aux références [10, 4, 5, 2, 1]. La prise en compte de flux entrants est cruciale dans les applications à l'électronique, car ce sont ces flux entrants qui permettent la mise en place du transport électronique dans la zone active. Dans [8], les auteurs proposent, toujours dans le cas dépendant du temps, la mise en place de conditions aux bords dites *transparentes* qui prennent en compte de tels flux entrants. Néanmoins, l'obtention de telles conditions transparentes requièrent, dans le cas dépendant du temps, l'introduction d'un opérateur *Dirichlet-to-Neumann* qui relie la fonction d'onde et sa dérivée aux bords par l'intermédiaire d'une demi dérivée temporelle.

Dans ce travail, on décide de se ramener à un transport électronique stationnaire. On utilise pour mettre en place des conditions transparentes au bord une idée de base commune aux cas stationnaires et instationnaires. Elle consiste à faire l'hypothèse que les sources sont stationnaires, et à résoudre explicitement le problème dans le domaine

extérieur au domaine d'étude (ici dans les guides d'ondes), supposé stationnaire. Une fois ce calcul explicite effectué, on "raccorde" au bord grâce à une relation entre la fonction d'onde et ses dérivées spatiales obtenue dans les guides sous cette hypothèse. Ainsi, on utilise la méthode dite QTBM (*Quantum Transmitting Boundary Method*), initialement développée dans [14] puis étudiée mathématiquement dans [7, 6] et on aboutit à des conditions au bord de type *Robin Fourier* pour la fonction d'onde.

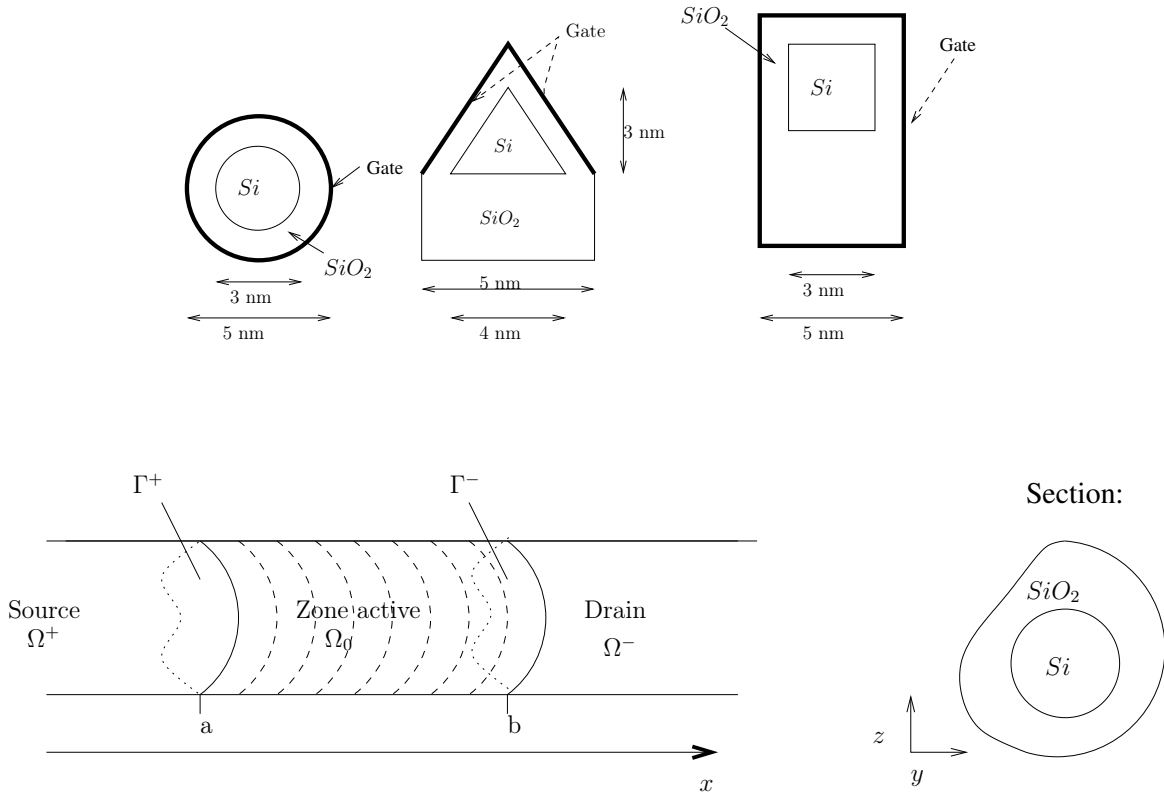
5.1.3 Présentation du dispositif

Le dispositif modèle que nous considérons occupe un volume Ω de \mathbb{R}^3 constitué de trois parties : le guide d'onde relié à la source (que l'on appellera "source" par un abus de langage) Ω^+ , la zone active Ω_0 et le guide d'onde relié au drain (que l'on appellera drain) Ω^- . On note Γ^+ et Γ^- les interfaces entre Ω^+ et Ω_0 et entre Ω_0 et Ω^- respectivement.



On suppose que leur réunion $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega_0 \cup \Omega^-$ est cylindrique, de section Σ et de bord Γ , transportée le long d'un segment $[a, b]$. On s'intéresse ici à un composant de type MOSFET (**M**etal **O**xide **S**emiconductor **F**ield **E**ffect **T**ransistor) dans lequel le confinement à l'intérieur du cylindre est obtenu par la superposition de matériaux de bandes de conductions différentes : le Silicium Si et le dioxyde de Silicium SiO_2 . On peut citer d'autres exemples de matériaux issus de cette technologie comme les dispositifs "split-gate" AlGaAs/GaAs étudiés dans [23]. La section Σ se divise ainsi en deux sous-domaines correspondant à deux composants physiques différents : Σ_1 à l'intérieur composé de Silicium Si et Σ_2 à l'extérieur, composé d'oxyde de silicium SiO_2 . On s'intéresse successivement à des sections carrées, puis triangulaires et enfin circulaires.

FIG. 5.1 – Les différentes sections étudiées



On fera enfin les deux hypothèses suivantes. Tout d'abord, la région Ω peut admettre des zones dopées. Par ailleurs, la probabilité de trouver un électron en dehors du domaine Ω est supposée nulle (zone de fort potentiel).

La variable d'espace se décompose comme suit : $(x, z) \in \mathbb{R} \times \Sigma$, de manière à respecter la structure tensorielle du domaine Ω :

- $x \in \mathbb{R}$ est la coordonnée longitudinale, de transport. La source est localisée dans $x \leq a$, le drain dans $x \geq b$ et la zone active $a < x < b$.
- $z = (z_1, z_2) \in \Sigma \subset \mathbb{R}^2$ désignent les coordonnées transverses, de confinement.

Enfin, les électrodes des guides (source et drain) sont électriquement reliées à celles de la zone active (la grille qui l'entoure, appelée "Gate" sur la figure). Le courant I_{DS} créé entre la source et le drain est commandé par une tension, que l'on désignera par V_{GS} appliquée entre la source et la grille de la zone active. Ici, on considère le cas d'un MOSFET à canal N, c'est-à-dire que le courant entre la source et le drain provient du déplacement des électrons (à opposer au MOSFET à canal P dans lequel le courant provient du déplacement des trous).

5.2 Modèle de transport quantique

5.2.1 Modèle de transport quantique stationnaire

Pour pouvoir déterminer la densité des électrons dans la zone active ainsi que le courant passant à travers le composant, on est amené à définir précisément et à déterminer les états d'énergie possibles E , les fonctions d'ondes Ψ_E qui leur sont associées, et à calculer les valeurs des potentiels chimiques associés à la source et au drain.

Dans ce travail, comme nous l'avons expliqué en introduction, on limite notre étude aux états quantiques des électrons pour lesquels la densité est *stationnaire* : elle ne dépend pas du temps. Ces états peuvent s'écrire sous la forme

$$\Psi(t, \mathbf{x}) := \Psi(\mathbf{x}) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right),$$

où la fonction d'onde $\Psi(t, \mathbf{x})$ d'un électron dans un potentiel donné $U(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\Psi(t, \mathbf{x}) = \hat{H}\Psi(t, \mathbf{x})$$

avec \hat{H} l'opérateur Hamiltonien

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{x}) \quad (5.2.1)$$

et m la masse de la particule. Dès lors, les fonctions $\Psi(\mathbf{x})$ sont alors solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}).$$

On fait ici *l'approximation de la masse effective*, habituelle pour le transport d'électrons dans les semi-conducteurs. Dans le cadre de cette approximation, on modélise l'action du potentiel cristallin périodique en remplaçant dans toutes les formules la masse des particules dans le vide par une masse effective. Celle-ci est alors relative aux différents matériaux conducteurs et aux différentes bandes de conduction considérées. Adoptons la notation (m_x, m_1, m_2) qui définit les masses effectives dans les directions x, z_1 et z_2 . L'opérateur Hamiltonien \hat{H} devient alors

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_x(z)}\partial_x^2 - \frac{\hbar^2}{2}\partial_1\left(\frac{1}{m_1(z)}\partial_1\right) - \frac{\hbar^2}{2}\partial_2\left(\frac{1}{m_2(z)}\partial_2\right). \quad (5.2.2)$$

Les masses effectives dépendent des directions z du fait de la transition entre la couche d'oxyde et le silicium.

Par ailleurs, dans le cas du Silicium qui nous intéresse ici, il existe une anisotropie dans les extrema de la bande de conduction qui conduit à définir pour les électrons

une masse effective longitudinale m_ℓ et une masse effective transverse m_t . Les masses effectives dépendent de la nature du semi-conducteur dans la direction z . Nous noterons m_{SiO_2} la masse effective des électrons dans l'oxyde SiO_2 . Nous obtenons alors 3 types de résonances dans le cas du Silicium :

- une configuration (m_t, m_t, m_ℓ) qui définit une masse effective m_t dans la direction de transport x et les masses m_t et m_ℓ dans les directions z_1 et z_2 ;
- une configuration (m_ℓ, m_t, m_t) qui définit une masse effective m_t dans les directions z_1, z_2 et m_ℓ dans la direction de transport x ;
- une configuration (m_t, m_ℓ, m_t) qui définit une masse effective m_t dans la direction de transport x et les masses m_ℓ et m_t dans les directions z_1 et z_2 .

Dans tous nos calculs numériques présentés dans les deux chapitres suivants, on fera le choix d'une seule configuration, pour simplifier, en prenant la dernière : (m_t, m_ℓ, m_t) . On sera amené à résoudre trois types d'équations de Schrödinger relatives aux six ellipsoïdes d'énergie E donnée. Nous pouvons alors définir les fonctions d'ondes par

- $\psi^{t\ell}(x, z)$ associé à une configuration (m_t, m_t, m_ℓ)
- $\psi^{\ell t}(x, z)$ associé à une configuration (m_ℓ, m_t, m_t)
- $\psi^{tt}(x, z)$ associé à une configuration (m_t, m_ℓ, m_t) .

Dans le cas de l'Oxyde, m_x, m_1, m_2 sont égaux à m_{SiO_2} . La densité électronique s'obtient à partir de

$$n = 2n_e(m_t, m_t, m_\ell) + 2n_e(m_\ell, m_t, m_t) + 2n_e(m_t, m_\ell, m_t).$$

5.2.2 Modélisation des effets électrostatiques

La densité de charge d'espace est reliée au déséquilibre local existant entre les donneurs ionisés N_D et la densité électronique libre n . On obtient alors

$$\rho = q(N_D - n),$$

où q désigne la charge élémentaire. Dans la zone active, le potentiel électrostatique V induit par les charges d'espace est alors solution de l'équation de Poisson

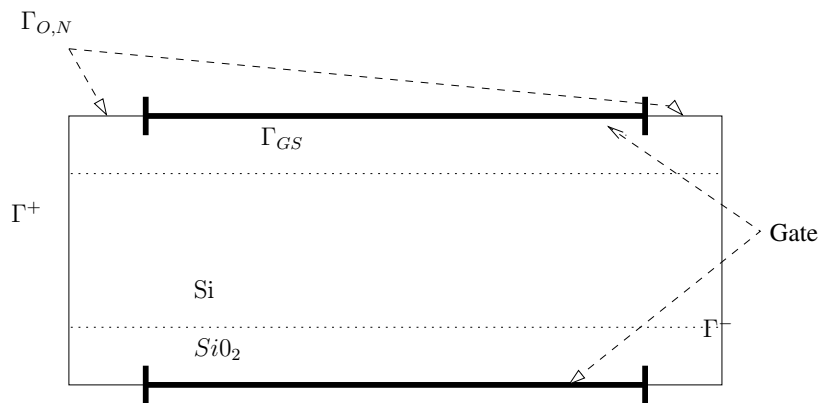
$$-\nabla (\epsilon_r \nabla V) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho \quad \text{dans } \Omega_0 \quad (5.2.3)$$

+ conditions au bord décrites ci-dessous

où ϵ_0 est la permittivité électrique du vide, et ϵ_r est la constante diélectrique relative de chaque matériau semi-conducteur : $\epsilon_r \text{ Si} = 11.9$ pour le Silicium et $\epsilon_r \text{ SiO}_2 = 3.9$ pour l'oxyde.

Dans le problème modèle, nous définissons les conditions aux bords pour le potentiel électrostatique sur les bords $\partial\Omega_0$ du type :

- Conditions de Dirichlet homogènes sur la partie notée Γ_{GS} du bord $\Gamma \times (a, b)$ recouverte par les grilles qui correspondent à la différence tension V_{GS} appliquée entre les électrodes de la source et la grille de la zone active
- Conditions de Neumann homogène sur le reste du bord noté Γ_N .
- Sur les bords Γ^+ et Γ^- , plusieurs options sont possibles. On peut ainsi imposer des conditions de Dirichlet avec un potentiel précalculé dans les guides (voir Chapitre 6), des conditions de Neumann ou une combinaison des deux dans une condition de type Robin-Fourier (voir pour cela [18])



Afin de modéliser d'une part les interactions électrostatiques entre les électrons et d'autre part les interactions entre les électrons et le cristal semi-conducteur, on définit le potentiel U intervenant dans l'écriture du Hamiltonien (5.2.1) sous la forme :

$$U(x, z) := -qV(x, z) + qV_{\text{Off}} \quad (5.2.4)$$

où V_{Off} dépend exclusivement du matériau, q désigne la charge élémentaire de l'électron, et V est solution de l'équation de Poisson donnée dans le domaine d'étude par (5.2.3).

5.2.3 Calcul de densité

Les électrons sont émis par les réservoirs dans les deux guides d'ondes avec la statistique d'un gaz de fermions, caractérisée par la distribution d'énergie de Fermi-Dirac et du potentiel chimique associé à chacun des réservoirs. En présence d'un mélange statistique d'états Ψ_E , d'énergie E , la densité électronique pour un potentiel électrostatique donné V peut s'écrire de manière générale sous la forme d'une somme sur les deux guides de toutes les configurations possibles d'énergie E :

$$n(x, z) := 2 \sum_{+,-} \sum_{\{E\}} |\Psi_E(x, z)|^2 f_{FD}(E - q\mu^\pm). \quad (5.2.5)$$

Ici, $|\Psi_E(x, z)|^2$ est la densité de probabilité de présence de l'électron d'énergie E en (x, z) , le coefficient 2 représente le facteur de spin de l'électron, μ^\pm est le potentiel chimique associé à la source + ou au drain -. Enfin, la probabilité d'occupation d'un état d'énergie E est donnée, dans le cadre de la thermostatistique de Fermi-Dirac par la distribution de Fermi-Dirac

$$f_{FD}(E - q\mu) = \frac{1}{1 + \exp((E - q\mu)/k_B T)} \quad (5.2.6)$$

où μ désigne le niveau de Fermi, k_B la constante de Boltzmann, et T la température. Notons enfin que, suivant des différentes configurations d'énergies possibles, la somme sur les énergie E peut se trouver être une somme continue et donc une intégrale sur E .

5.3 Mise en équations du problème

5.3.1 Équation de Schrödinger dans les guides, conditions entrantes

Le système que l'on cherche à résoudre dans Ω_0 s'écrit sous la forme d'une collection d'équations de Schrödinger avec conditions entrantes en Γ^+ et Γ^-

$$(H + U(x, z)) \Psi_E = E \Psi_E \quad (x, z) \in \Omega_0 \quad (5.3.1)$$

$$\Psi_E = 0 \quad (x, z) \in \Gamma_0 = \Omega_0 \cap \Gamma \quad (5.3.2)$$

$$+ \text{conditions aux bords entrantes} \quad (x, z) \in \Gamma^+ \cup \Gamma^-.$$

Le but du problème est alors de déterminer des conditions aux bords entrantes sur chacun des bords Γ^+ et Γ^- . Le dispositif étudié ici est un guide d'onde avec deux directions de confinement et une direction de transport. Ainsi, d'après la classification présentée dans [10], on s'attend à utiliser une décomposition sur les fonctions propres du Hamiltonien transverse $H_z + U(x, z)$ avec

$$H_z := -\frac{\hbar^2}{2} \partial_1 \left(\frac{1}{m_1(z)} \partial_1 \right) - \frac{\hbar^2}{2} \partial_2 \left(\frac{1}{m_2(z)} \partial_2 \right). \quad (5.3.3)$$

Une telle décomposition s'écrit alors

$$\Psi_E(x, z) = \sum_i \phi_i(x) \chi_i(x, z)$$

où (E_i, χ_i) désignent les éléments propres de H_z .

Pour mettre en place des conditions transparentes, l'idée principale est de se servir de l'hypothèse simplificatrice selon laquelle le potentiel U ne dépend que de la variable z pour résoudre (5.3.1)-(5.3.2) dans la source et dans le drain. On notera respectivement $U^+(z)$ et $U^-(z)$ les potentiels U dans la source et le drain.

Plaçons nous, pour simplifier les notations, dans la source. On suppose que la section Σ ne dépend pas de x , et on la note alors Σ . On cherche les fonctions propres généralisées de l'opérateur $H + U(z)$, c'est-à-dire les couples (E, Ψ_E) solutions du problème suivant :

$$(H + U(z)) \Psi_E(x, z) = E \Psi_E(x, z) \quad (x, z) \in \Omega^+ \quad (5.3.4)$$

$$\Psi_E(x, z) = 0 \quad (x, z) \in \Gamma \quad (5.3.5)$$

$$+ \Psi_E(x, z) \text{ bornée} \quad (5.3.6)$$

Pour cela, considérons une base orthonormée de $L^2(\Omega^+)$ de fonctions propres notées χ_m^+ du Hamiltonien transverse $H_z + U^+(z)$ avec des conditions de Dirichlet homogènes au bord.

$$H_z \chi_m^+(z) + U^+(z) \chi_m^+(z) = E_m^+ \chi_m^+(z) \quad z \in \Sigma \quad (5.3.7)$$

$$\chi_m^+(z) = 0 \quad (x, z) \in \Gamma$$

$$\int_{\Gamma^+} \chi_m^+(z) \chi_p^+(z) dz = \delta_{m,p}.$$

Ici E_m^+ représente la valeur propre réelle transverse associée à la fonction propre χ_m^+ , et $\delta_{m,p}$ le symbole de Kronecker. On cherche alors Ψ_E sous sa forme décomposée sur cette base :

$$\Psi_E(x, z) = \sum_{m=1}^{+\infty} \phi_m^+(x) \chi_m^+(z). \quad (5.3.8)$$

Dans ce cadre, ϕ_m^+ désigne la fonction d'onde longitudinale définie sur \mathbb{R}^+ et qui est associée au mode transverse m .

On ajoute au système (5.3.4)-(5.3.5) la condition à l'infini suivante :

Hypothèse 5.3.1. *La seule onde qui vient de la source (resp du drain) à l'infini dans le i_0 -ième mode, avec le vecteur d'onde k_0 est $e^{ik_0 x} \chi_{i_0}^+(z)$ (resp $e^{-ik_0 x} \chi_{i_0}^-(z)$).*

En insérant l'expression (5.3.8) dans (5.3.4) et en projetant sur le mode m , on obtient l'équation suivante portant sur ϕ_m^+ , E étant fixée :

$$-\frac{d^2 \phi_m^+}{dx^2} - \left[\frac{2}{\hbar^2} \sum_{j \geq 1} (E - E_j^+) \int_{\Sigma} m_x(z) \chi_m^+(z) \chi_j^+(z) dz \right] \phi_j^+ = 0 \quad (5.3.9)$$

L'équation fait apparaître des termes non diagonaux pour $j \neq m$. En fait, dans notre étude, on ne prend en compte que les coefficients diagonaux.

Hypothèse 5.3.2. *On suppose ainsi que, si $m \neq j$,*

$$\int_{\Sigma} m_x(z) \chi_m^+(z) \chi_j^+(z) dz \ll \int_{\Sigma} m_x(z) |\chi_m^+(z)|^2 dz := \overline{m_x} \text{ indépendant de } x.$$

Grâce à cette hypothèse, l'équation (5.3.9) devient :

$$-\frac{d^2\phi_m^+}{dx^2} - \left[\frac{2}{\hbar^2} (E - E_m^+) \int_{\Sigma} m_x(z) |\chi_m^+(z)|^2 dz \right] \phi_m^+ = 0 \quad (5.3.10)$$

Définissant à présent le nombre d'onde $k_m^+(E)$ par

$$k_m^+(E) = \sqrt{\frac{2\overline{m}_x}{\hbar^2} |E_m^+ - E|}, \quad (5.3.11)$$

plusieurs cas apparaissent.

- Si $E < E_m^+$, alors $\phi_m(x) = \alpha_m^+ e^{-k_m^+ x} + \beta_m^+ e^{k_m^+ x}$. Or, ϕ_m^+ est bornée sur $(-\infty, a)$ (car Ψ_E^+ est bornée dans la source), donc nécessairement $\alpha_m^+ = 0$, et alors

$$\phi_m^+(x) = \beta_m^+ e^{k_m^+ x}$$

- Si $E > E_m^+$, alors $\phi_m(x) = \alpha_m^+ e^{-ik_m^+ x} + \gamma_m^+ e^{ik_m^+ x}$. D'après l'hypothèse de modélisation 5.3.1, la seule onde qui vient de l'infini de la source est $e^{ik_{i_0} x} \chi_{i_0}^+(z)$, c'est à dire que $\gamma_m^+ = \delta_{i_0, m}$, et donc

$$\phi_m^+(x) = \delta_{i_0, m} e^{ik_m^+ x} + \alpha_m^+ e^{-ik_m^+ x}.$$

Posons maintenant

$$I^+(E) = \sup \{ m \geq 1, E > E_m^+ \}$$

avec ces notations, en regroupant les différents cas ensemble, on obtient :

$$\phi_m^+(x) = \left(\delta^+ \delta_{i_0, m} e^{ik_m^+ x} + \alpha_m^+ e^{-ik_m^+ x} \right) \delta_{m \leq I^+(E)} + \beta_m^+ e^{k_m^+ x} \delta_{m \geq I^+(E)+1}. \quad (5.3.12)$$

La même résolution par décomposition sur les modes propres dans le drain Ω^- donne

$$\phi_m^-(x) = \left(\delta^- \delta_{i_0, m} e^{-ik_m^- x} + \alpha_m^- e^{ik_m^- x} \right) \delta_{m \leq I^-(E)} + \beta_m^- e^{-k_m^- x} \delta_{m \geq I^-(E)+1} \quad (5.3.13)$$

où δ^+ (resp δ^-) vaut 1 si l'on a injection à l'infini par la source (resp. par le drain) d'une onde sur le mode m , et avec des notations +/- évidentes.

A présent que l'on connaît les fonctions ϕ_m^+ et ϕ_m^- à deux constantes près (α_m^\pm et β_m^\pm), on écrit leurs traces ainsi que celles de leurs dérivées en a et b , puis on élimine les deux constantes grâce au système ainsi obtenu.

Bilan en $x = a$ (interface avec la source) :

$$\phi_m^+(a) = \left(\delta^+ \delta_{i_0, m} e^{ik_m^+ a} + \alpha_m^+ e^{-ik_m^+ a} \right) \delta_{m \leq I^+(E)} + \beta_m^+ e^{k_m^+ a} \delta_{m \geq I^+(E)+1} \quad (5.3.14)$$

$$\frac{d\phi_m^+}{dx}(a) = ik_m^+ \left(\delta^+ \delta_{i_0, m} e^{ik_m^+ a} - \alpha_m^+ e^{-ik_m^+ a} \right) \delta_{m \leq I^+(E)} + k_m^+ \beta_m^+ e^{k_m^+ a} \delta_{m \geq I^+(E)+1} \quad (5.3.15)$$

De même, le bilan en b (interface avec le drain) donne :

$$\phi_m^-(b) = \left(\delta^- \delta_{i_0, m} e^{-ik_m^- b} + \alpha_m^- e^{ik_m^- b} \right) \delta_{m \leq I^-(E)} + \beta_m^- e^{-k_m^- b} \delta_{m \geq I^-(E)+1} \quad (5.3.16)$$

$$\frac{d\phi_m^-}{dx}(b) = ik_m^- \left(-\delta^- \delta_{i_0, m} e^{-ik_m^- b} + \alpha_m^- e^{ik_m^- b} \right) \delta_{m \leq I^-(E)} - k_m^- \beta_m^- e^{-k_m^- b} \delta_{m \geq I^-(E)+1}. \quad (5.3.17)$$

En combinant les équations (5.3.14), (5.3.15), (5.3.16), (5.3.17), on obtient les conditions aux limites pour ϕ_m^+ et ϕ_m^- de type Robin-Fourier suivantes :

$$\frac{d\phi_m^+}{dx}(a) = \left(-ik_m^+ \phi_m^+(a) + 2ik_m^+ \delta^+ \delta_{i_0, m} e^{ik_m^+ a} \right) \delta_{m \leq I^+(E)} + k_m^+ \phi_m^+(a) \delta_{m \geq I^+(E)+1} \quad (5.3.18)$$

$$\frac{d\phi_m^-}{dx}(b) = \left(ik_m^- \phi_m^-(b) - 2ik_m^- \delta^- \delta_{i_0, m} e^{-ik_m^- b} \right) \delta_{m \leq I^-(E)} - k_m^- \phi_m^-(b) \delta_{m \geq I^-(E)+1} \quad (5.3.19)$$

5.3.2 Équation de Schrödinger dans la zone active

Maintenant que l'on a obtenu les conditions limites en a et en b pour les fonctions d'ondes longitudinales, on cherche les solutions de

$$H\Psi(x, z) + U(x, z)\Psi_E(x, z) = E\Psi_E(x, z) \quad (5.3.20)$$

dans la zone active Ω_0 où, cette fois, U dépend de x . Cela entraîne un important changement dans la stratégie, puisqu'à présent les fonctions propres de l'opérateur de Schrödinger transverse $H_z + U(x, z)$ dépendent de x , et vont donc subir, elles aussi, les dérivées en x .

Fixons $x \in [a, b]$, il joue ici le rôle de paramètre, et considérons la section transversale $\Sigma(x) := \{z, (x, z) \in \Omega_0\}$ associée ainsi que son bord $\Gamma(x) := \partial\Sigma(x)$. On définit alors la base hilbertienne $(\chi_m(\cdot, x))_m$ de $L^2(\Sigma(x))$ associée à l'opérateur de Schrödinger transverse avec conditions de Dirichlet homogènes :

$$(H_z + U(x, z)) \chi_m(z, x) = E_m(x) \chi_m(z, x) \quad z \in \Sigma(x) \quad (5.3.21a)$$

$$\chi_m(\cdot, x) = 0 \quad z \in \Gamma(x) \quad (5.3.21b)$$

$$\forall m, p, \int_{\Sigma(x)} \chi_m(z, x) \chi_p(z, x) dz = \delta_{m, p}. \quad (5.3.21c)$$

E étant fixée, on décompose $\Psi_E(x, \cdot)$ sur la base des $(\chi_m(\cdot, x))_{m \geq 1}$, ce qui donne

$$\Psi_E(x, z) = \sum_{m \geq 1} \phi_m(x) \chi_m(z, x). \quad (5.3.22)$$

En intégrant (5.3.22) dans l'équation (5.3.21a), et en projetant sur le mode m , on obtient l'équation suivante sur les ϕ_m :

$$-\phi_m''(x) - 2 \sum_{j \geq 1} c_{m, j}^{(1)}(x) \phi_j'(x) - \sum_{j \geq 1} \left(c_{m, j}^{(2)}(x) + \frac{2}{\hbar^2} (E - E_j(x)) c_{m, j}^{(0)}(x) \right) \phi_j(x) = 0. \quad (5.3.23)$$

où

$$c_{m,j}^{(0)}(x) = \int_{\Sigma(x)} m_x(z) \chi_j(z, x) \chi_m(z, x) dz \quad (5.3.24a)$$

$$c_{m,j}^{(1)}(x) = \int_{\Sigma(x)} \partial_x \chi_j(z, x) \chi_m(z, x) dz \quad (5.3.24b)$$

$$c_{m,j}^{(2)}(x) = \int_{\Sigma(x)} \partial_x^2 \chi_j(z, x) \chi_m(z, x) dz. \quad (5.3.24c)$$

Il est à noter ici que l'on va par la suite utiliser la *méthode de décomposition en sous-bandes*. Cette méthode consiste à prendre en compte un nombre fini (en pratique petit) de modes j interagissant avec chaque mode m . Elle permet donc de ramener le problème de Schrödinger-Poisson 3D de départ à la résolution de plusieurs (mais peu nombreux) problèmes en dimension 1 et 2.

Bilan sur le modèle :

On a vu qu'une configuration unique est imposée dès que l'on fixe :

– le mode propre i_0

– le vecteur d'onde k_0

– la provenance source ou drain

de l'onde incidente à l'infini dont résulte la configuration étudiée.

On la note ψ_{i_0, k_0}^+ ou ψ_{i_0, k_0}^- pour une onde incidente à l'infini qui vient de la source ou du drain respectivement. On a alors

$$\psi_{i_0, k_0}^+(x, z) = \sum_{m \geq 1} \phi_{m, i_0, k_0}^+(x) \chi_m(z, x) \quad (5.3.25)$$

$$\psi_{i_0, k_0}^-(x, z) = \sum_{m \geq 1} \phi_{m, i_0, k_0}^-(x) \chi_m(z, x) \quad (5.3.26)$$

où $\chi_m(z, x)$ vérifient (5.3.21a)-(5.3.21c), et $\phi_{m, i_0, k_0}^\pm(x)$ vérifient (5.3.23)-(7.1.5) avec les conditions aux bord transparentes données par :

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_m^+}{dx}(a) &= (-i\delta_{m \leq I^+(E)} + \delta_{m \geq I^+(E)+1}) k_m^+ \phi_m^+(a) + 2ik_m^+ \delta^+ \delta_{i_0, m} e^{ik_m^+ a} \delta_{m \leq I^+(E)} \\ \frac{d\phi_m^+}{dx}(b) &= (i\delta_{m \leq I^-(E)} - \delta_{m \geq I^-(E)+1}) k_m^- \phi_m^+(b) - 2ik_m^- \delta^- \delta_{i_0, m} \delta_{m \leq I^-(E)} e^{-ik_m^- b} \end{aligned} \quad (5.3.27)$$

et l'équation correspondante dans le drain, E étant donnée par la relation de dispersion

$$E = E_{i_0}^\pm + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_x}$$

Existence et unicité d'une solution au problème. L'équation de Schrödinger

(5.3.20) définie sur le domaine borné Ω_0 combinée avec la décomposition (5.3.25)-(5.3.26) et les conditions aux bords entrantes (5.3.27) s'écrit finalement sous la forme du problème variationnel suivant :

$$\begin{aligned} \text{Trouver } \Psi \in \mathcal{H}(\Omega_0) := \{\Psi : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{C}; \Psi = 0 \text{ sur } \Gamma_0\}, \text{ tel que} \\ \forall \Phi \in \mathcal{H}(\Omega_0), \quad a(\Psi, \Phi) = L(\Phi), \end{aligned} \quad (5.3.28)$$

où a est la forme bilinéaire, symétrique et continue sur $H^1(\Omega_0)$ définie par :

$$\begin{aligned} a(\Psi, \Phi) := \frac{\hbar^2}{2} \int_{\Omega_0} \nabla_{\text{eff}} \Psi \nabla \Phi d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} (U(x, z) - E) \Psi \Phi d\Omega_0 \\ - i \sum_{+, -} \sum_{m=1}^{I^\pm(E)} k_m^\pm(E) \Psi_m^\pm \Phi_m^\pm + \sum_{+, -} \sum_{m=1}^{+\infty} k_m^\pm(E) \Psi_m^\pm \Phi_m^\pm. \end{aligned} \quad (5.3.29)$$

Ici, $\nabla_{\text{eff}} \Psi := (\frac{1}{m_x(z)} \partial_x \Psi, \frac{1}{m_1(z)} \partial_1 \Psi, \frac{1}{m_2(z)} \partial_2 \Psi)^t$ et L est la forme linéaire continue sur $H^1(\Omega_0)$ définie par :

$$L(\Phi) := -2i \sum_{m=1}^{I^\pm(E)} \delta_{i_0, m} k_m^\pm a_m^\pm \Psi_m^\pm \Phi_m^\pm \quad (5.3.30)$$

avec

$$\Psi_m^\pm := \int_{\Gamma^\pm} \Psi \chi_m^\pm dz, \quad \Phi_m^\pm := \int_{\Gamma^\pm} \Phi \chi_m^\pm dz, \quad a_m^+ := e^{ik_m^+ a}, \quad a_m^- := e^{-ik_m^- b}.$$

Théorème 5.3.3. *Soit $E_{\min} := \inf_{\pm, m} E_m^\pm$, et soit V un potentiel donné dans $L^\infty(\Omega_0)$, il existe une suite croissante $(E_m(V))_m$ qui tend vers $+\infty$ telle que le problème variationnel (5.3.28) admette une solution unique pour tous $(a_m^\pm)_m$ donnés et pour chaque $E \in \{E \geq E_{\min}, \forall p \geq 1, E \neq E_p\}$.*

L'analyse de l'existence et de l'unicité de solutions au problème variationnel (5.3.28) est effectuée dans [6] à l'aide de l'alternative de Fredholm.

5.3.3 Calculs de densité et de courant

On a vu qu'une configuration unique notée ψ_{i_0, k_0}^\pm est imposée dès que l'on fixe le mode propre i_0 , le vecteur d'onde k_0 et le guide (source $\varepsilon = +$ ou drain $\varepsilon = -$) d'introduction, et que l'on se donne la relation de dispersion (5.3.31). Dans le cas général d'une configuration de masse effective (m_x, m_1, m_2) dans les directions x, z_1, z_2 , la relation de dispersion pour $\psi_{i_0, k_0}^\varepsilon$ s'écrit alors

$$E(i_0, k_0, \varepsilon) := E_{i_0}^\varepsilon + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_x}. \quad (5.3.31)$$

Dans ce cas, la densité électronique pour un mélange statistique d'états reliés à la distribution de Fermi-Dirac associée à la source et au drain, de potentiels chimiques respectifs μ^+ et μ^- est donnée par :

$$n(x, z) := 2 \sum_{\varepsilon=\pm} \sum_{i_0 \geq 1} \int_{k \geq 0} f_{FD}(E(i_0, k, \varepsilon) - q\mu^\varepsilon) |\psi_{i_0, k}^\varepsilon|^2 \frac{dk}{2\pi}, \quad (5.3.32)$$

où la fonction de Fermi-Dirac f_{FD} a été définie dans (5.2.6).

On établit maintenant l'expression du courant électronique en fonction de la tension de polarisation des ports, dans le cas d'un potentiel électrostatique V connu.

La densité de courant électronique $\mathbf{j}(x, z)$ associée à une fonction d'onde Ψ est donnée de manière générale par

$$\mathbf{j}(x, z) := \frac{q\hbar}{2m} \Im \left(\overline{\Psi(x, z)} \nabla_{x, z} \Psi(x, z) \right), \quad (5.3.33)$$

où $\Im(a)$ désigne la partie imaginaire du nombre complexe a .

Dans le cas présent, on peut alors définir le courant électronique total $\mathbf{J}(x, z)$ en remplaçant, dans la définition de la densité quantique (5.3.32) la densité de probabilité de présence de l'électron d'énergie E en (x, z) par la densité de courant électronique associée à la fonction d'onde ψ_{i_0, k_0}^\pm comme suit :

$$\mathbf{J}(x, z) := 2 \sum_{\varepsilon=+, -} \sum_{i_0 \geq 1} \int_0^\infty \mathbf{j}_{i_0, k_0}^\varepsilon(x, z) f_{FD}(E(i_0, k_0, \varepsilon) - q\mu^\varepsilon) \frac{dk}{2\pi}. \quad (5.3.34)$$

On définit finalement l'intensité I_D à travers la section Σ^- par le flux de courant qui traverse Σ^- :

$$I_D := \int_{\Sigma^-} \mathbf{J}(x, z) \cdot e_x dz \quad (5.3.35)$$

où e_x désigne la normale à la section Σ^- . Finalement, en combinant (5.3.33), (5.3.34) et (5.3.35), on obtient pour I_D l'expression suivante

$$I_D := \frac{q\hbar}{m_x \pi} \sum_{\varepsilon=+, -} \sum_{i_0 \geq 1} \int_0^\infty \int_{\Sigma^-} \Im \left(\overline{\psi_{i_0, k_0}^\varepsilon(b, z)} \partial_x \psi_{i_0, k_0}^\varepsilon(b, z) \right) f_{FD}(E(i_0, k_0, \varepsilon) - q\mu^\varepsilon) dz dk. \quad (5.3.36)$$

Chapitre 6

Simulation numérique des guides d'ondes

Sommaire

6.1	Modélisation des guides et mise en équations	194
6.2	Méthodes numériques pour la simulation de l'équilibre thermodynamique dans les guides	197
6.2.1	Procédure générale	197
6.2.2	Méthodes numériques utilisées	197
6.2.3	Maillages	198
6.2.4	Organigramme de l'algorithme complet	201
6.3	Résultats numériques après convergence de l'algorithme	202

Ce chapitre propose une modélisation spécifique pour décrire l'équilibre thermodynamique dans les guides d'ondes. Les résultats numériques sont obtenus avec la librairie éléments finis Fortran/C++ MÉLINA.

Le travail de simulation numérique a été fait en collaboration avec Grégory Vial.

Dans le modèle de transport électronique introduit dans le Chapitre 5 et simulé dans le Chapitre 7, on étudie un gaz d'électrons considéré comme un mélange statistique d'états reliés qui suivent la thermostatistique de Fermi-Dirac. La densité électronique est calculée à partir de son expression donnée par

$$n(x, z) := 2 \sum_{\varepsilon=+,-} \sum_{i_0 \leq 0} \int_{k \geq 0} f_{FD}(E(i_0, k, \varepsilon - q\mu^\varepsilon)) |\psi_{i_0, k}^\varepsilon|^2 \frac{dk}{2\pi},$$

où μ^+ et μ^- sont les niveaux de Fermi associés à la source et au drain respectivement, et où la fonction de Fermi-Dirac f_{FD} a été définie dans (5.2.6). De même, l'expression du courant a été donnée dans le chapitre précédent par (5.3.34) :

$$\mathbf{J}(x, z) := 2 \sum_{\varepsilon=+,-} \sum_{i_0 \geq 1} \int_0^\infty \mathbf{j}_{i_0, k_0}^\varepsilon(x, z) f_{FD}(E(i_0, k_0, \varepsilon) - q\mu^\varepsilon) \frac{dk}{2\pi}.$$

Elle fait ainsi intervenir ces deux paramètres de manière cruciale.

On propose dans ce chapitre une méthode numérique pour simuler l'équilibre thermodynamique des électrons dans la source et le drain. Celle-ci permet alors de déterminer leurs potentiels chimiques, nécessaires au calcul de la densité et du courant dans la zone active. Par ailleurs, les conditions au bord de l'équation de Poisson dans la zone active nécessitent de connaître le potentiel électrostatique dans la source. Pour permettre la mise en place d'une telle méthode numérique, on s'attarde ici un peu plus sur la *modélisation des guides d'ondes*. En effet, l'hypothèse d'équilibre thermodynamique dans les guides d'ondes conduit à une équation nonlinéaire garantissant l'électro-neutralité des guides qui donne accès aux valeurs de ces deux paramètres.

Structurellement, ce problème est très différent des autres problèmes traités dans le chapitre suivant. En effet, on s'intéresse ici à un problème bidimensionnel, nonlinéaire de Schrödinger-Poisson en domaine fermé, la troisième direction étant traitée semi-classiquement, tandis que, dans le chapitre suivant, il est question d'un système tridimensionnel en domaine ouvert (la troisième direction étant traitée de façon quantique). Ce type de système de Schrödinger-Poisson a été étudié mathématiquement dans [19, 20, 21] et présente une structure variationnelle. En effet, on peut montrer que le système à résoudre (6.1.5) s'écrit comme les équations d'Euler-Lagrange correspondant à un problème de minimisation convexe. Cette propriété fondamentale et caractéristique des systèmes quantiques à l'équilibre garantit l'existence et l'unicité d'un couple Potentiel de Poisson-Potentiel chimique qui résout le problème. L'implémentation de ce type de système est maintenant courante en dimension 1 (voir par exemple [22]). Le besoin du calcul des potentiels chimiques des guides nous a amené à traiter le cas de la dimension 2.

On présente donc dans une première partie la modélisation particulière des guides d'ondes et les équations qui traduisent leur équilibre thermodynamique. Dans une deuxième partie, on adimensionne ces équations et on propose un algorithme pour le

calcul des potentiels chimiques de la source et du drain. Dans une troisième partie, on présente les résultats de ces méthodes numériques, formés d'une part des valeurs numériques des potentiels chimiques à proprement parler, et d'autre part des profils de répartition des électrons dans les guides ainsi que du potentiel de Poisson dans les guides. Ce potentiel nous fournit en effet un potentiel de départ pour l'initialisation de l'algorithme de calcul de la densité et du courant dans la zone active, ainsi que les valeurs du potentiel de Poisson au bord pour la résolution des équations de Poisson dans la zone active.

6.1 Modélisation des guides et mise en équations

On suppose ici que les interfaces guides d'ondes/zone active Σ^+ et Σ^- se trouvent dans un état de quasi-équilibre. Ainsi, on suppose que les phénomènes de conduction liés aux échanges d'électrons entre les guides d'ondes et la zone active ne représentent qu'une petite perturbation pour le guide d'onde et le réservoir qui lui est associé et que cette perturbation peut être négligée.

On suppose par ailleurs que la section $\Sigma(x)$ est constante en x dans chacun des deux guides. On notera ainsi Σ^+ et Σ^- les sections respectives de la source et du drain. Enfin, on suppose que le potentiel électrostatique V , ainsi que la fonction d'onde ne dépendent pas de la variable de transport x .

Définissons comme précédemment la base hilbertienne de $L^2(\Sigma)$ formée par les fonctions propres χ_m^\pm du Hamiltonien transverse $H_z + U^\pm(z)$, associées aux valeurs propres E_m^\pm . Elles sont solutions du système suivant :

$$\begin{aligned} H_z \chi_m^\pm(z) + U^\pm(z) \chi_m^\pm(z) &= E_m^\pm \chi_m^\pm(z) \text{ sur } \Sigma^\pm \\ \chi_m^\pm(z) &= 0 \text{ sur } \Gamma^\pm \\ \int_{\Gamma^\pm} \chi_m^\pm(z) \chi_p^\pm(z) dz &= \delta_{m,p}, \end{aligned} \tag{6.1.1}$$

où l'on rappelle que

$$H_z := -\frac{\hbar^2}{2} \partial_1 \left(\frac{1}{m_1(z)} \partial_1 \right) - \frac{\hbar^2}{2} \partial_2 \left(\frac{1}{m_2(z)} \partial_2 \right)$$

On modélise ici la densité par un modèle "mixte", c'est à dire un modèle issu de la statistique de Fermi-Dirac dans la section Σ , et un modèle de type Thomas-Fermi dans la direction de transport. La densité dans la source et le drain est alors donnée par l'expression suivante :

$$n^\pm(z) := \frac{1}{\pi} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} f_{FD}(E(m, k, \pm) - q\mu^\pm) |\chi_m^\pm(z)|^2 dk \tag{6.1.2}$$

avec

$$f_{FD}(E - q\mu) := \frac{1}{1 + \exp((E - q\mu)/k_B T)}.$$

L'équilibre thermodynamique de la source et du drain se traduit en particulier par l'électronéutralité sur chaque section Σ . Ainsi, on doit avoir dans les guides :

$$\begin{aligned} N_D^\pm \sigma^\pm &= \int_{\Sigma^\pm} n^\pm(z) dz = \frac{1}{\pi} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} f_{FD}(E_{m,k,\pm} - q\mu^\pm) dk \int_{\Sigma^\pm} |\chi_m^\pm(z)|^2 dz \\ &= \frac{1}{\pi} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} f_{FD}(E(m, k, \pm) - q\mu^\pm) dk \end{aligned} \quad (6.1.3)$$

où l'on a utilisé le caractère *orthonormé dans* $L^2(\Sigma)$ de la famille $(\chi_m^\pm)_{m \geq 1}$. Dans cette équation d'électronéutralité, σ^\pm désigne l'aire de la section Σ^\pm et N_{dop}^\pm la densité de dopage de la source ou du drain. Ainsi, on obtient grâce à cette hypothèse d'électronéutralité une équation non-linéaire qui permet de calculer μ^\pm , le potentiel $U(z)$ étant donné.

Enfin, on modélise comme précédemment les interactions électrostatiques par un potentiel de Poisson qui résout l'équation

$$\begin{aligned} -\nabla_z(\epsilon_r(z)\nabla_z U_{\text{poiss}}^\pm) &= \frac{q^2}{\epsilon_0}(n^\pm(z) - N_D^\pm), \quad z \in \Sigma^\pm \\ U_{\text{poiss}}^+(z) &= 0, \quad z \in \Gamma^+ \\ U_{\text{poiss}}^-(z) &= -qV_D, \quad z \in \Gamma^-. \end{aligned}$$

Les interactions entre les électrons et le cristal sont quant à eux modélisés par le potentiel U_{Off} donné par

$$U_{\text{Off}}(z) = qV_{\text{Off}}.$$

On pose alors dans (6.1.1)

$$U(z) := U_{\text{poiss}}(z) + U_{\text{Off}}.$$

Bilan sur les équations

On modélise la répartition des électrons dans la source et le drain par le problème

suisant :

$$H_z \chi_m^\pm(z) + U^\pm(z) \chi_m^\pm(z) = E_m^\pm \chi_m^\pm(z), \quad z \in \Sigma^\pm \quad (6.1.4a)$$

$$\chi_m^\pm(z) = 0, \quad z \in \Gamma^\pm$$

$$\int_{\Gamma^\pm} \chi_m^\pm(z) \chi_p^\pm(z) dz = \delta_{m,p},$$

$$\frac{1}{\pi} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} f_{FD}(E(m, k, \pm) - q\mu^\pm) dk = N_D \sigma^\pm \quad (6.1.4b)$$

$$n^\pm(z) := \frac{1}{\pi} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} f_{FD}(E(m, k, \pm) - q\mu^\pm) |\chi_m^\pm(z)|^2 dk, \quad z \in \Sigma^\pm \quad (6.1.4c)$$

$$-\nabla_z(\epsilon_r(z) \nabla_z U_{\text{poiss}}^\pm) = \frac{q^2}{\epsilon_0} (n^\pm(z) - N_D^\pm), \quad z \in \Sigma^\pm \quad (6.1.4d)$$

$$U_{\text{poiss}}^+(z) = 0, \quad z \in \Gamma^+$$

$$U_{\text{poiss}}^-(z) = -qV_D, \quad z \in \Gamma^-.$$

où l'on rappelle que $E(m, k, \varepsilon) := E_m^\varepsilon + \frac{\hbar^2}{2m_x}$.

Pour éviter de traiter trop de fois la même équation et ainsi gagner du temps de calcul, on propose de résoudre le problème plus général suivant :

$$H_z \chi_m(z) + U(z) \chi_m(z) = E_m \chi_m(z), \quad z \in \Sigma^\pm \quad (6.1.5a)$$

$$\chi_m(z) = 0, \quad z \in \Gamma^\pm$$

$$\int_{\Gamma^\pm} \chi_m(z) \chi_p(z) dz = \delta_{m,p},$$

$$\frac{1}{\pi} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} f_{FD}(E(m, k) - q\mu) dk = N_D \sigma^\pm \quad (6.1.5b)$$

$$n(z) := \frac{1}{\pi} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} f_{FD}(E(m, k) - q\mu) |\chi_m(z)|^2 dk, \quad z \in \Sigma^\pm \quad (6.1.5c)$$

$$-\nabla_z(\epsilon_r(z) \nabla_z U_{\text{poiss}}) = \frac{q^2}{\epsilon_0} (n(z) - N_D), \quad z \in \Sigma^\pm \quad (6.1.5d)$$

$$U_{\text{poiss}}(z) = 0, \quad z \in \Gamma^\pm. \quad (6.1.5e)$$

où $E(m, k) = E_m + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_x}$. A posteriori, on pose dans la source :

$$U^+(z) = U, \quad E_m^+ = E_m, \quad \mu^+ = \mu, \quad \chi_m^+(z) = \chi_m(z)$$

et dans le drain :

$$U^-(z) = U + U_D, \quad E_m^- = E_m + U_D, \quad \mu^- = \mu + U_D, \quad \chi_m^-(z) = \chi_m(z)$$

qui résolvent (6.1.4)

6.2 Méthodes numériques pour la simulation de l'équilibre thermodynamique dans les guides

6.2.1 Procédure générale

Pour le calcul des potentiels chimiques dans la source et dans le drain, on commence par initialiser le potentiel (on choisit ici un potentiel nul), puis on résout le problème (6.1.5) avec ce potentiel dans l'équation (6.1.5a). La procédure générale s'écrit sous la forme suivante :

1. Le potentiel $U_i(z)$ étant donné, résoudre l'équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D qui permet le calcul des éléments propres $\chi_m(z)$ et E_m du Hamiltonien transverse.
2. Résoudre l'équation non linéaire (6.1.5b).
3. Calculer la densité électronique dans la section Σ grâce à son expression (6.1.5c).
4. Résoudre l'équation de Poisson sur le potentiel (6.1.5d)-(6.1.5e) grâce au calcul de la densité. Calculer la nouveau $U_{i+1}(z)$.
5. Si $(\|U_{i+1}(z) - U_i(z)\|_{L^\infty(\Sigma)} < \text{tol})$ et $|\mu_{i+1} - \mu_i| < \text{tol}$, arrêter le calcul, sinon, reprendre l'algorithme avec le potentiel $U_{i+1}(z)$.

6.2.2 Méthodes numériques utilisées

L'étape 1 nécessite la résolution d'une équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D. On utilise pour cela une méthode d'éléments finis nodaux 2D d'ordre élevé (ici Q5) sur le maillage de Σ présenté dans la section (6.2.3). La méthode éléments finis utilisée fait appel, pour le calcul des éléments propres, à une méthode de sous-espaces. On rappelle que la méthode de décomposition en sous bandes ne requiert en pratique qu'un petit nombre de modes propres. Ceci contribue à la réduction du nombre de telles équations à résoudre. En pratique on ne considère en effet que 3 à 4 modes propres d'injection. La contribution de chacun des modes d'injection est en effet déterminée par le facteur d'occupation donné par la fonction de Fermi-Dirac. Celle-ci devient en effet très petite pour les modes élevés. Par ailleurs, dans cette méthode, on néglige les interactions avec les modes élevés.

La deuxième étape requiert la résolution d'une équation non linéaire en μ . Pour la résoudre, on utilise une méthode de Newton, sachant que les potentiels chimiques de la source et du drain sont compris entre les valeurs propres extrêmes dans la source et dans le drain. On exploite cette remarque pour avoir une localisation a priori de la solution qui tient lieu d'initialisation.

La troisième étape requiert le calcul de l'intégrale

$$\int_{k \in \mathbb{R}} \frac{dk}{1 + e^{(E_m + \frac{\hbar^2}{2m_x} k^2 - \mu^\pm)/k_B T}}.$$

Pour cela, on exploite la décroissance exponentielle de la fonction de Fermi Dirac et on fait appel à une méthode de Gauss-Hermite. Reste ainsi à calculer une combinaison linéaire des vecteurs propres déjà approchés.

L'étape 4 requiert la résolution d'une équation aux dérivées partielles elliptique 2D sur la section Σ dont on vient de calculer le second membre. Elle se résout par une méthode d'éléments finis nodaux 2D de haut degré sur le maillage déjà choisi pour Σ .

6.2.3 Maillages

L'implémentation de la méthode éléments finis 2D utilisée

1. pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D dans la section Σ ,
 2. pour la résolution de l'équation de Poisson 2D, la densité étant connue dans Σ
- requiert le choix d'un maillage de la section Σ .

Ici, la structure particulière de la section nous amène à exploiter un avantage de la librairie MÉLINA. En effet, dans le cas où, comme ici, le domaine d'étude est formé de plusieurs sous-domaines, MÉLINA permet de définir les opérateurs différentiels et leurs conditions aux bords sur chaque sous-domaine. Les matrices correspondantes sont ensuite assemblées automatiquement sur le domaine complet. Ceci procure une grande adaptabilité aux éventuels changements de type de section, à condition de conserver la même structure générale et les mêmes noms de sous-domaines. Anisi, dans notre cas, on doit gérer des constantes par morceaux liées aux masses effectives (dans les deux domaines Si et $Si0_2$). On définit ainsi les opérateurs sur chacun des deux sous-domaines, avec des constantes différentes. Le passage d'une section carrée à une section triangulaire ou circulaire se fait donc uniquement en changeant le fichier de maillage. On n'a pas à modifier les définitions des opérateurs.

La librairie MÉLINA n'étant pas à ce jour pourvue de mailleur, on a "fabriqué" les maillages suivants pour les trois sections, en définissant sur chacun d'eux les deux sous-domaines correspondants aux deux composants physiques. Le maillage par triangles est choisi pour être adapté à cette décomposition en sous-domaines pour une meilleure précision à l'interface entre les deux domaines.

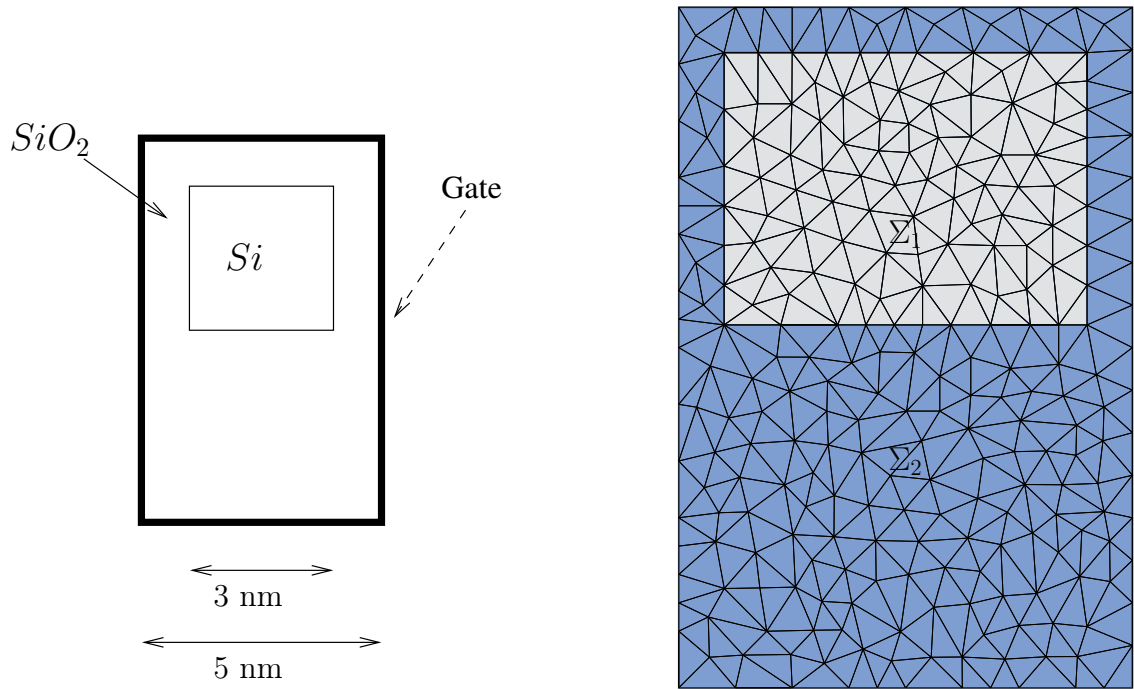


FIG. 6.1 – Section carrée

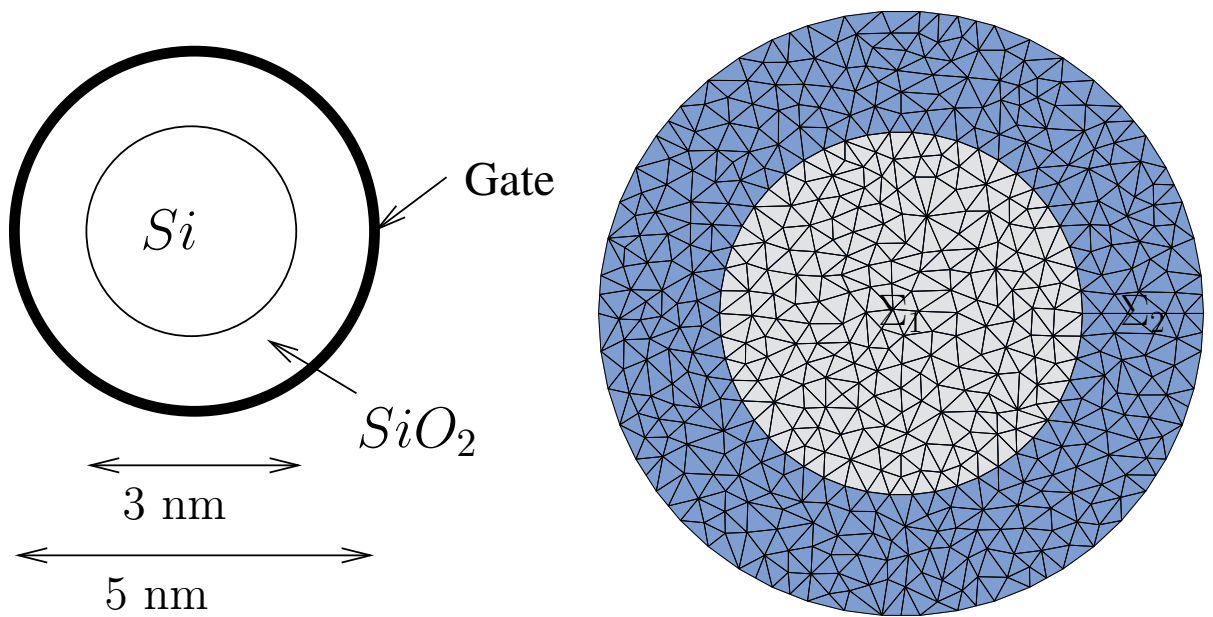


FIG. 6.2 – Section circulaire

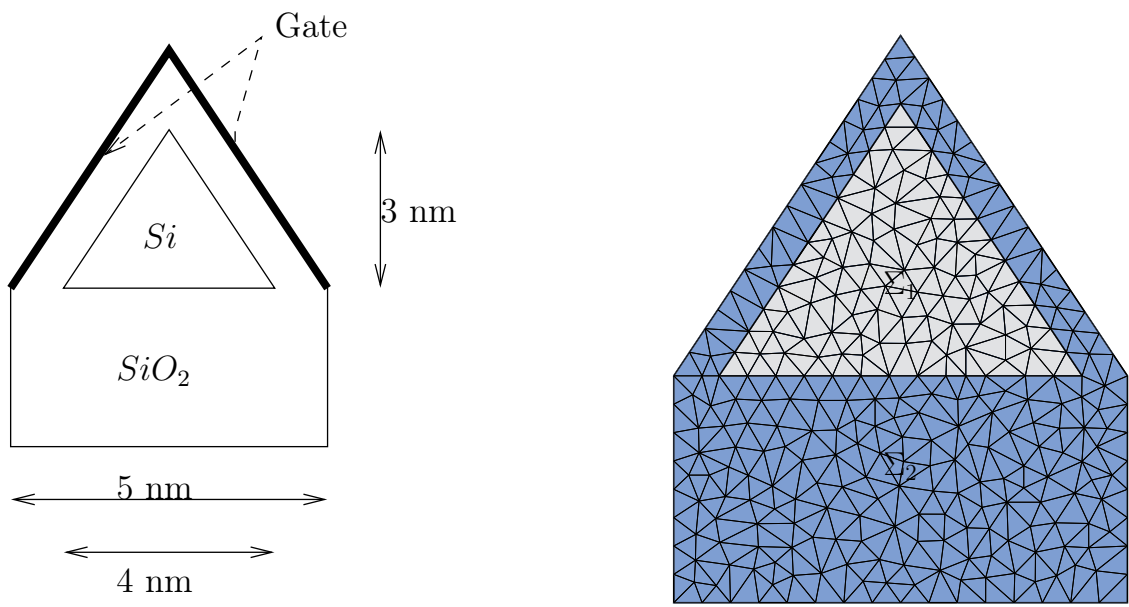
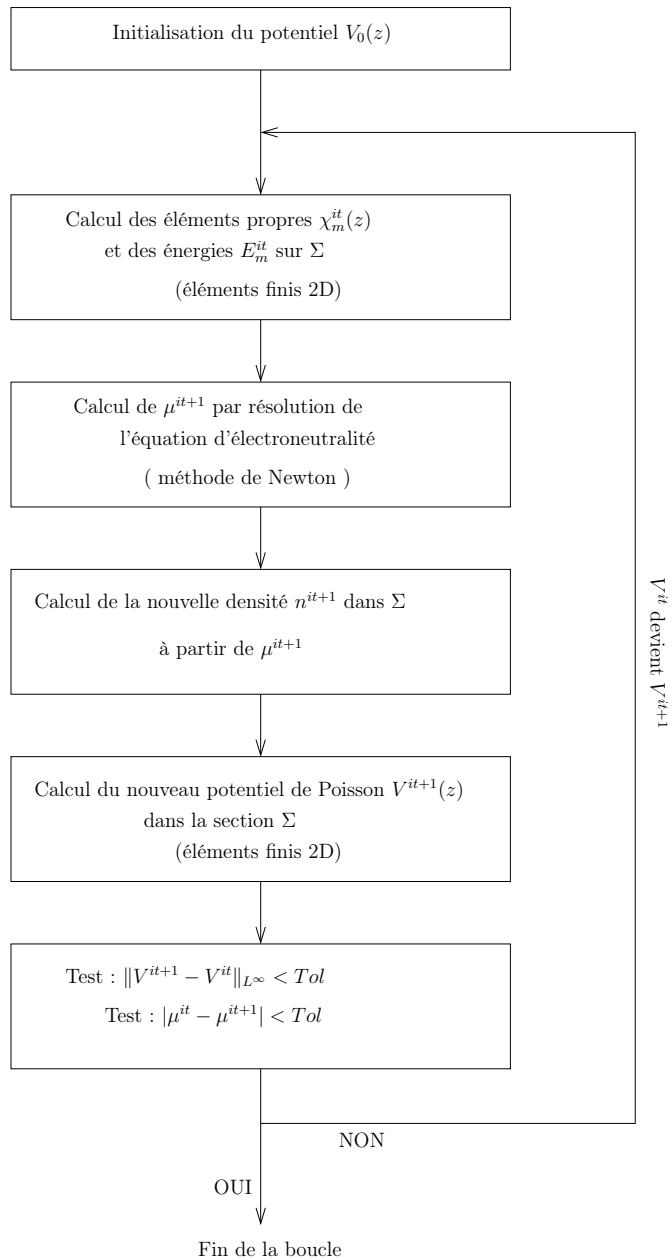


FIG. 6.3 – Section triangulaire

6.2.4 Organigramme de l'algorithme complet

FIG. 6.4 – Algorithme de calcul des potentiels chimiques



6.3 Résultats numériques après convergence de l'algorithme

On donne sur les figures 6.5, 6.6 et 6.7 les vecteurs propres de l'opérateur transverse après convergence de l'algorithme.

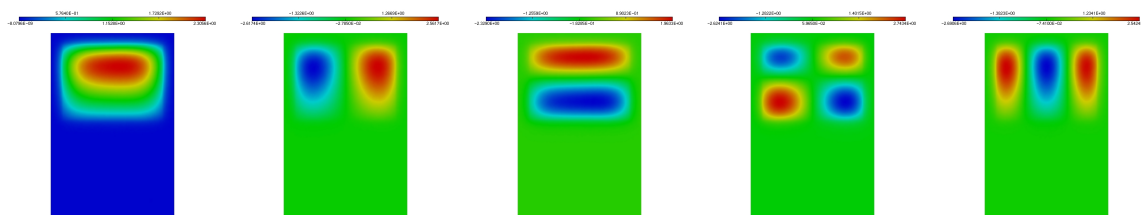


FIG. 6.5 – 5 modes propres pour une section carrée

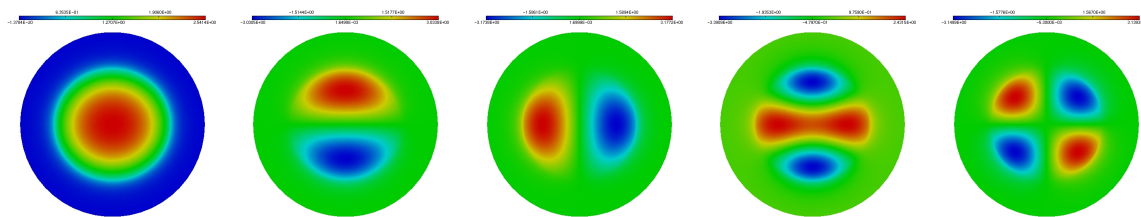


FIG. 6.6 – 5 modes propres pour une section circulaire

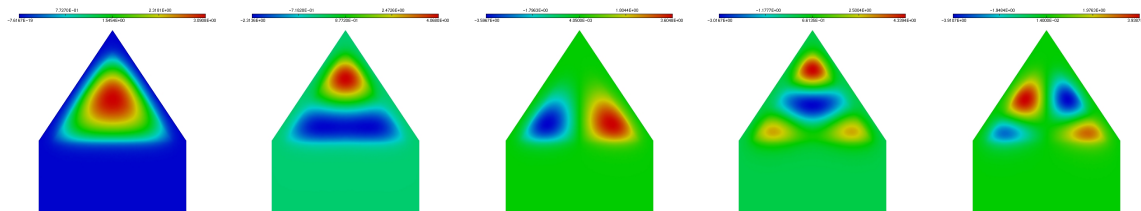


FIG. 6.7 – 5 modes propres pour une section triangulaire

Sur la figure 6.8, on a représenté la densité des électrons dans la source. Notons que dans le cas de la section circulaire, la géométrie est à symétrie cylindrique mais les équations n'ont pas cette symétrie car les masses effectives dans l'opérateur de Schrödinger sont différentes selon z_1 et z_2 . Si la distribution d'électrons semble avoir une symétrie cylindrique sur la figure 6.8, on voit dans le tableau suivant que les énergies associées aux modes 2 et 3 sont sensiblement différentes.

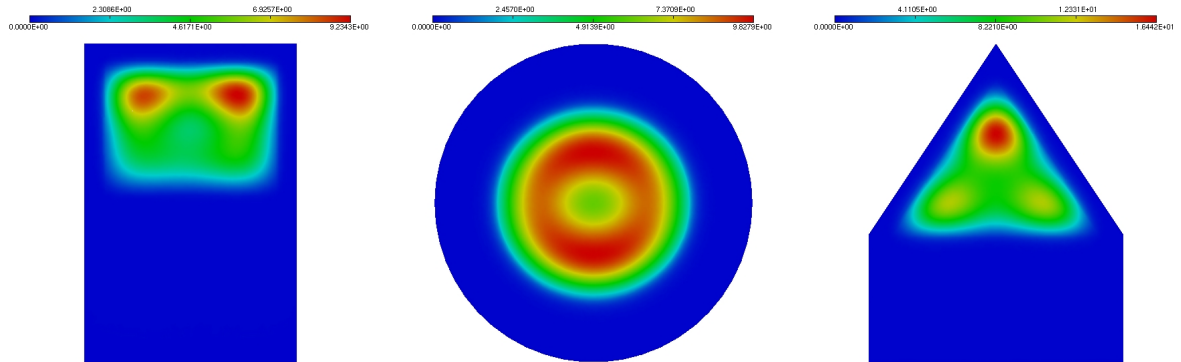


FIG. 6.8 – Densité des électrons dans la section (10 modes)

On peut maintenant vérifier graphiquement le fait que l'apport des modes supérieurs à 4 en ce qui concerne la densité est négligeable. On représente en effet sur la figure 6.9 la densité formée des 3 premiers modes dont on peut comparer l'allure à celle des densités présentées sur la figure 6.8, calculées avec 10 modes.

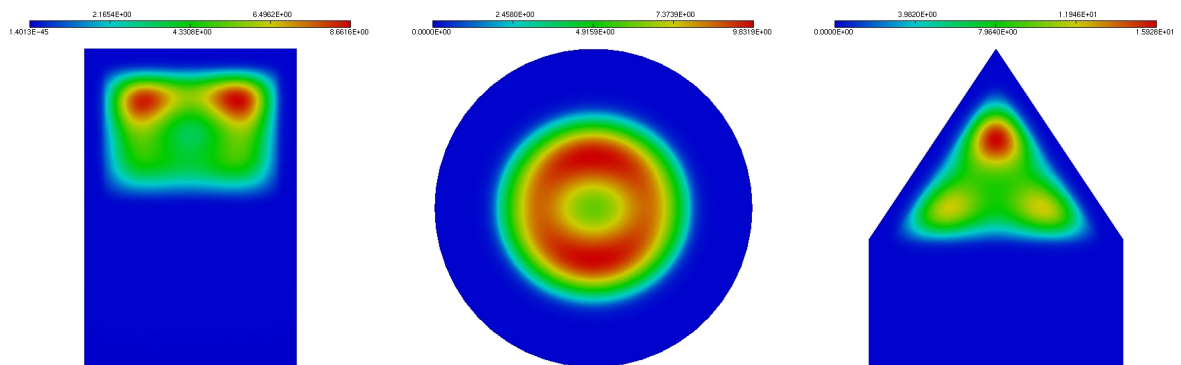


FIG. 6.9 – Densité calculée avec 3 modes dans la section

On montre enfin dans le tableau suivant la valeur des énergies propres (en eV) pour chacune des 3 sections ainsi que le coefficient d'occupation qui lui correspond. En effet, d'après la formule donnant la densité (6.1.5c), on a clairement

$$n^+(z) = \frac{\sqrt{2 * \overline{m_x} k_B T}}{\pi \hbar} \sum_{m \geq 1} \int_{k \in \mathbb{R}} \frac{dk}{1 + \exp(\frac{E_m^+}{k_B T} + k^2 - \frac{q_e \mu^+}{k_B T})} |\chi_m^+(z)|^2. \quad (6.3.1)$$

Dès lors, le facteur $\int_{k \in \mathbb{R}} \frac{dk}{1 + \exp(\frac{E_m^+}{k_B T} + k^2 - \frac{\mu^+}{k_B T})}$ détermine l'occupation du mode m . On fait ici un tableau de ces facteurs en fonction de m .

Section Mode i	Carré		Cercle		Triangle	
	E_i	C_i	E_i	C_i	E_i	C_i
1	1.005	6.860	1.970	8.987	1.656	9.23
2	1.206	3.907	2.258	5.998	2.015	5.42
3	1.262	2.518	2.380	4.071	2.031	5.18
4	1.460	0.0055	2.739	1.30610^{-4}	2.522	9.4110^{-6}
5	1.648	3.8710^{-6}	2.822	5.2710^{-6}	2.716	5.1810^{-9}
6	1.749	7.7710^{-8}	3.207	1.7910^{-12}	2.760	9.4510^{-10}
7	1.896	2.6410^{-10}	3.349	7.3910^{-15}	3.266	2.9910^{-18}
8	1.942	4.4510^{-11}	3.397	1.1510^{-15}	3.401	1.6110^{-20}
9	2.285	7.6910^{-17}	3.835	5.05810^{-23}	3.644	1.3310^{-24}
10	2.368	3.1010^{-18}	4.024	3.3810^{-26}	3.667	5.4810^{-25}

Tableau des erreurs relatives à chaque itération pour le calcul de μ : les valeurs obtenues à la convergence de l'algorithme sont de

1. $\mu = 1.311\text{eV}$ dans le cas du carré
2. $\mu = 2.493\text{eV}$ dans le cas du cercle
3. $\mu = 2.208\text{eV}$ dans le cas du triangle

et on obtient le tableau de convergence :

Itération	2	3	4	5	15	20
Erreur relative (en %) carré	6.37	4.17	3.29	2.982.15	0.061	0.0095
Erreur relative (en %) cercle	1.86	0.396	0.110	0.029	0.0172	0.0025
Erreur relative (en %) triangle	4.53	2.6	1.652	1.245	0.035	0.0007

On constate sur ce tableau que l'algorithme sur le cercle semble converger plus rapidement. En fait, c'est du au fait que l'on a choisi un maillage beaucoup plus fin sur

le cercle pour avoir des bords bien arrondis. Ainsi, là où les maillages carrés et triangulaires comptent respectivement 481 et 556 triangles, le maillage du cercle contient quant à lui 1004 triangles. Cela nous permet de voir qu'en raffinant le maillage, on augmente de manière visible la vitesse de convergence de l'algorithme.

Le potentiel total (la somme du potentiel de Poisson et du potentiel V_{Off} après convergence de l'algorithme) est alors :

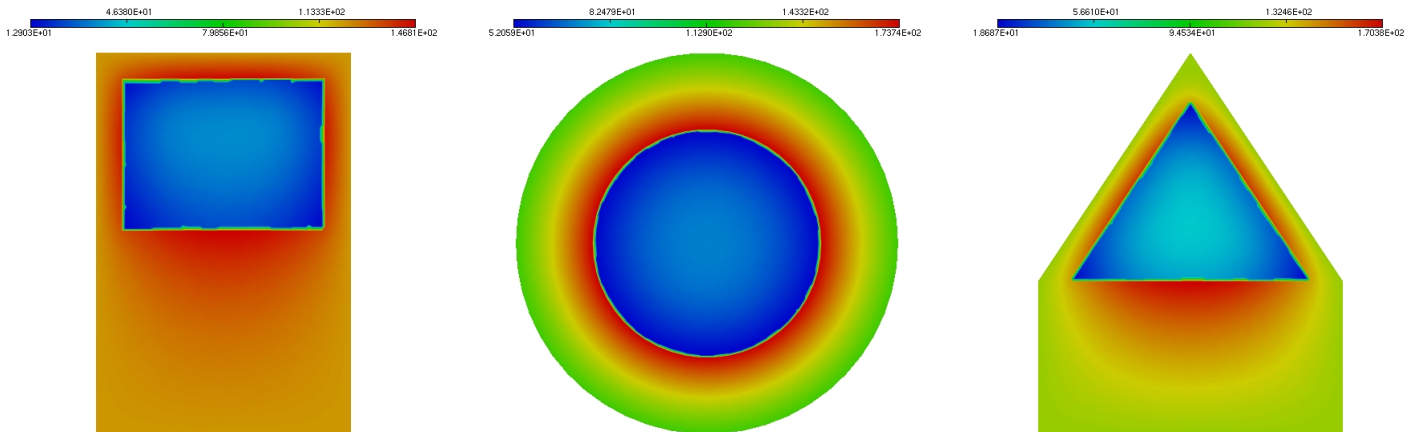


FIG. 6.10 – Potentiel de Poisson dans la section

On vérifie sur ces graphes que les zones de plus fortes densité correspondent bien aux zones de plus faible potentiel.

Chapitre 7

Simulation numérique de la zone active

Sommaire

7.1	Rappel des équations à résoudre et leur adimensionnement	210
7.1.1	Principe de l'algorithme, rappel des équations	210
7.1.2	Adimensionnement des équations	213
7.2	Mise en œuvre numérique	216
7.2.1	Organigramme général	216
7.2.2	Procédure de calcul de la densité et du courant	216
7.2.3	Maillages	218
7.2.4	Organigramme récapitulatif de l'algorithme	220
7.3	Résultats numériques	221
7.4	Perspectives : Résolution numérique du système de Schrödinger-Poisson	229

Dans ce chapitre on propose des méthodes numériques pour la simulation du transport électronique dans le dispositif présenté dans la section précédente. Les résultats numériques ont été obtenus en utilisant la librairie éléments finis Fortran/C++ MÉLINA. On fait par ailleurs appel, pour interfacer avec MÉLINA, à de la programmation shell et C++.

Le travail de simulation numérique a été fait en collaboration avec Grégory Vial (ENS Cachan Antenne de Bretagne).

Dans cette section, on présente les méthodes et les résultats numériques obtenus pour la simulation du transport électronique dans la zone active du composant nanométrique étudié dans le Chapitre 5. Comme on a pu le voir lors de la mise en équations du problème, l'idée principale est d'exploiter la structure tensorielle du dispositif pour permettre une réduction de la dimensionnalité du problème à résoudre. L'équation de départ se présente en effet sous la forme d'une équation de Schrödinger tridimensionnelle. En décomposant la fonction d'onde ψ sur les modes propres de l'opérateur Hamiltonien transverse H_z , on aboutit à un système d'équations dont les équations sont certes nombreuses, mais de dimensionnalité réduite. Il est en effet composé d'équations de Schrödinger aux valeurs propres bidimensionnelles posées sur la section transverse, d'équations différentielles d'ordre 2 en dimension 1. Cette décomposition sur les modes propres de l'opérateur transverse nous amène à appliquer une *méthode de décomposition en sous-bandes*. Ainsi, on approche la fonction d'onde ainsi écrite, par une *somme finie* sur les modes propres. Cette méthode est d'autant plus intéressante ici, qu'en pratique, dans le calcul de densité comme dans le calcul de courant, un petit nombre de modes propres suffit à fournir une bonne approximation. Cette méthode a été mise en place et appliquée dans le cas d'un gaz d'électrons bidimensionnel dans [6, 10, 15].

Le problème de la simulation du transport quantique dans des semi-conducteurs a par ailleurs déjà été étudié. La section qui suit s'inspire des travaux [10, 15], effectués pour un transport bidimensionnel. Dans le cas du transport tridimensionnel dans un nanotube, on peut citer les résultats numériques obtenus dans [24, 12, 17], pour des modèles non couplés, plus simples que le modèle de Schrödinger-Poisson, ou dans le cadre d'approximations simplificatrices comme l'approximation quasi-3D de [24].

Dans un premier temps, on rappelle les équations que l'on souhaite simuler et on propose un adimensionnement qui va nous permettre de travailler avec des grandeurs d'ordre 1. Dans une deuxième partie, on présente les méthodes numériques mises en œuvre pour la simulation numérique du transport dans un nanotube pour différents potentiels modélisant les interactions électrostatiques. On se placera en effet, pour réduire les coûts de calculs, dans une approximation *faibles densités*, c'est-à-dire que l'on modélise les interactions électrostatiques avec un potentiel linéaire. La résolution d'un système tridimensionnel couplé de Schrödinger-Poisson est présentée comme une perspective intéressante et un travail encore en cours. On expose ainsi les résultats numériques obtenus dans le cadre de cette hypothèse de faibles densités.

Pour résoudre numériquement ce problème, on a fait appel, comme précédemment pour le problème lié à la simulation de l'équilibre thermodynamique dans les guides, au code MÉLINA (voir [16]).

7.1 Rappel des équations à résoudre et leur adimensionnement

Dans cette partie, on rappelle les équations obtenues dans le Chapitre 5 pour la simulation du transport électronique en domaine ouvert. Les équations concernant l'équation de Schrödinger sont de deux types : l'équation de Schrödinger ouverte sur les composantes ϕ_m , en dimension 1 et l'équation de Schrödinger aux valeurs propres dans la section (bidimensionnelle). Le potentiel, lui, est fixé, on verra comment on le choisit. On rappelle que le but ici est de calculer des densités, des courants et des intensités. Pour cela, d'après les formules données dans la section (5.2.3) du chapitre précédent, on a besoin de calculer les fonctions d'ondes

$$\psi_{i_0,k}^\varepsilon(x, z) = \sum_{p \geq 1} \phi_{p,i_0,k}^\varepsilon(x) \chi_p^\varepsilon(z, x)$$

pour $\varepsilon = \pm$, i_0 étant le mode d'injection choisi et p décrivant l'ensemble des modes propres que l'on prend en compte numériquement dans la méthode de décomposition en sous-bandes et enfin pour k parcourant $[0, \infty)$. Dans ce but, on a besoin de connaître les fonctions propres $\chi_p^\varepsilon(\cdot, x)$ aux points x de la grille de transport, de définir ainsi les coefficients de l'équation de Schrödinger ouverte 1D pour chaque i_0 , chaque k , qui donne accès aux $\phi_{m,i_0,k}^\varepsilon$. Pour présenter l'algorithme plus en détail, intéressons-nous aux trois types d'équations que nous allons avoir à traiter.

7.1.1 Principe de l'algorithme, rappel des équations

Principe de l'algorithme

Le principe de l'algorithme de calcul des densités et courants dans la zone active est le suivant. On commence l'algorithme avec le potentiel donné $V(x, z)$. L'algorithme consiste à calculer la densité n et le courant I_{DS} dans la zone active pour ce potentiel fixé V . On a vu que ce calcul nécessite le calcul des $\chi_m(z, x)$ associés à V et des $\phi_m(x)$. Un organigramme du principe global est schématisé dans la section 7.2.1, et l'algorithme complet est donné dans la section 7.2.4.

Équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D

Cette équation est posée dans la section $\Sigma(x)$, x étant ici un paramètre fixé. Elle permet de définir les valeurs propres et fonctions propres de l'opérateur de Schrödinger transverse, le potentiel agissant sur les particules étant donné. Ces fonctions propres sont cruciales car elles interviennent dans le calcul des coefficients de l'EDO de Schrödinger ouverte que l'on vient de rappeler. Il est donc nécessaire de connaître suffisamment bien ces fonctions propres pour pouvoir calculer les coefficients $c_{m,j}^{(0)}(x)$, $c_{m,j}^{(1)}(x)$ et $c_{m,j}^{(2)}(x)$ (définis par (5.3.24)) en chaque point de la grille utilisée pour la résolution de l'EDO 1D.

On rappelle qu'elles sont données par les équations (5.3.21)

$$\begin{aligned} (H_z + U(x, z)) \chi_m(z, x) &= E_m(x) \chi_m(z, x) \quad \text{dans } \Sigma(x) \\ \chi_m(x) &= 0 \quad \text{sur } \Gamma(x) \\ \forall m, p, \int_{\Sigma(x)} \chi_m(z, x) \chi_p(z, x) dz &= \delta_{m,p}. \end{aligned}$$

On est amené à résoudre une équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D à chaque point x de la grille de résolution de l'équation de Schrödinger ouverte 1D.

La formulation variationnelle d'un tel problème s'écrit alors, x étant fixé dans (a, b) , sous la forme

$$\text{Trouver les couples } (E, \chi) \in \mathbb{R} \times H_0^1(\Sigma(x)) \setminus \{0\}, \text{ tels que :} \quad (7.1.1)$$

$$\forall \varphi \in H_0^1(\Sigma(x)), \mathcal{A}(\chi, \varphi) = E \langle \chi, \varphi \rangle_{L^2(\Sigma(x))}. \quad (7.1.2)$$

où \mathcal{A} est la forme bilinéaire, symétrique et coercive définie par :

$$\forall u, v \in H_0^1(\Sigma), \mathcal{A}(u, v) := \frac{\hbar^2}{2} \int_{\Sigma(x)} \nabla_{\text{eff}} u(z) \cdot \nabla_{\text{eff}} v(z) dz + \int_{\Sigma(x)} U(x, z) u(z) v(z) dz$$

avec

$$\nabla_{\text{eff}} u := \left(\frac{1}{m_1(z)} \partial_1 u, \frac{1}{m_2(z)} \partial_2 u \right)^t.$$

Pour résoudre le problème, on s'appuie sur l'alternative de Fredholm qui s'exprime ici comme suit :

Theorem 7.1.1. *Les valeurs propres $(E_m(x))_{m \geq 1}$ du problème (7.1.2) forment une suite croissante de réels qui tendent vers l'infini, chacune des valeurs propres ayant une multiplicité finie. De plus, il existe une base orthonormée de $H_0^1(\Sigma(x))$ formée des fonctions propres $\chi_m(\cdot, x)$ associées aux valeurs propres $E_m(x)$ telles que :*

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\chi_m(\cdot, x), \varphi) &= E_m(x) \langle \chi_m(\cdot, x), \varphi \rangle_{L^2(\Sigma(x))}, \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Sigma(x)), \\ \langle \chi_m(\cdot, x), \chi_p(\cdot, x) \rangle_{L^2(\Sigma(x))} &= \delta_{m,p}. \end{aligned}$$

Dans la pratique, on supposera toujours que l'échantillonnage en énergie évite cette suite discrète de valeurs propres, ce qui est raisonnable dans le cadre d'une résolution numérique.

L'équation de Schrödinger ouverte 1D

Il s'agit de l'équation différentielle ordinaire (EDO) du second ordre (5.3.23) que l'on rappelle ici :

$$-\phi_m''(x) - 2 \sum_{j \geq 1} c_{m,j}^{(1)}(x) \phi_j'(x) - \sum_{j \geq 1} \left(c_{m,j}^{(2)}(x) + \frac{2}{\hbar^2} (E - E_j(x)) c_{m,j}^{(0)}(x) \right) \phi_j(x) = 0,$$

où les coefficients de l'EDO sont donnés par :

$$c_{m,j}^{(0)}(x) = \int_{\Sigma(x)} m_x(z) \chi_j(z, x) \chi_m(z, x) dz \quad (7.1.3)$$

$$c_{m,j}^{(1)}(x) = \int_{\Sigma(x)} \partial_x \chi_j(z, x) \chi_m(z, x) dz \quad (7.1.4)$$

$$c_{m,j}^{(2)}(x) = \int_{\Sigma(x)} \partial_x^2 \chi_j(z, x) \chi_m(z, x) dz. \quad (7.1.5)$$

avec les conditions au bord

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_m^\varepsilon}{dx}(a) &= \left(-i\delta_{m \leq I^+(E)} + \delta_{m \geq I^+(E)+1}\right) k_m^+ \phi_m^\varepsilon(a) + 2ik_m^+ \delta_{\varepsilon,+} \delta_{i_0,m} e^{ik_m^+ a} \delta_{m \leq I^+(E)} \\ \frac{d\phi_m^\varepsilon}{dx}(b) &= \left(i\delta_{m \leq I^-(E)} - \delta_{m \geq I^-(E)+1}\right) k_m^- \phi_m^\varepsilon(b) - 2ik_m^- \delta_{\varepsilon,-} \delta_{m,i_0} \delta_{m \leq I^-(E)} e^{-ik_m^- b}. \end{aligned} \quad (7.1.6)$$

Il est nécessaire pour permettre le calcul approché de la densité (ou encore du courant) de calculer un grand nombre de fois les solutions de cette équation (pour chaque valeur de E , ou de k de la grille qui permet de calculer une valeur approchée pour l'intégrale en k), à chaque itération où le potentiel appliqué est fixé. On a déjà énoncé pour ce problème un théorème d'existence et d'unicité des solutions (voir le Théorème 5.3.3, par ailleurs démontré dans [6]).

Le choix du potentiel modélisant les interactions électrostatiques

On propose pour la simulation numérique du transport électronique de se placer dans une approximation de *faibles densités*. Pour diminuer les coûts de calculs numériques, on choisit de travailler avec un potentiel appliqué, indépendant de la densité à l'intérieur de la zone active. Le système non linéaire de Schrödinger-Poisson est donc remplacé par un problème linéaire de Schrödinger. Pour prendre en compte les effets d'interactions électrostatiques dans les directions de confinement, ce potentiel appliqué sera tout de même choisi égal, au niveau des interfaces avec les réservoirs (source et drain), au potentiel de Poisson bidimensionnel calculé au cours du chapitre précédent. Rappelons que ce calcul fait appel à un problème non linéaire Schrödinger-Poisson bidimensionnel. Ainsi, on propose deux modèles différents :

- Dans un premier modèle très simple, proche d'un modèle monodimensionnel, on choisit un potentiel appliqué qui a une structure tensorielle, en découplant complètement les directions de confinement z et de transport x . Pour accélérer le transport des électrons, on fait intervenir la différence de potentiel entre la source et le drain en posant

$$\forall (x, z) \in \Omega_0, \quad V(x, z) := V^+(z) + \frac{x-a}{b-a} \times V_{DS} \quad (7.1.7)$$

où $V^+(z)$ est le potentiel de Poisson calculé dans la source grâce au chapitre précédent, et V_{DS} est la différence de potentiel entre la source et le drain. On

a bien conscience que ce modèle ne vérifie pas les données aux bords physiques du modèles de départ, mais c'est un cas test intéressant pour la validation du code numérique.

- On propose ensuite un deuxième modèle, plus physique. En effet, suivant une approximation *faibles densités*, on propose de résoudre l'équation elliptique qui correspond au potentiel de Poisson pour une densité nulle dans la zone active. Ainsi, on considère un potentiel harmonique avec les conditions aux bords données dans la section 5.2.2 du chapitre 5. On considère donc l'équation elliptique suivante pour le potentiel :

$$-\nabla(\epsilon_r(z)\nabla V) = 0, \quad x \in (a, b), \quad z \in \Sigma \quad (7.1.8a)$$

$$V(a, z) = V^+(z), \quad z \in \Gamma^+ \quad (7.1.8b)$$

$$V(b, z) = V^+(z) + V_{DS}, \quad z \in \Gamma^- \quad (7.1.8c)$$

$$V(x, z) = V_{GS}, \quad (x, z) \in \Gamma_{GS} \quad (7.1.8d)$$

$$\nabla V(x, z) = 0, \quad (x, z) \in \Gamma_N \quad (7.1.8e)$$

On validera cette hypothèse a posteriori en constatant que la densité obtenue dans la zone active est un ordre de grandeur en dessous de la densité dans les réservoirs.

7.1.2 Adimensionnement des équations

On choisit dans le cadre de cette simulation, de travailler avec des *grandeurs adimensionnées* afin de traiter des termes d'ordre 1. Pour cela, on reprend les grandeurs physiques intervenant dans les équations données plus haut, on les adimensionne toutes par une valeur caractéristique, et on intègre ces nouvelles grandeurs adimensionnées dans les équations. On choisit dès lors de poser :

$$\begin{aligned} x &= \tilde{x}L, \quad z = (z_1, z_2) = (\tilde{z}_1L, \tilde{z}_2L), \\ E &= \tilde{E}k_B T, \quad \mu = \tilde{\mu}k_B T, \quad k = \frac{\sqrt{2m^*k_B T}}{\hbar}\tilde{k}, \\ m &= m_e\tilde{m}, \quad \epsilon_r = \tilde{\epsilon}_r\epsilon_0, \\ \tilde{U}(\tilde{x}, \tilde{z}) &= \frac{-q}{k_B T}V(x, z) + \frac{q}{k_B T}V_{\text{Off}}, \\ \chi_m(z, x) &= \frac{1}{L}\tilde{\chi}_m(\tilde{z}, \tilde{x}), \quad \phi_m(x) = \tilde{\phi}_m(\tilde{x}), \quad \psi(x, z) = \frac{1}{L}\tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{z}) \\ n(x, z) &= N_0\tilde{n}(\tilde{x}, \tilde{z}), \quad \text{avec } N_0 := 10^{26}. \end{aligned}$$

On note par ailleurs, pour tout $\tilde{x} \in (\tilde{a}, \tilde{b})$, $\tilde{\Sigma}(\tilde{x}) := \{\tilde{z}, z \in \Sigma(x)\}$.

Équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D adimensionnée

L'équation qui permet la définition des fonctions propres de l'opérateur Hamiltonien transverse, le potentiel U étant fixé, et $x \in (a, b)$ étant un paramètre s'écrit, dans les grandeurs adimensionnées :

$$\frac{\hbar^2}{2L^2 m_e k_B T} \left[-\partial_1 \left(\frac{1}{\widetilde{m}_1(\widetilde{z})} \partial_1 \right) - \partial_2 \left(\frac{1}{\widetilde{m}_2(\widetilde{z})} \partial_2 \right) + \widetilde{U}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) \right] \widetilde{\chi}_m(\widetilde{z}, \widetilde{x}) = \widetilde{E}_m(\widetilde{x}) \widetilde{\chi}_m(\widetilde{z}, \widetilde{x}) \quad (7.1.9a)$$

$$\widetilde{\chi}_m(\widetilde{z}, \widetilde{x}) = 0, \quad \text{sur } \widetilde{\Gamma}(\widetilde{x}) \quad (7.1.9b)$$

$$\int_{\widetilde{\Sigma}(\widetilde{x})} \widetilde{\chi}_m(\widetilde{z}, \widetilde{x}) \widetilde{\chi}_p(\widetilde{z}, \widetilde{x}) d\widetilde{z} = \delta_{m,p}. \quad (7.1.9c)$$

On note que ce choix d'adimensionnement pour les fonctions propres $(\chi_m)_{m \geq 0}$ permet de garantir la propriété d'orthonormalité de la famille $(\widetilde{\chi}_m)_{m \geq 0}$.

Équation de Schrödinger ouverte 1D.

On adimensionne ici l'équation de Schrödinger 1D avec les conditions aux bords qui permettent de définir des conditions entrantes et sortantes pour la fonction d'onde. Si on note pour alléger l'écriture $\widetilde{\phi}_m^\varepsilon(\widetilde{x})$ la solution de l'équation 1D pour une injection par la source si $\varepsilon = 1$, par le drain si $\varepsilon = -1$, sur le mode i_0 et de vecteur d'onde k , $\phi_m^\varepsilon(\widetilde{x})$ est alors solution de :

$$-\widetilde{\phi}_m^{\varepsilon''} - 2 \sum_{j \geq 1} \widetilde{c}_{m,j}^{(1)} \widetilde{\phi}_j^{\varepsilon'}(\widetilde{x}) - \sum_{j \geq 1} \left(\widetilde{c}_{m,j}^{(2)} + \frac{2L^2 m_e k_B T}{\hbar^2} (\widetilde{E} - \widetilde{E}_j) \widetilde{c}_{m,j}^{(0)} \right) \widetilde{\phi}_j^\varepsilon = 0 \quad (7.1.10a)$$

$$\frac{d\widetilde{\phi}_m^\varepsilon}{dx}(\widetilde{a}) = \left(-i\delta_{m \leq I^+(\widetilde{E})} + \delta_{m \geq I^+(\widetilde{E})+1} \right) \widetilde{k}_m^+ \widetilde{\phi}_m^\varepsilon(\widetilde{a}) + 2i\widetilde{k}_m^+ \delta_{\varepsilon,+} \delta_{i_0,m} e^{ik_m^+ \widetilde{a}} \delta_{m \leq I^+(\widetilde{E})} \quad (7.1.10b)$$

$$\frac{d\widetilde{\phi}_m^\varepsilon}{dx}(\widetilde{b}) = \left(i\delta_{m \leq I^-(\widetilde{E})} - \delta_{m \geq I^-(\widetilde{E})+1} \right) \widetilde{k}_m^- \widetilde{\phi}_m^\varepsilon(\widetilde{b}) - 2i\widetilde{k}_m^- \delta_{\varepsilon,-} \delta_{i_0,m} e^{-ik_m^- \widetilde{b}} \delta_{m \leq I^-(\widetilde{E})} \quad (7.1.10c)$$

où

$$\widetilde{c}_{m,j}^{(0)}(\widetilde{x}) = \int_{\widetilde{\Sigma}(\widetilde{x})} \widetilde{m}_x(\widetilde{z}) \widetilde{\chi}_j(\widetilde{z}, \widetilde{x}) \widetilde{\chi}_m(\widetilde{z}, \widetilde{x}) d\widetilde{z} \quad (7.1.11a)$$

$$\widetilde{c}_{m,j}^{(1)}(\widetilde{x}) = \int_{\widetilde{\Sigma}(\widetilde{x})} \partial_x \widetilde{\chi}_j(\widetilde{z}, \widetilde{x}) \widetilde{\chi}_m(\widetilde{z}, \widetilde{x}) d\widetilde{z} \quad (7.1.11b)$$

$$\widetilde{c}_{m,j}^{(2)}(\widetilde{x}) = \int_{\widetilde{\Sigma}(\widetilde{x})} \partial_x^2 \widetilde{\chi}_j(\widetilde{z}, \widetilde{x}) \widetilde{\chi}_m(\widetilde{z}, \widetilde{x}) d\widetilde{z}, \quad (7.1.11c)$$

avec $\widetilde{E} := \widetilde{E}_{i_0}^\varepsilon + \widetilde{k}^2$ et

$$\widetilde{I}^\pm(\widetilde{E}) := \sup \{m \geq 1, \widetilde{E} > \widetilde{E}_m^\pm\}, \quad \widetilde{k}_m^\pm(\widetilde{E}) := \sqrt{\frac{2L^2 m^* k_B T}{\hbar^2} |\widetilde{E}_m^\pm - \widetilde{E}|}.$$

Équation sur le potentiel

On a vu que le potentiel dimensionné $U(x, z)$ qui modélise à la fois l'interaction électrostatique entre les électrons et l'interaction entre les électrons et le cristal est choisi sous la forme

$$U(x, z) := -qV(x, z) + qV_{\text{Off}}.$$

Ici, q désigne la charge élémentaire de l'électron, $V(x, z)$ le potentiel de d'interaction électrostatique qui est donné par résout l'équation elliptique sur le potentiel (5.2.3), et V_{Off} , qui ne dépend que du matériau, est donné. Le potentiel $\widetilde{U}(x, z)$ adimensionné s'écrit alors

$$\widetilde{U}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) := -\frac{q}{k_B T} \widetilde{V}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) + \frac{q}{k_B T} V_{\text{Off}} := \widetilde{U}_{\text{app}}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) + \widetilde{U}_{\text{Off}}$$

où $\widetilde{U}_{\text{app}}$ est l'énergie associée au potentiel d'interaction électrostatique. Ici, $\widetilde{U}_{\text{app}}(\widetilde{x}, \widetilde{z})$ est donné, selon le modèle par :

- l'adimensionnement de l'équation (7.1.7)

$$\widetilde{U}_{\text{app}}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) = \widetilde{U}^+(\widetilde{z}) + \frac{\widetilde{x} - \widetilde{a}}{\widetilde{b} - \widetilde{a}} \times \widetilde{U}_{DS}$$

- l'équation elliptique adimensionnée suivante :

$$\nabla \left(\varepsilon_r(\widetilde{z}) \nabla \widetilde{U}_{\text{app}} \right) = 0, \quad (\widetilde{x}, \widetilde{z}) \in \widetilde{\Omega}_0 \quad (7.1.12a)$$

$$\widetilde{U}_{\text{app}}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) = \widetilde{U}_{GS}, \quad (\widetilde{x}, \widetilde{z}) \in \widetilde{\Gamma}_{GS} \quad (7.1.12b)$$

$$\nabla_z \widetilde{U}_{\text{app}}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) = 0, \quad (\widetilde{x}, \widetilde{z}) \in \widetilde{\Gamma}_N \quad (7.1.12c)$$

$$\widetilde{U}_{\text{app}}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) = \widetilde{U}^\pm(\widetilde{z}), \quad (\widetilde{x}, \widetilde{z}) \in \widetilde{\Sigma}^\pm. \quad (7.1.12d)$$

Expression de la densité et du courant adimensionnés

En utilisant les équations adimensionnées précédentes ainsi que les expressions que l'on a données dans le chapitre précédent pour le calcul de la densité (5.3.32) et de l'intensité du courant à travers Σ^- (5.3.36), on aboutit aux expressions suivantes en fonction des grandeurs adimensionnées :

$$\widetilde{n}(\widetilde{x}, \widetilde{z}) := \frac{\sqrt{2m^* k_B T}}{\pi L^2 \hbar N_0} \sum_{\varepsilon=+,-} \sum_{i_0 \geq 1} \int_0^\infty |\widetilde{\psi}_{i_0, \widetilde{k} \sqrt{2m^* k_B T} / \hbar}^\varepsilon(\widetilde{x}, \widetilde{z})|^2 \frac{d\widetilde{k}}{1 + e^{\frac{\widetilde{E}_{i_0}^\varepsilon + \widetilde{k}^2 - \mu^\varepsilon}{k_B T}}} \quad (7.1.13)$$

et

$$I_D := \frac{q\sqrt{k_B T}}{L\pi\sqrt{2m^*}} \sum_{\varepsilon=+,-} \sum_{i_0 \geq 1} \int_0^\infty \int_{\widetilde{\Sigma}^-} \Im(\widetilde{\psi}_{i_0, \widetilde{k}\sqrt{2m^*k_B T}/\hbar}^\varepsilon(\widetilde{b}, \widetilde{z})) \times \partial_x \widetilde{\psi}_{i_0, \widetilde{k}\sqrt{2m^*k_B T}/\hbar}^\varepsilon(\widetilde{b}, \widetilde{z}) d\widetilde{z} \frac{d\widetilde{k}}{1 + e^{\widetilde{E}_{i_0}^\varepsilon + \widetilde{k}^2 - \widetilde{\mu}^\varepsilon}} \quad (7.1.14)$$

7.2 Mise en œuvre numérique

7.2.1 Organigramme général

On présente ici l'organigramme général de l'algorithme qui permet la simulation du transport des électrons dans la zone active. Seules les grandes étapes sont données ici, puis on explique le principe de chaque étape fondamentale. Un algorithme détaillé de chaque opération est donné dans la section 7.2.4.

1. Calcul du potentiel U_{app} en fonction des conditions aux limites appliquées.
2. Pour chaque x de (a, b) , calcul de la densité électronique totale dans $\Sigma(x)$ grâce à la formule (7.1.13).
3. Calcul du courant I_{DS} en b à partir de la formule (7.1.14).

7.2.2 Procédure de calcul de la densité et du courant

Le calcul de la densité à partir de la donnée du potentiel calculé en première étape nécessite la résolution d'un grand nombre d'équations de Schrödinger en fonction du paramètre d'énergie comme indiqué dans l'organigramme général. On se propose ici de détailler les étapes une à une pour présenter les méthodes numériques mises en œuvre pour chacune d'elles.

1. Pour chaque x de la grille de discrétisation de $(\widetilde{a}, \widetilde{b})$, calculer les valeurs propres et fonctions propres $\widetilde{E}_m(\widetilde{x})$ et $\widetilde{\chi}_m$ solutions du problème (7.1.9) posé dans $\widetilde{\Sigma}(\widetilde{x})$.
2. Pour chaque x de la grille de discrétisation de $(\widetilde{a}, \widetilde{b})$ et chaque m , calculer $\partial_x \widetilde{\chi}_m$ et $\partial_x^2 \widetilde{\chi}_m$.
3. Pour chaque x de la grille de discrétisation de $(\widetilde{a}, \widetilde{b})$, pour chaque m , et chaque j , calculer les coefficients $\widetilde{c}_{m,j}^{(0)}(\widetilde{x})$, $\widetilde{c}_{m,j}^{(1)}(\widetilde{x})$, $\widetilde{c}_{m,j}^{(2)}(\widetilde{x})$

4. Calculer les fonctions d'ondes longitudinales $\widetilde{\phi}_{m,i_0,k}^\varepsilon$ solutions de (7.1.10) pour chaque m , i_0 , ε et chaque k .
5. Calculer la densité électronique

Pour le calcul du courant, la différence principale par rapport au calcul de la densité est la dérivée dans la variable de transport x de la fonction d'onde. On rajoute donc au niveau de l'étape (4) le calcul des dérivées selon x des fonctions d'onde longitudinales $\widetilde{\phi}_m^\varepsilon$. Le calcul de $\partial_x \widetilde{\psi}_{i_0,k_0}^\varepsilon$ se fait donc par des combinaisons de $\widetilde{\phi}_{m,i_0,k_0}^\varepsilon$, de $\widetilde{\chi}_m$, de $\partial_x \widetilde{\phi}_{i_0,k_0}^\varepsilon$ et de $\partial_x \widetilde{\chi}_m$. La procédure de calcul du courant s'écrit alors de manière plus détaillée comme suit.

1. Pour chaque x de la grille de discrétisation de $(\widetilde{a}, \widetilde{b})$, calculer les valeurs propres et fonctions propres $\widetilde{E}_m(\widetilde{x})$ et $\widetilde{\chi}_m$ solutions du problème (7.1.9) posé dans $\widetilde{\Sigma}(\widetilde{x})$.
2. Pour chaque x de la grille de discrétisation de $(\widetilde{a}, \widetilde{b})$ et chaque m , calculer $\partial_x \widetilde{\chi}_m$ et $\partial_x^2 \widetilde{\chi}_m$.
3. Pour chaque x de la grille de discrétisation de $(\widetilde{a}, \widetilde{b})$, pour chaque m , et chaque j , calculer les coefficients $\widetilde{c}_{m,j}^{(0)}(\widetilde{x})$, $\widetilde{c}_{m,j}^{(1)}(\widetilde{x})$, $\widetilde{c}_{m,j}^{(2)}(\widetilde{x})$
4. Calculer les fonctions d'ondes longitudinales $\widetilde{\phi}_{m,i_0,k}^\varepsilon$ solution de (7.1.10) pour chaque m , pour chaque $\varepsilon = \pm$, pour chaque k , et chaque i_0 .
5. Calculer les dérivées en x des fonctions d'ondes longitudinales $\partial_x \widetilde{\phi}_{m,i_0,k}^\varepsilon$ pour chaque m , pour chaque $\varepsilon = \pm$, pour chaque k , et chaque i_0 .
6. Calculer $\widetilde{\psi}_{i_0,k}^\varepsilon$ et de $\partial_x \widetilde{\psi}_{i_0,k}^\varepsilon$.
7. Calculer le courant.

L'étape préliminaire qui consiste à calculer le potentiel appliqué nécessite, dans le cas du modèle utilisant un potentiel harmonique, la résolution d'une équation elliptique 3D sur le potentiel. On utilise une méthode élément finis nodaux 3D pour la résolution de cette équation elliptique, sur un maillage que l'on précise dans la section suivante.

L'étape 1 requiert un grand nombre de résolution de problèmes aux valeurs propres bidimensionnels dans la section $\widetilde{\Sigma}(\widetilde{x})$. Pour cela, on utilise comme précédemment dans le Chapitre 6 une méthode éléments finis nodaux 2D d'ordre élevé

(ici Q5) sur le maillage présenté dans la section (7.2.3). On rappelle enfin, que la méthode de décomposition en sous-bandes ne requiert en pratique qu'un petit nombre de modes, ce qui conduit à la réduction du nombre de telles équations à résoudre. En pratique, on ne considère en effet que 3 à 4 modes propres.

Pour l'étape 2, on calcule les dérivées en x des vecteurs propres transverses $\widetilde{\chi}_m$ par une méthode de différences divisées. Il a été envisagé d'utiliser une approximation par splines cubiques, mais la méthode des différences divisées s'avère être suffisamment précise.

L'étape 3 consiste à calculer les coefficients de l'équation de Schrödinger ouverte 1D. Les intégrales sur la section transverse qui définissent les coefficients $\widetilde{c}_{m,j}^{(k)}$ par les équations (7.1.11) pour m et j variant en pratique entre 1 et 4 et k valant 0, 1 ou 2 sont évaluées au sens des éléments finis. On profite ainsi des matrices éléments finis déjà calculées précédemment et de la précision apportée par le haut degré de la méthode.

L'étape 4 nécessite la résolution de l'équation de Schrödinger ouverte 1D à coefficients variables en fonction de x et à conditions transparentes au bord. Pour cela, on résout le problème par une méthode éléments finis 1D sur une grille de discrétisation sur laquelle on connaît les valeurs des coefficients. Ici, on a programmé un code qui permet d'assembler des matrices éléments finis par bloc pour travailler sur des problèmes EDO couplés en dimension 1, avec des coefficients variables, calculés séparément et des conditions aux bords de type Robin Fourier.

L'étape 5, spécifique au calcul du courant est l'étape de dérivation des fonctions d'onde longitudinales. Pour cela, on réutilise les matrices éléments finis du problème de Schrödinger 1D.

Le calcul de l'intégrale en énergie intervenant dans la dernière étape pour les calculs de densité ainsi que de courant se font par une méthode de Gauss-Legendre. On exploite en effet la décroissance exponentielle en k de la fonction à intégrer, due à la présence de la fonction de Fermi-Dirac, pour se restreindre à un intervalle borné en énergie, bien choisi.

7.2.3 Maillages

L'implémentation de la méthode éléments finis 2D utilisée

1. pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger aux valeurs propres 2D dans la section $\Sigma(x)$,
2. pour le calcul des intégrales sur la section $\Sigma(x)$ qui interviennent dans les formules (7.1.11) donnant les coefficients $\widetilde{c}_{m,j}^{(k)}$

requiert un maillage de la section $\Sigma(x)$.

Un premier intérêt de la librairie MÉLINA est qu'elle s'adapte simplement (par exemple par de la programmation Shell) à des changements de maillages. En effet, le principe de cette librairie est de définir plusieurs fichiers, dont un fichier de Directives, à part du corps du programme, dans lequel sont définis les maillages, les opérateurs différentiels et les conditions de bord. Ici, pour simplifier, on a choisi de travailler avec une section Σ constante, mais il est envisagé pour des travaux futurs de travailler avec des sections éventuellement variables avec x . Dans ce cas, on pourra simplement définir un fichier Directive paramétré par x dans lequel le maillage peut changer en fonction de x . Ici, on suppose que la section ne dépend pas de x et on reprend donc les maillages du Chapitre 6 pour la résolution de ce problème.

Un deuxième avantage de MÉLINA a été évoqué précédemment. Il s'agit de la possibilité de définir les opérateurs différentiels sur des sous-domaines pour qu'ils soient par la suite automatiquement assemblés sur le domaine global.

La résolution de l'équation de Schrödinger 1D couplée avec conditions transparentes se fait sur une grille (a, b) en x , assez fine pour avoir une bonne précision des valeurs en chaque point. Néanmoins, les valeurs des coefficients doivent être données en chaque nœud du maillage. Ici, une interpolation par splines des coefficients a été envisagée pour permettre de gagner du temps de calcul en utilisant des maillages 1D plus grossiers.

La résolution du problème elliptique 3D par éléments finis nécessite enfin un maillage tensoriel qui puisse être compatible avec la résolution "en section" de la procédure de calcul de la densité.

Dans ce chapitre, on s'est consacré au dispositif à section rectangulaire introduit au chapitre précédent. La librairie MÉLINA n'étant pas à ce jour pourvue de meilleur, on a fabriqué le maillage suivant, en définissant les deux sous-domaines correspondant aux deux composants physiques. Le maillage par triangles est choisi pour être adapté à cette décomposition en sous-domaines pour une meilleure précision à l'interface entre les deux domaines.

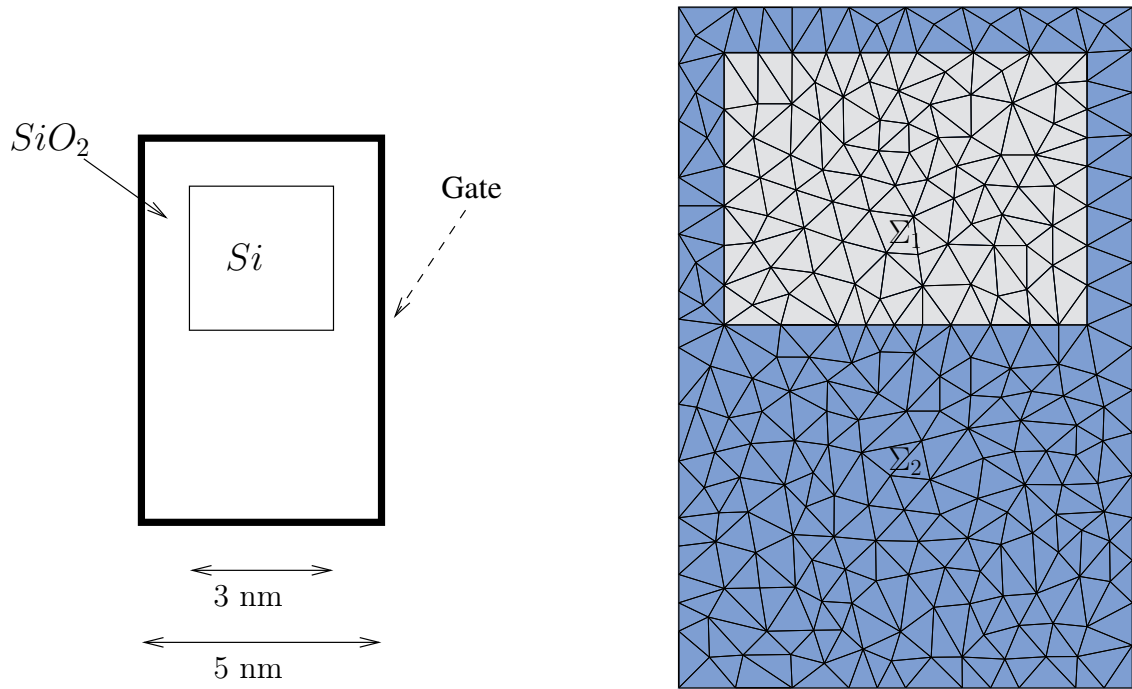


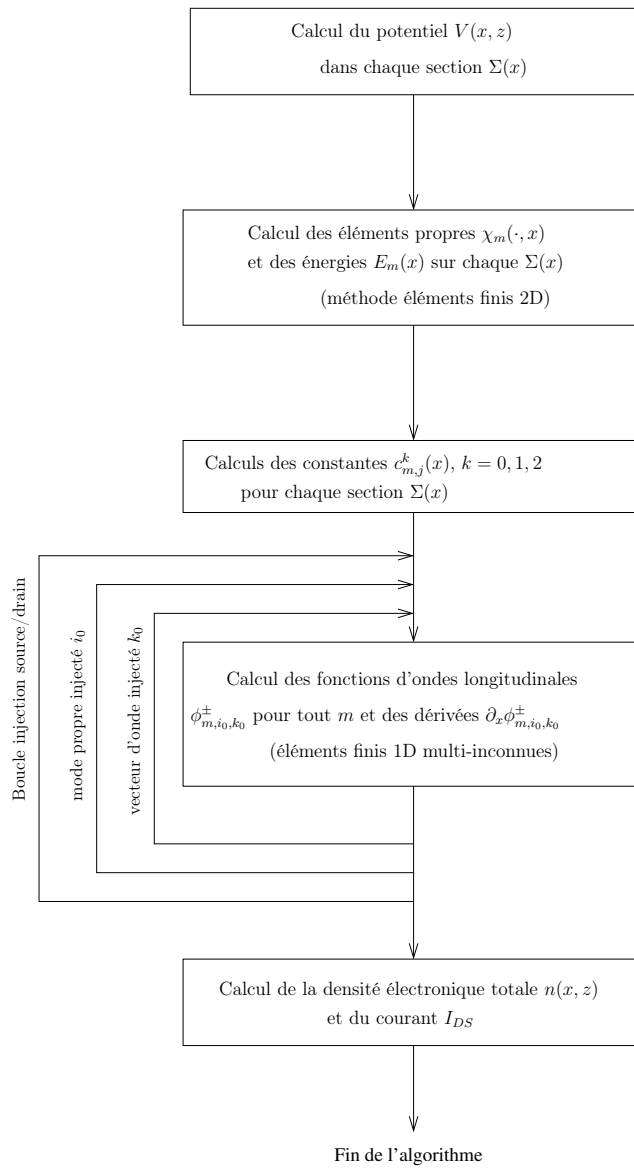
FIG. 7.1 – Section carrée

7.2.4 Organigramme récapitulatif de l'algorithme

On présente maintenant le schéma suivant qui récapitule toutes les étapes de la résolution numérique du problème de transport des électrons dans le dispositif.

Il est à noter que l'on initialise l'algorithme avec un potentiel nul. Enfin, le calcul de la densité et du courant donnés par les formules (7.1.13) et (7.1.14) nécessitent de connaître les potentiels chimiques associés à la source et au drain. La différence principale entre ces deux modélisations tient avant tout à l'hypothèse *d'équilibre thermodynamique* des guides. Pour les simulations numériques, on utilise ainsi les potentiels calculés par l'algorithme présenté dans le chapitre suivant 6.

FIG. 7.2 – Algorithme d'approximation de la densité dans la zone active



7.3 Résultats numériques

Cas du potentiel appliqué défini par $V^+(z) + \frac{x-a}{b-a} \times V_{DS}$

On utilise l'algorithme pour calculer le courant et la densité à l'intérieur de la zone active avec le modèle simplifié où le potentiel est donné par (7.1.7). On commence par le calcul du courant dans le but d'obtenir une courbe courant-tension qui représente l'évolution du courant I_{DS} en fonction de la différence de potentiel V_D appliquée entre

les interfaces 'source-zone active' et 'zone-active-drain'. On obtient alors la courbe suivante :

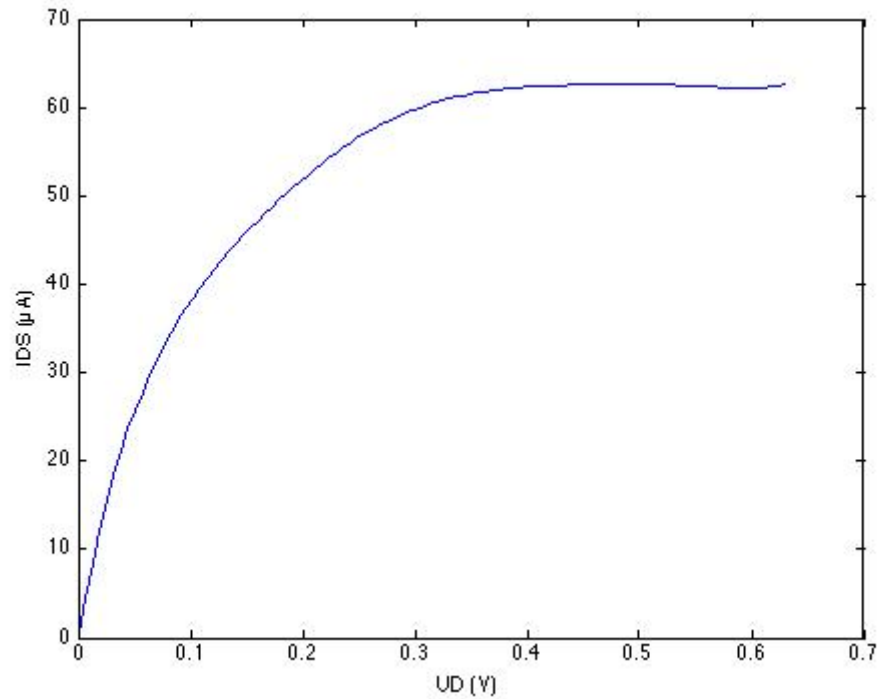


FIG. 7.3 – Courbe courant-tension (la zone active se situe entre $x = 8\text{nm}$ et $x = 18\text{nm}$)

Par ailleurs, on calcule la densité sur chaque section pour x dans la zone active, et on calcule la densité linéique correspondant par une méthode d'intégration numérique utilisant la matrice de masse calculée sur la section dans la méthode éléments finis. On obtient la courbe représentant l'évolution de la densité linéique dans la zone active en fonction de x (la zone active se situe entre les abscisses $x = 8\text{nm}$ et $x = 18\text{nm}$) qui suit. Pour comparaison, on a tracé sur la figure la fraction de la source comprise entre $x = 6\text{nm}$ et $x = 8\text{nm}$ la densité linéique correspondant au dopage de la source, ainsi que la fraction du drain comprise entre $x = 18\text{nm}$ et $x = 20\text{nm}$.

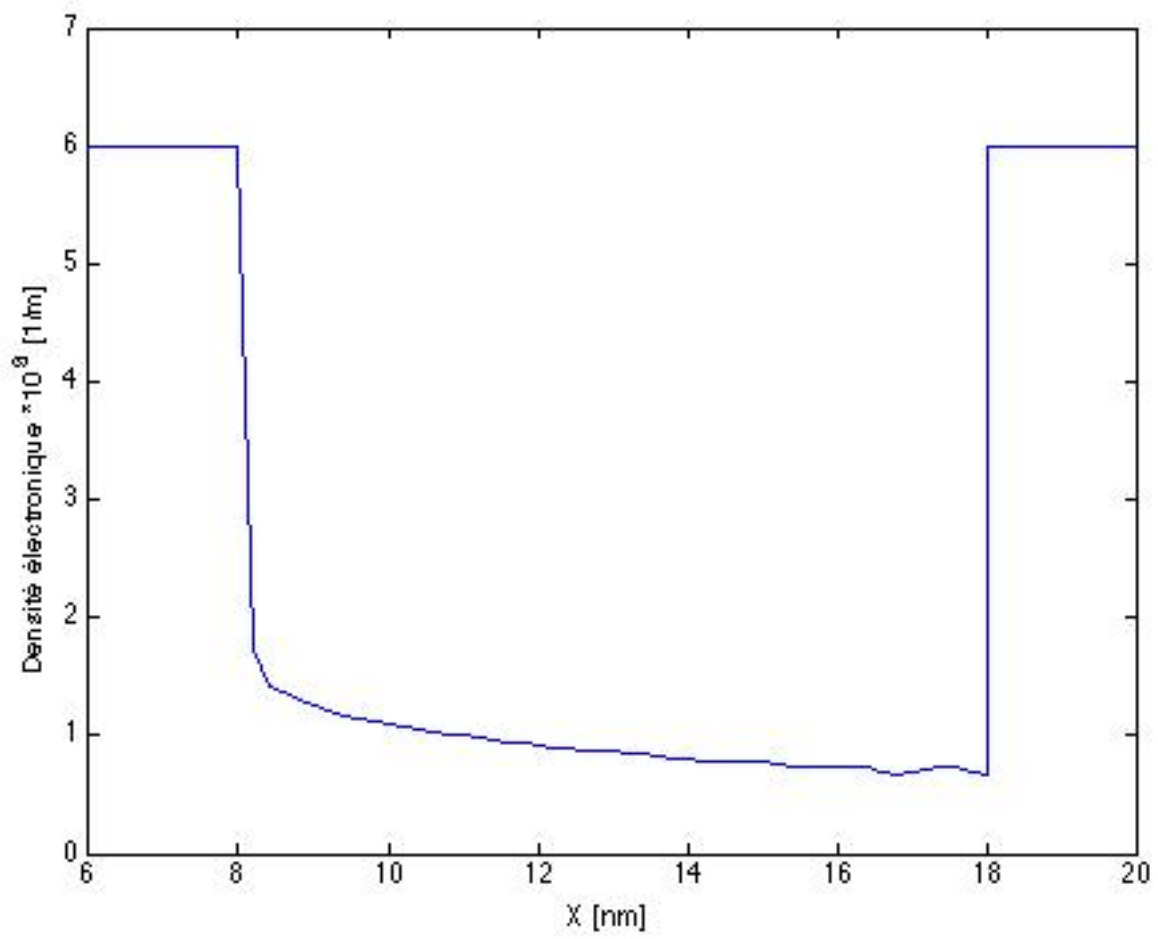


FIG. 7.4 – Courbe de la densité linéique ($\times 10^8/\text{m}$) en fonction de l'abscisse x

Cas du potentiel harmonique avec les conditions aux limites physiques

On s'intéresse maintenant au cas du deuxième potentiel donné par (7.1.8) qui s'approche du potentiel tridimensionnel de Poisson dans le cas de faibles densités. En fixant deux valeurs de V_{GS} (en l'occurrence $V_{GS} = 0.2V$ ou $V_{GS} = 0.4V$), on trace les valeurs du courant I_{DS} en fonction de la valeur de la différence de potentiel entre la source et le drain V_{DS} . On obtient la courbe courant-tension, caractéristique du composant suivante.

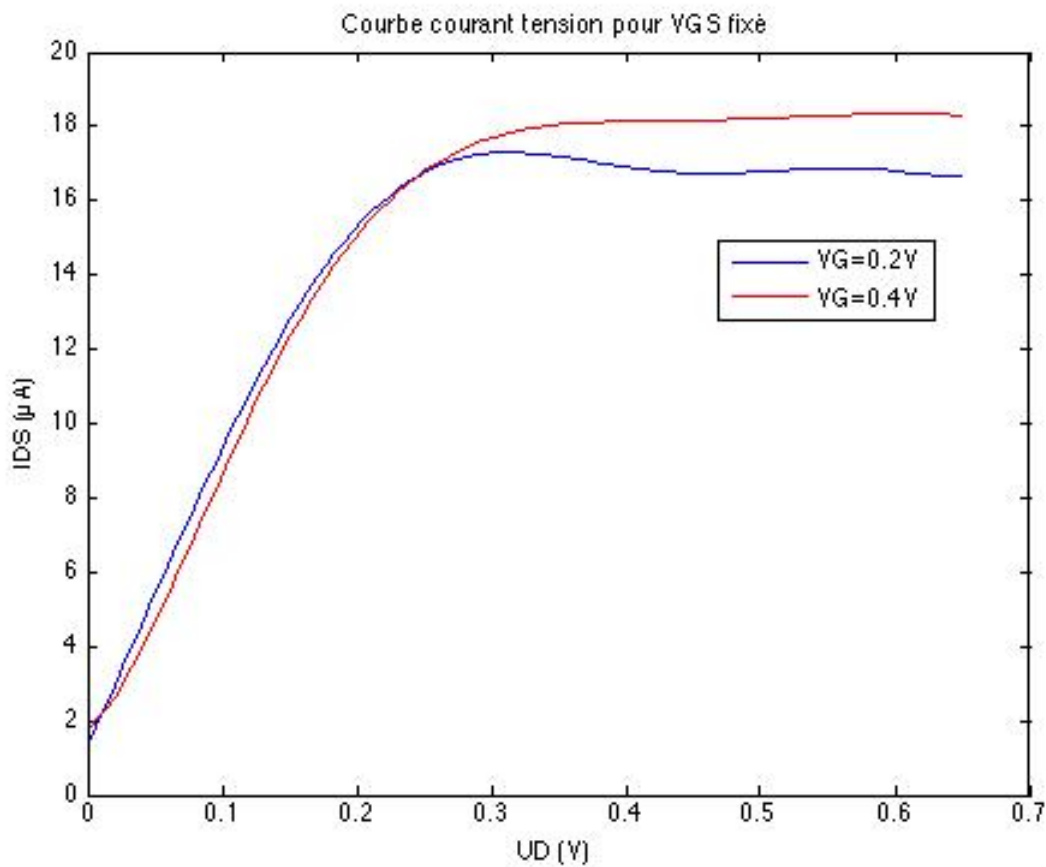


FIG. 7.5 – Courbe courant-tension (la zone active se situe entre $x = 8nm$ et $x = 18nm$)

De même que précédemment, on calcule la densité sur chaque section $x \in (a, b)$, et on calcule la densité linéique en fonction de x . On trace ici la densité linéique pour un potentiel de grille $V_{GS} = 0.4V$.

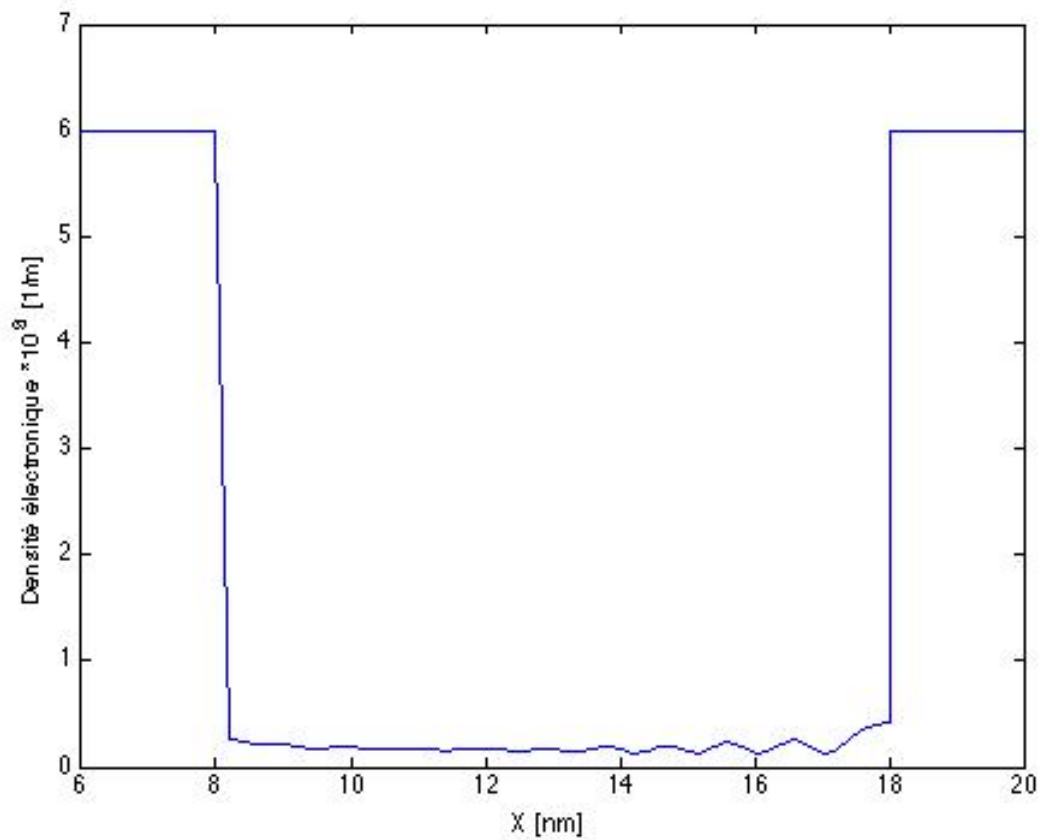


FIG. 7.6 – Densité linéique (en $\times 10^8/\text{m}$) en fonction de l'abscisse x .

Il est à noter que ces résultats numériques sont cohérents avec des résultats présentés dans la littérature physique pour le même composant physique : simulations Schrödinger-Poisson dans une approximation "quasi-3D" résolue par la méthode des fonctions de Green pour [24] ou résultats expérimentaux pour [12]. On peut donc a posteriori valider cette approche "faibles densités".

On représente maintenant la densité des électrons dans ce cas dans la source, sur les sections $x = 13\text{nm}$ (au centre de la zone active) et $x = 17.9\text{nm}$ (à l'interface entre la zone active et le drain, dans la zone active).

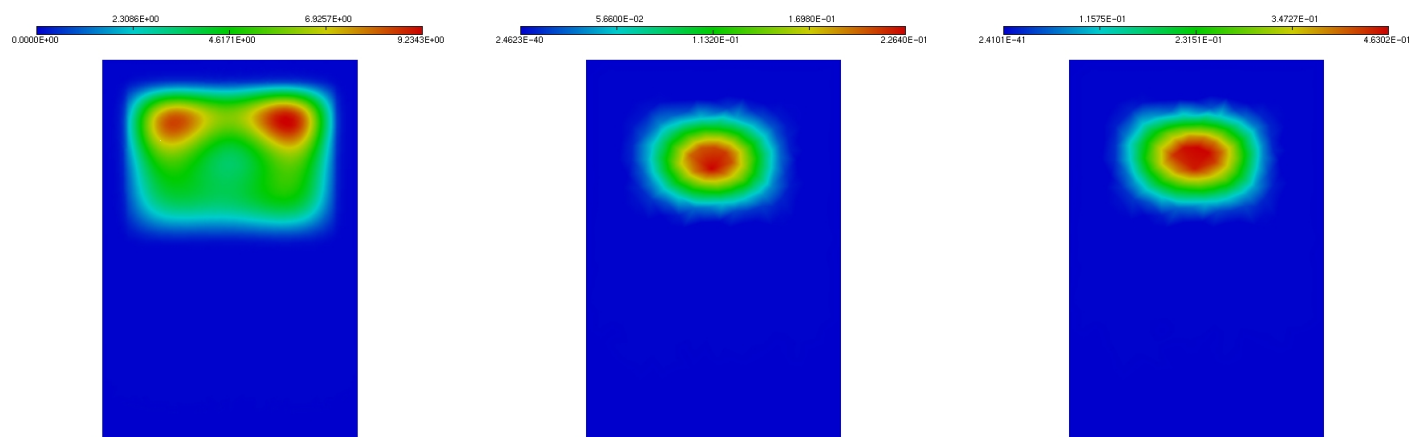
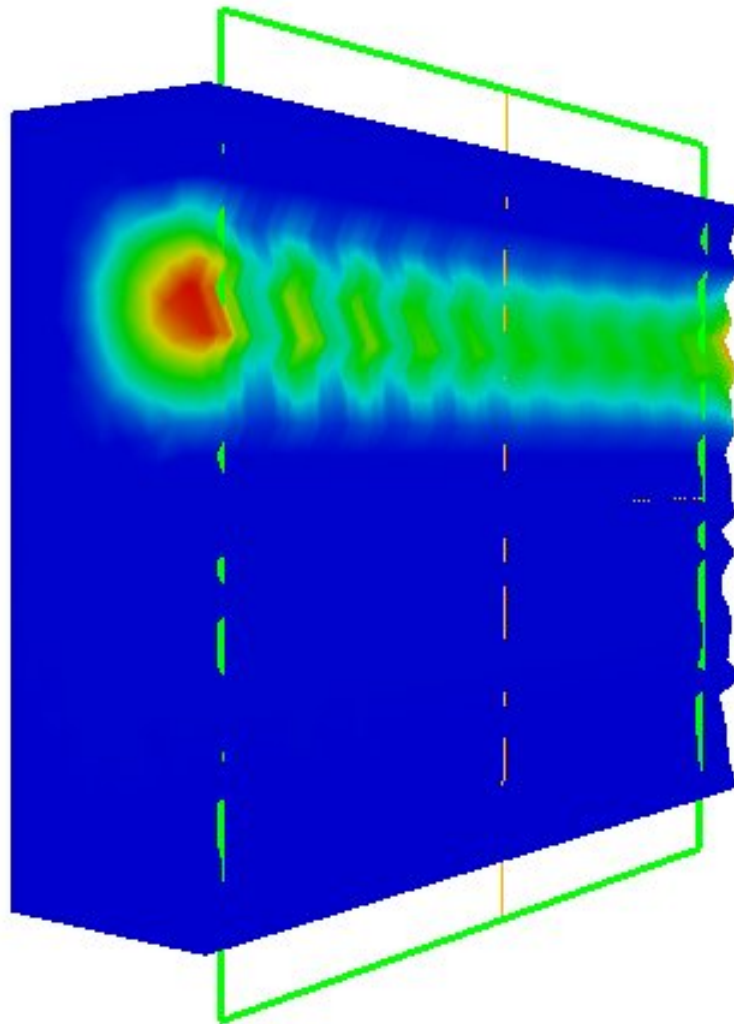


FIG. 7.7 – Densité des électrons dans la source, la section $x = 13\text{nm}$ et la section $x = 17.9\text{nm}$

Comme attendu, on voit bien que dans la zone active les électrons sont plus fortement confinés au centre du dispositif. Cet effet est produit par l'application d'une différence de potentiel V_{GS} entre la grille et la source. Dans le cas ci-dessous, on a pris $V_{GS} = 0.4V$ et $V_{DS} = 0.4V$.

On représente enfin l'évolution dans la zone active de la densité sur le schéma 3D suivant (les valeurs présentées ici sont adimensionnées) :

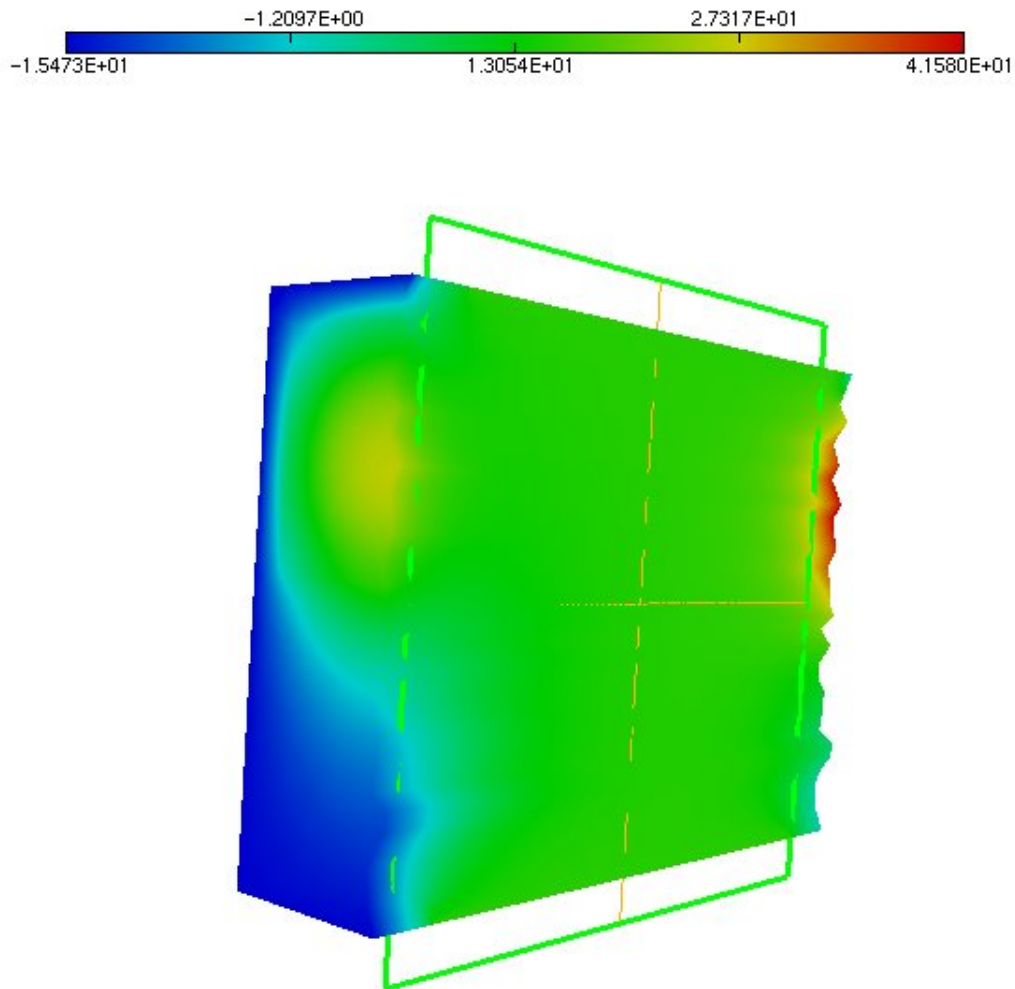


Eqn: $-1x + 0.44 = 0$

FIG. 7.8 – Densité des électrons dans la zone active ($x \in (a, b)$), $V_{GS} = V_{DS} = 0.4V$.

A présent, on représente sur le maillage tridimensionnel le potentiel $U(x, z)$ calculé

dans la zone active du composant (solution de (7.1.8)). Il est à noter que les valeurs représentées sont adimensionnées.



Eqn: $-1x + 0.44 = 0$

FIG. 7.9 – Potentiel $U(x, z)$ dans la zone active ($x \in (a, b)$)

Finalement, on représente le potentiel $U(x, z)$ dans la source, puis dans les sections $x = 13nm$ et $x = 17.9nm$

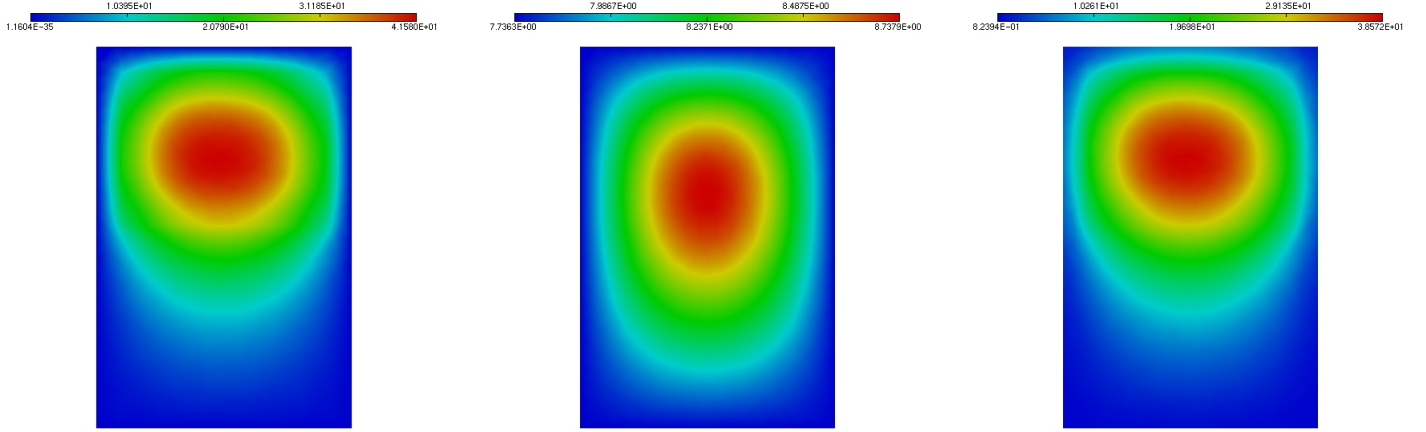


FIG. 7.10 – Potentiel $U(x, z)$ dans les sections $x = a$, $x = 13nm$ et $x = 17.9nm$.

7.4 Perspectives : Résolution numérique du système de Schrödinger-Poisson

On a fait dans ce chapitre l'approximation "faibles densités" en modélisant les interactions électrostatiques par un potentiel qui vérifie (7.1.8). On envisage dans la suite de ce travail de s'affranchir de cette approximation et ainsi de modéliser le potentiel d'interaction électrostatique par un potentiel de Poisson tridimensionnel couplé à l'équation de Schrödinger. Le potentiel vérifie alors l'équation suivante :

$$\begin{aligned}
 -\nabla(\epsilon_r \nabla V) &= \frac{1}{\epsilon_0} \rho \quad (x, z) \in \Omega_0 \\
 V &= V_{GS}, \quad (x, z) \in \Gamma_{GS} \\
 \nabla_z V &= 0, \quad (x, z) \in \Gamma_N \\
 &+ \text{conditions de Robin Fourier sur } \Sigma^+ \text{ et } \Sigma^-
 \end{aligned}$$

où ϵ_0 est la permittivité électrique du vide, et ϵ_r est la constante diélectrique relative de chaque matériau semi-conducteur : $\epsilon_{rSi} = 11.9$ pour le Silicium et $\epsilon_{rSiO_2} = 3.9$ pour l'oxyde.

Après adimensionnement, le potentiel faisant intervenir les interactions électrostatiques et les interactions avec le cristal s'écrit alors

$$\tilde{U}(\tilde{x}, \tilde{z}) := -\frac{q}{k_B T} \tilde{V}(\tilde{x}, \tilde{z}) + \frac{q}{k_B T} V_{\text{Off}} := \tilde{U}_{\text{poiss}}(\tilde{x}, \tilde{z}) + \tilde{U}_{\text{Off}}.$$

Le potentiel de Poisson vérifie finalement le problème elliptique 3D suivant :

$$-\frac{k_B T \varepsilon_0}{q^2 L^2 N_0} \nabla \left(\varepsilon_r(\tilde{z}) \nabla \tilde{U}_{\text{poiss}} \right) = \tilde{n}(\tilde{x}, \tilde{z}) - N_{\text{dop}} \quad (7.4.1a)$$

$$\tilde{U}_{\text{poiss}}(x, z) = \widetilde{U}_{GS}, \quad (x, z) \in \widetilde{\Gamma}_{GS} \quad (7.4.1b)$$

$$\nabla_z \tilde{U}_{\text{poiss}}(x, z) = 0, \quad (x, z) \in \widetilde{\Gamma}_N \quad (7.4.1c)$$

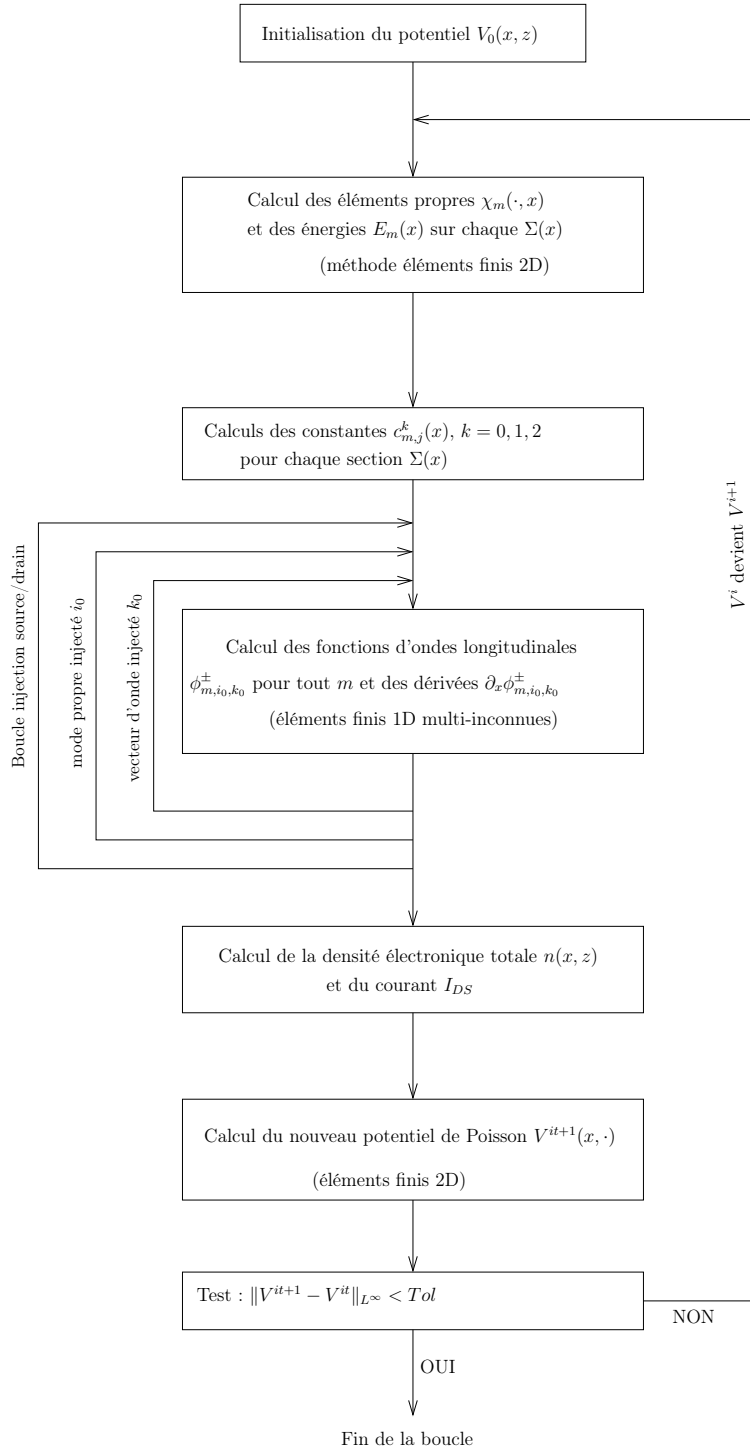
$$+ \text{conditions de Robin Fourier sur } \widetilde{\Sigma}^\pm \quad (7.4.1d)$$

avec N_{dop} la densité de dopage adimensionnée.

Le nouveau problème global auquel on est confronté est alors très différent du fait de ce couplage. En effet, l'algorithme commence alors par une phase d'initialisation du potentiel (qui pourra être choisi par exemple comme le potentiel harmonique calculé précédemment). Ensuite, chaque pas i de l'algorithme consiste à calculer, à partir du potentiel U_{i-1} calculé à l'étape $i - 1$, la densité n_i et ainsi le potentiel U_i associé à cette nouvelle densité. L'algorithme se termine lorsque la différence (en norme infinie sur chaque section) entre V_{i+1} et V_i est suffisamment petite. Chaque calcul de densité à l'intérieur de chaque pas de l'algorithme se fait comme présenté précédemment.

On peut dans ce cas donner le schéma suivant pour ce nouvel algorithme.

FIG. 7.11 – Algorithme d'approximation de la densité dans la zone active



Bibliographie

- [1] Antoine, X. ; Arnold, A. ; Besse, C. ; Ehrhardt M. ; and Schädle, A. *A Review of Transparent and Artificial Boundary Conditions Techniques for Linear and Nonlinear Schrödinger Equations*, Communications in Computational Physics **4** (4) (2008), pp. 729-796
- [2] Antoine, X. ; Besse, C. *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.
- [3] Arnold, A. *Self-consistent relaxation-time models in quantum mechanics*, Comm. PDE, **21**, (1996) no.3-4, 473–506.
- [4] Arnold, A. *Numerical absorbing boundary conditions for quantum evolution equations*, VLSI Design **6**,(1998), 313–319.
- [5] Arnold, A. ; Ehrhardt, M. ; *Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation*, Riv. Mat. Univ. Parma **6**, (2001), no. 4 57–108 .
- [6] Ben Abdallah, N. *On a multidimensional Schrödinger-Poisson Scattering Model for semiconductors*, J. Math. Phys. **41**, (2000),no. 7, 4241–4261.
- [7] Ben Abdallah, N ; Degond, P. ; Markowich, P. A. *On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model*, Z. Angew. Math. Phys. **48**, (1997), no.1, 135–155.
- [8] Ben Abdallah, N. ; Pinaud, O. *On an open transient Schrödinger-Poisson system*, Math. Models Methods Appl. Sci. **15** (2005), 667–688.
- [9] Ben Abdallah, N. ; Polizzi, E. *Self-consistent three dimensional model for quantum ballistic transport in open systems*, Phys. Rev B. **66** (2002), 245301-245309.
- [10] Ben Abdallah, N. ; Polizzi, E. ; *Subband decomposition approach for the simulation of quantum electron transport in nanostructures*, J. Comp. Physics, **202** (1), (2005), 150–180.
- [11] Brezzi, F. ; Markowich, P. A. *The three dimensional Wigner -Poisson Problem : existence, uniqueness and approximation*, Math. Methods Appl. Sci. **14** (1991), no. 1, 35–61.

- [12] Cho, K. H. ; Yeo, K. H. ; Yeoh, Y. Y. ; Suk, S. D. ; Li, M. ; Lee, J. M. ; Kim, M.-S. ; Kim, D.-W. ; Park, D. ; Hong, B. H. ; Jung, Y. C. ; Hwang, S. W. *Experimental evidence of ballistic transport in cylindrical gate-all-around twin silicon nanowire metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*, Applied Physics Letters, **92** no 5 (2008).
- [13] Illner, R. ; Zweifel, P.F. ; Lange, H. *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.
- [14] Lent, C.S. ; Kirkner, D.J. *The quantum transmitting boundary method*, J. Appl. Phys. **67**, (1990), 6353-6359
- [15] N. ; Negulescu, Ben Abdallah, C. ; Mouis, M. *An accelerated algorithm for 2D simulations of the quantum ballistic transport in nanoscale MOSFETs*, Journal of Computational Physics **225** no. (1), (2007), 74-99.
- [16] Martin, D. MÉLINA, bibliothèque de calculs éléments finis.
[http ://perso.univ-rennes1.fr/daniel.martin/melina](http://perso.univ-rennes1.fr/daniel.martin/melina) (2002).
- [17] Racec, P. N. ; Racec E. R. ; Neidhardt, H. *Evanescent channels and scattering in cylindrical nanowire heterostructures*, Phys Rev B **79** (2009), p. 155305–155319.
- [18] Negulescu, C. ; Thèse de doctorat (2005), Toulouse.
- [19] Nier, F. *A Stationary Schrödinger-Poisson system arising from the modelling of electronic devices*, Forum Math. **2**, (1993), no.5, 489–510.
- [20] Nier, F. *Schrödinger-Poisson systems in Dimension $d \leq 3$: The whole space case*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A **123**, (1993), no. 5, 1179–1201.
- [21] Nier, F. *A variational formulation of Schrödinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$* , Comm. Partial Di. Eq. **18** (1993), no. 7-8, 1125–1147.
- [22] Nier, F. ; Thèse de doctorat.
- [23] E. Polizzi, thèse de doctorat (2001), Toulouse.
- [24] Wang, J. ; Polizzi, E. ; Lundstrom, M. *A Three-Dimensional quantum simulation of Silicon nanowire transistors with the effective mass approximation*, J. App. Phys. **96**, 2192–2203 (2004).

Résumé de la thèse

Cette thèse en mathématiques appliquées à la nanoélectronique aborde le problème de la simulation mathématique et numérique du transport de gaz d'électrons confinés dans certaines directions de l'espace.

A l'échelle de la nanoélectronique, les phénomènes ondulatoires liés au transport des électrons ne peuvent plus être négligés et la description classique du transport électronique doit laisser place à une approche quantique. La modélisation de tels phénomènes nécessite la résolution de systèmes couplés de type Schrödinger-Poisson, coûteux numériquement.

Cette thèse s'appuie donc sur le confinement fortement anisotrope des électrons dans de telles structures pour obtenir des modèles asymptotiques à dimensionnalité réduite, via une analyse asymptotique "fort confinement". La principale difficulté mathématique provient ici des oscillations rapides dues au confinement. Des méthodes telles que la moyennisation en temps long sont décrites pour y remédier.

On s'intéresse dans cette approche à plusieurs situations de confinement différentes. Ainsi, on présente deux modèles asymptotiques pour la modélisation du transport d'électrons confinés sur un plan, ainsi qu'un modèle de confinement sur un plan d'un gaz d'électrons soumis à un champ magnétique fort uniforme. Enfin, on propose un modèle asymptotique mathématique ainsi que des simulations numériques dans le cas du transport d'électrons confinés dans un nanofil quantique. Celles-ci sont obtenues par des méthodes numériques basées sur l'idée de la réduction de dimensionnalité qui font appel notamment à une méthode de décomposition en sous-bandes.

Abstract of the thesis

This thesis lies in the field of mathematics applied to nanoelectronic devices. It raises the question of knowing how to mathematically and numerically simulate the transport of electrons that are confined in some space directions.

At the scale of nanoelectronic devices, quantum effects due to the transport of electrons can no longer be ignored and the usual classical description has to be replaced by a quantum analysis. The study of such quantum transports require solving Schrödinger-Poisson systems, which is a costly numerical task.

The thesis is therefore based on a strong anisotropic confinement analysis of the quantum transport in such devices in order to obtain low-dimensional asymptotic models. The most important mathematical difficulty here lies in the fast oscillations that are due to the strong confinement. They are dealt with thanks to long time averaging procedures.

In this prospect, the thesis presents different cases of confinement. Indeed, two different asymptotic models are presented in order to model the transport of electrons in a fine slab, and a specific asymptotic model is obtained in the case of a quantum gas that is confined along a plane and subject to a strong uniform magnetic field. Finally, we present a mathematical asymptotic model and numerical results for the transport of an electron gas in a nanowire. The numerical methods at hand here are also based on the idea of reducing the problem dimensions and, in that view, we make great use of subband decomposition methods.