

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE des Sciences
DEPARTEMENT de Physique
N° : Ph/TH/04/2020



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE.

**Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique**

Par : SEDDIKI Hadjer et GHEZAL Achwaq

Intitulé

**Étude de la Magnétisation d'un Gaz d'Electrons
Bidimensionnel Soumis à un Champ Magnétique**

Soutenu le 22 /09 /2020 devant le jury composé de :

Mr. Bouferrache. K	Université de M'sila	Président
Dr. Medjedel. S	Université de M'sila	Rapporteur
Dr. Kalli. S	Université de M'sila	Examinatrice

Année universitaire : 2019/2020

Dédicace

*Je dédie ce modeste travail à l'homme, qui vi que je fasse on je dis, je ne sourai point te remercie comme il se doit, ton effection me couvre, ta bien vullance me guide et ta présence à mes cotes a toujours été source de ma force mon précieux offre de dieu, ma source de réussite, mon cher père : MOUKHETAR GHEZAL .
A la femme, qui a souffert son me laisser souffrir, qui ne jamais dit nos à mes exigences, mon adorable mère.*

A ma chère sœur : BARAA.

A mes chers frères : ABD ELKADER et ISSAM.

A tout ma famille

A mes amies : DJAHIDA, SOUMIA et surtout ma moitié RIMA pour sa compréhension au long de sa travaille

A qui vous avez vous partage cet modeste travail avec ma seour avant que mon amie HADJER,

A mon grand enseignant à la source de mon courage Dr. GHASSAN ABD EL MALIK EL NADJAR de Yemen.

A tout personne qui a une place dans mon coeur.

A toutes les enseignants et les étudiants du département de physique 2019/2020.

ACHWAK G

DEDICACE

Je dédise ce travail à ce qui est toujours mon support ; mon chère père MOUSSA et à ma très chère mère M. BOUHALLA Pour leur patience et de sacrifice pour moi.

À mes sœurs : Faiza, Sabrina, Saadia, Imane, Nada, Khalissa, Romaiissa, et Asma.

À mon chère frère : Mohammed Djawad

Les enfants de mes soeurs : Hassan, Houssain, Ranim et Hamza Abd Samad.

Et bien sur à mes chères amies : Ahlem, et mon binome Achwak, qui sont m'a accompagné pendant le long de cette période pour réaliser ce modeste travail.

À tous mes amis que je ne vais pas nommer car ils sont nombreux

Et je ne sais pas qui choisir.

Sans oublier Mr. Medjedl Souhaib pour son aide.

Je vous remercie tous.

HADJER.S

Remerciements

Avant tout nous remercions notre dieu tout puissant de nous avoir accordé la force et le courage pour terminer ce travail.

Arrivé au terme de ce travail, nous voulons remercier toutes les personnes qui, de près ou de loin nous ont aidés dans la réalisation de ce projet.

Nos profonds remerciements vont a notre Encadreur Mr MEDJEDEL SOHEYB, au département de physique à l'université de M'sila, pour sa patiente, ces précieux conseils, le suivi, l'orientation et les possibilités qu'il nous a accordé durant la réalisation de ce mémoire, qu'il trouve ici nos sentiments de gratitude.

Nous tenons à remercier Mds YAHIAOUI AHLEM maitre- assistant au département de Mathématique à l'université de M'sila, pour tout ses efforts et sa coopération avec nous.

Nos remerciements vont sans doute aux membres de jury Mlle. KALLI .S et Mr. BOUFFER-ACHE. K pour avoir accepté de juger et examiner notre travail

Nous adressons nos vifs remerciements à tous les enseignants du département de physique de l'université de M'sila, ainsi qu'a tous les étudiants , particulièrement la promotion de physique théorique 2020

Nous ne terminerons pas sans remercier nos familles, que nous avons le grands plaisir d'associer particulièrement nos parents, pour leur compréhension, leur dévouement et leur encouragement.

HADJER ACHWAK

Table des matières

Introduction Générale	1
1 Formalisme de la Matrice Densité de Bloch	5
1.1 Introduction	6
1.2 Description du système	7
1.2.1 Description du système	7
1.2.2 Analogie rotation-champ magnétique	8
1.2.2.1 Hamiltonien d'une particule neutre en rotation	8
1.2.2.2 Comparaison entre les deux systèmes rotationnel - magnétique	8
1.3 Matrice densité de Bloch $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$	10
1.3.1 Définition de la Matrice densité de Bloch	10
1.3.2 Relation entre MDB et les différentes grandeurs physiques	12
1.3.2.1 La transformation de Laplace \mathcal{L} et sa transformation inverse \mathcal{L}_μ^{-1}	12
1.3.2.2 Relation entre MDB et la matrice densité de particules $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$	13
1.3.2.3 Relation entre $C(\mathbf{r}; \xi)$ et la densité locale $\rho(\mathbf{r})$	14
1.3.2.4 Relation entre $C(\mathbf{r}; \xi)$ et le nombre de particules N	14
1.3.2.5 Relation entre MDB et la densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$	14
1.3.2.6 Relation entre $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ et la densité d'états $g(\varepsilon)$	15
1.3.3 Expression analytique de $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ pour le système étudié	16
1.4 Spectre d'énergie du système	17
2 Densité de Particules et Densité de Courant Electrique	19
2.1 Introduction	20
2.2 Densité de Particules	20
2.2.1 Calcul de la matrice densité $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$	20
2.2.2 Expression de la densité locale $\rho(\mathbf{r})$	22

2.3	Calcul de la densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$	23
2.4	Détermination du niveau de Fermi $\mu(N, \alpha)$	25
2.5	Tracés des densité de particules et de courant	27
2.5.1	Tracés de la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$	28
2.5.2	Tracés de la densité de courant $J(\mathbf{r})$	29
3	La Magnétisation Orbitale Locale et Intégrale du système	31
3.1	Introduction	32
3.2	La Magnétisation orbitale totale \mathbf{M}	33
3.3	La Magnétisation orbitale locale $\mathbf{M}(r)$	34
	 Conclusion Générale	 39
	 Références Bibliographiques	 41

Introduction Générale

L'étude des propriétés magnétiques des gaz d'électrons à deux et trois dimensions, subissant un champ magnétique, constituait depuis le début du 20ème siècle un sujet de recherche qui ne cesse d'être très actif, tant au plan théorique qu'expérimental. En fait, ces systèmes sont le siège des phénomènes physiques très importants où les effets quantiques jouent un rôle fondamental dans leurs interprétations, en particulier le phénomène des oscillations des quantités physiques en fonction du champ magnétique appliqué, comme par exemple les oscillations de la magnétisation, les oscillations de la résistivité, les oscillations de la chaleur spécifique, l'effet Hall quantique... etc, en effet toutes ces oscillations sont dites "oscillations de de Haas - van Alphen". D'une façon particulière, l'oscillation de la magnétisation (ou la susceptibilité magnétique) totale du système avec l'intensité du champ magnétique, découverte en 1930 par de Haas et van Alphen, est l'un des phénomènes intéressants qui a attiré les physiciens du solide parce qu'elle permet de construire la surface de Fermi du solide à travers la mesure de la période d'oscillation. Tous ces phénomènes oscillatoires trouvent son origine dans la quantification des niveaux d'énergies, dites "niveaux de Landau".

Historiquement, l'émergence de la mécanique quantique a permis d'infirmer la théorie classique de Bohr-van Leeuwen, datant de 1911, selon laquelle la magnétisation totale induite par un champ magnétique appliqué au système électronique est nulle. Ceci est parce que, selon cette vision classique bien sûr, les courants diamagnétiques dus aux mouvements cyclotron des électrons à l'intérieur du gaz sont annulés par les courants paramagnétiques résultant au bord du système. Les expériences ont confirmé toujours l'apparition d'une magnétisation orbitale induite dans les gaz d'électrons libres dans un métal, et c'est en 1930 que L. D. Landau a montré comment la théorie quantique permet d'expliquer l'existence de cette magnétisation orbitale tout en prenant en compte les effets de bord du système. C'est alors la quantification des niveaux d'énergie et leurs dégénérescences qui étaient à la base de cette explication. Le résultat du calcul quantique a donné une valeur négative de la susceptibilité magnétique du système liée aux degrés de liberté orbitaux, ce phénomène a été nommé ensuite « diamagnétisme de Landau ». Tenant en compte les spins des électrons, le système d'électrons montre un comportement paramagnétique car la susceptibilité diamagnétique n'est que le tiers de celle paramagnétique pour ce système. Pour étudier l'influence des effets de bord sur la distribution du courant total au sein du gaz d'électrons, le confinement de ce dernier par différents potentiels et sous températures variées constituait l'objet de plusieurs travaux après celui de Landau [17-25]. Parmi ces potentiels confinants, le potentiel harmonique présente un cas simple et efficace car il est exactement soluble.

L'étude des densités de particules et de courants d'un gaz d'électrons bidimensionnels, sans interactions mutuelle, et confinés par un potentiel variant lentement à l'échelle de la longueur magnétique ($\ell = \sqrt{\hbar/m\omega_L}$), a montré que la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$ est formée d'une séquence de plateaux de densité constante (dites régions incompressibles) séparés par des régions où la densité est décroissante (régions compressible), tandis que les courants $j(\mathbf{r})$ de particules sont divisés en deux types circulant en sens inverses dans les régions de densité incompressibles – compressibles [12-13]. Cette inversion dans le sens des courants électriques a été prédit en 1994 par [13] et confirmée expérimentalement en 2020 [14].

Pour un potentiel harmonique isotrope, les expressions analytiques exactes de $\rho(\mathbf{r})$ et $j(\mathbf{r})$ ont été dérivées [3-4, 11-12, 17-21]. Dans les travaux [11-12] par exemple, cette dérivation a été faite à partir des solutions de l'équation de Schrödinger. Une approche alternative, basée sur ce qu'on appelle formalisme de la matrice densité de Bloch, est aussi utilisée pour étudier $\rho(\mathbf{r})$ et $j(\mathbf{r})$ et qui a montré son importance [2-4]. Cette dernière approche a l'intérêt de ne pas avoir besoin à chercher la forme des solutions de l'équation de Schrödinger [1-5, 8-10].

Dans ce mémoire, le système traité est un gaz d'électrons à deux dimensions confiné par un potentiel harmonique isotrope et soumis à un champ magnétique constant et perpendiculaire au plan du système. Nous signalons ici que les degrés de liberté de spins des électrons ne seront pas pris en compte dans ce travail car nous nous intéressons plus particulièrement de l'influence du champ magnétique sur la *partie orbitale* de la magnétisation où le caractère diamagnétique prédomine dans ce cas.

En se basant sur le formalisme de la matrice densité de Bloch, Nous allons chercher donc les expressions des densités de particules, de courant et la magnétisation orbitale locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ et totale \mathbf{M} du système. Nous étudierons ensuite les oscillations de ces quantités avec l'intensité du champ magnétique, en particulier pour les champs très forts où les oscillations de de Haas-van Alphen domine le comportement de la magnétisation totale. L'adoption de l'approche de la matrice densité de Bloch est justifiée par le fait que la première approche, basée sur l'utilisation directe des fonctions d'onde du système, ne permet pas de calculer la magnétisation orbitale locale bien que elle permet de calculer directement $\rho(\mathbf{r})$ et $j(\mathbf{r})$.


Ce travail est divisé en trois chapitres. Le premier est consacré à l'exposé du formalisme de la matrice densité de Bloch et à la description du système étudié ainsi le calcul de son spectre d'énergie. Le deuxième chapitre est réservé à l'étude des densités de particules et de courant et de leurs comportement dans des cas limites des intensités fortes où l'influence de la nature du spectre d'énergie de Landau sur ces densités apparait clairement. Le troisième chapitre est entièrement

pour l'étude de la magnétisation orbitale locale et totale du système électronique et de la nature du magnétisme de ceci. Une conclusion générale termine ce travail.

Chapitre 1

Formalisme de la Matrice Densité de Bloch

1.1 Introduction

L'approche qui sera suivie dans ce travail repose sur l'utilisation de ce qu'on appelle la Matrice Densité de Bloch [1], dite brièvement MDB, et que l'on note $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$, où ξ n'est qu'un nombre complexe de partie réelle positive. Cette matrice de densité représente le propagateur de Bloch $\exp(\xi H)$ dans la représentation position $\{|\mathbf{r}\rangle\}$. L'exploitation de ce formalisme de la matrice de Bloch dans l'étude des propriétés thermodynamiques des systèmes d'électrons en dimensions réduites, soumis ou non à des champs magnétiques constants et confinés ou non confiné par des potentiels harmoniques [2-5], a révélé son importance en matière de son pouvoir calculatoire de sorte que l'étude du comportement de quelques grandeurs physiques intéressantes a pu être faite sans avoir besoin à la connaissance des fonctions d'onde décrivant le système qui n'était plus nécessaires. En effet, l'intérêt de cet outil mathématique revient au fait que sa connaissance a permet  de dériver des expressions analytiques exactes des différentes grandeurs physiques caractérisant le système comme, à titre d'exemple, la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$, la densité de courant $J(\mathbf{r})$, la densité d'états $g(\varepsilon)$... etc., et ceci est grâce à ses relations directes avec ces quantités, chose que l'on verra au cours de ce chapitre.

Ce chapitre est consacré alors à la description du système que l'étude de ses propriétés fait l'objet de ce mémoire et à la présentation du formalisme de la matrice densité de Bloch utilisé pour ce but, ainsi les relations entre cette matrice et les deux grandeurs principales qui nous intéressent dans le contexte de ce mémoire, il s'agit de la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$ et la densité de courant $J(\mathbf{r})$.

L'analogie entre un système de particules chargées en présence d'un champ magnétique et la rotation d'une particule neutre confiné par un potentiel harmonique permet de faire passer les résultats analytiques dérivés pour un système à l'autre système tout en faisant les correspondances nécessaires entre eux. Ce dernier point sera aussi clarifié dans ce chapitre.

Pour ne pas être répétitif, nous signalons à ce stade que la référence [6] est l'unique source des relations mathématiques utilisées tout au long de ce travail alors que les relations de la matrice de Bloch avec les différentes grandeurs physiques c'est les deux livres [1,7] qui servent de références en particulier dans ce premier chapitre.

1.2 Description du système

1.2.1 Description du système

Le système étudié dans ce mémoire consiste à un gaz d'électrons sans interactions à deux dimensions et soumis à un champ magnétique constant et perpendiculaire au plan du système électronique qui est confiné par un potentiel harmonique isotrope. Si le plan de ce système est choisi être le plan (Oxy) , le champ magnétique appliqué sera alors dirigé suivant l'axe (Oz) de sorte que $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. En négligeant les interactions entre électrons, l'Hamiltonien à une particule s'écrit alors comme

$$H = \frac{1}{2M} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + \frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 \quad (1.1)$$

où $(-e)$, M , \mathbf{p} sont respectivement la charge, la masse effective et l'impulsion de l'électron. Aussi, ω_0 est la fréquence du potentiel harmonique confinant. Le potentiel vecteur \mathbf{A} est associé au champ magnétique extérieur \mathbf{B} par la relation

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.2)$$

sachant que ce champ magnétique est constant, on peut choisir alors la jauge symétrique suivante (la jauge de Coulomb)

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2}B (-y\mathbf{e}_x + x\mathbf{e}_y) \quad (1.3)$$

pour laquelle les deux opérateurs \mathbf{A} et \mathbf{p} commutent ($\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{p}\mathbf{A}$). ceci permet d'écrire le développement de l'hamiltonien à une particule (1.1) comme

$$H = \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + \frac{e}{M}\mathbf{A}\mathbf{p} + \frac{e^2}{2M}\mathbf{A}^2 \quad (1.4)$$

on a d'après (1.3)

$$\mathbf{A}\mathbf{p} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \mathbf{p} = \frac{1}{2}\mathbf{B} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2}BL_z \quad (1.5)$$

où \mathbf{L} est le moment cinétique orbital de l'électron et L_z est sa projection sur l'axe (Oz) . d'autre part, on a

$$\mathbf{A}^2 = \frac{1}{4}B^2 (x^2 + y^2) = \frac{1}{4}B^2 r^2 \quad (1.6)$$

insérons (1.5) et (1.6) dans l'expression de l'hamiltonien (1.4) on aura donc

$$H = \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}M\omega_0^2 r^2 + \omega_L L_z + \frac{1}{2}\omega_L^2 r^2 \quad (1.7)$$

où ω_L est la fréquence de Larmor avec

$$\omega_L = \frac{eB}{2M} \quad (1.8)$$

en posant

$$\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_L^2} \quad (1.9)$$

on peut réécrire l'hamiltonien (1.7) comme suivant

$$H = \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}M\Omega^2 r^2 + \omega_L L_z \quad (1.10)$$

on voit sur cette dernière forme que cet hamiltonien est analogue à l'hamiltonien qui décrit le mouvement d'une particule neutre tournant autour de l'axe (Oz) et soumis à un potentiel d'oscillateur harmonique isotrope. il est utile de mettre en évidence cette analogie pour voir les correspondances qui en découlent et pour lesquelles le passage d'un système magnétique à un système tournant soit possible.

1.2.2 Analogie rotation-champ magnétique

1.2.2.1 Hamiltonien d'une particule neutre en rotation

Soit une particule neutre de masse M soumis à l'action d'un potentiel harmonique $V(\mathbf{r}) = M\omega_{osc}^2 \mathbf{r}^2/2$ et mise en rotation autour de l'axe (Oz) avec une vitesse angulaire $\mathbf{\Omega}_{rot} = \Omega_{rot} \mathbf{e}_z$. On peut montrer que l'hamiltonien décrivant le mouvement de cette particule dans le repère tournant H_{rot} prend la forme suivante

$$H_{rot} = \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}M\omega_{osc}^2 \mathbf{r}^2 - \mathbf{\Omega}_{rot} \cdot \mathbf{L} \quad (1.11)$$

$$= \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}M\omega_{osc}^2 \mathbf{r}^2 - \Omega_{rot} \cdot L_z \quad (1.12)$$

qui peut aussi mis sous une autre forme si on remplace le moment cinétique orbitale par sa définition $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. en effet, on trouve que

$$H_{rot} = \frac{1}{2M}\mathbf{p}^2 + \frac{1}{2}M\omega_{osc}^2 r^2 - \mathbf{\Omega}_{rot} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \quad (1.13)$$

$$= \frac{1}{2M}(\mathbf{p} - M(\mathbf{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}))^2 + \frac{1}{2}M(\omega_{osc}^2 - \Omega_{rot}^2) r^2 \quad (1.14)$$

à la base de ces deux formes (1.12) et (1.14) on va faire la comparaison entre le mouvement rotationnel de cette particule neutre et celui d'une particule chargée soumise à un champ magnétique perpendiculaire au plan de ce mouvement.

1.2.2.2 Comparaison entre les deux systèmes rotationnel - magnétique

Commençant par la dernière forme (1.14) de l'hamiltonien H_{rot} . une comparaison avec l'expression de l'hamiltonien (1.1) permet de voir que c'est comme si la particule neutre subit un champ

magnétique associé au potentiel vecteur \mathbf{A} tel que

$$e\mathbf{A} \equiv -M (\boldsymbol{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}) \quad (1.15)$$

ce qui, d'après la jauge symétrique choisie (1.3), conduit à la correspondance suivante

$$\mathbf{B} \equiv -\frac{2M}{e} \boldsymbol{\Omega}_{rot} \quad (1.16)$$

En effet, cette analogie ne peut être satisfaisante que si l'une des deux conditions suivantes est vérifiée.

D'une part, et d'après (1.1) et (1.14) on doit avoir aussi la correspondance suivante

$$\omega_0^2 \equiv \omega_{osc}^2 - \Omega_{rot}^2 \quad (1.17)$$

ce qui veut dire que l'existence, dans l'expression de l'hamiltonien (1.1), d'un terme de potentiel harmonique confinant la particule chargée dont la fréquence ω_0 vérifie la condition (1.17) est nécessaire pour la validité de la correspondance (1.16). Dans ce cas là, on trouve aussi d'après (1.8) et (1.16) que

$$\boldsymbol{\Omega}_{rot} \equiv -\boldsymbol{\omega}_L \quad (1.18)$$

Les deux formes (1.10) et (1.12) permettent aussi de voir le mouvement de la particule chargée comme s'il est une particule neutre en présence d'un potentiel harmonique de fréquence Ω et mise en rotation avec une vitesse angulaire $(-\boldsymbol{\omega}_L)$ où nous avons par suite

$$\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_L^2} \equiv \omega_{osc} \quad (1.19)$$

qui peut être tiré aussi directement de (1.17) et (1.18).

D'autre part, la deuxième condition de validité de la correspondance (1.16) vient de la supposition que la particule chargée soit soumise à l'action du champ magnétique seul, c'est à dire $\omega_0 = 0$, alors que la particule neutre, qui est confinée par le potentiel harmonique de fréquence ω_{osc} , est mise en rotation avec une vitesse angulaire $\Omega_{rot} = \omega_{osc}$. Cette deuxième condition est claire d'après (1.17).

Si le terme du potentiel harmonique est présent dans l'hamiltonien des deux systèmes rotationnel et magnétique, la situation d'une rotation ultra rapide $\Omega_{rot} = \omega_{osc}$ pour le premier d'entre eux correspondrait à la situation d'un champ magnétique intense pour la deuxième. en fait, on aura dans ce cas $\omega_L \gg \omega_0$ et par conséquent

$$\Omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_L^2} \simeq \omega_L \equiv \Omega_{rot} = \omega_{osc} \quad (1.20)$$

Cette situation limite est très intéressante dans la mesure où elle contient une physique riche de phénomènes physiques importantes. Il ne peut s'agir en effet que les oscillations des différentes grandeurs physiques du système en fonction de l'intensité du champ magnétique appliqué à des très basse températures (ou en fonction de la vitesse de rotation ultra rapide). Ces oscillations des quantités physiques est liées en premier lieu à la quantification des niveaux d'énergie du système comme on le verra plus loin dans ce mémoire. C'est donc la formation des niveaux de Landau fortement dégénérés et leur occupation par les particules du système à températures très basses qui sont alors responsables de ces comportements oscillatoires.

Par l'étude de cette analogie entre les deux systèmes rotationnel - magnétique, on peut alors transposer les résultats dirivés pour l'un d'entre eux à l'autre tout en respectant les différentes situatuions physiques et par conséquence les correspondance qui en découlent. Pour le système étudié dans ce travail, et qui a été décrit plus haut, c'est donc qui les correspondances (1.16), (1.18) et (1.19) qui doivent être regardées lors de la transposition des résultats entres les deux systèmes.

1.3 Matrice densité de Bloch $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$

1.3.1 Définition de la Matrice densité de Bloch

Comme nous avons mentionné dans l'introduction de ce chapitre, le formalisme de la matrice densité de Bloch est fondé sur la représentation de l'opérateur de Bloch

$$C = \exp(-\xi H), \quad (1.21)$$

dans la base $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ des vecteurs position $|\mathbf{r}\rangle$. H est l'hamiltonien du système considéré. C'est alors la matrice densité, dont les éléments $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ dans cette représentation position $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ sont

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi) = \langle \mathbf{r} | \exp(-\xi H) | \mathbf{r}' \rangle \quad (1.22)$$

qui sert d'outil de base pour l'étude du système dans ce formalisme. Pour certains systèmes, où l'expression analytique de ces éléments de matrice $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ sont connus, l'utilisation de ce formalisme nous permet de franchir de faire recours à la recherche des fonctions d'onde du système, solutions de l'équation de Schrödinger, qui décrivent sont état quantique. La puissance de ce formalisme vient en effet de la possibilité de lier les différentes grandeurs physiques caractérisant les propriétés du système par les éléments matriciels $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$, comme on va le voir dans le prochain paragraphe. La recherche des expressions analytiques pour ces éléments a fait l'objet de plusieurs travaux [8-10], chacun d'entre eux suivit une méthode différente pour ce but. Pour

le système étudié dans ce travail, c'est les auteurs de [9] qui ont été les premiers à dériver une telle expression exacte pour $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ par un simple ansatz basé sur le travail des auteurs de [8].. Les travaux ultérieurs viennent ensuite confirmer cette expression et généraliser l'étude à d'autres systèmes.

Afin de pouvoir mettre en évidence comment peut-on faire la liaison entre $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ et certaines quantités physiques, il est nécessaire d'introduire la base $\{|\varphi_i\rangle\}$ construite par les états propres $|\varphi_i\rangle$ de l'hamiltonien H du système qui vérifient l'équation aux valeurs propres suivante

$$H |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle \quad (1.23)$$

où l'indice i représente tous l'ensemble des nombres quantiques intervenant dans la détermination complète des états stationnaires $|\varphi_i\rangle$ associés aux énergies propres E_i de l'hamiltonien H . Dans (1.22), on insère deux fois la relation de fermeture, que vérifient les états de base $|\varphi_i\rangle$, suivante

$$\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = I \quad (1.24)$$

où I est l'opérateur identité. On trouve alors que

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi) = \sum_{i,j} \langle \mathbf{r} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \exp(-\xi H) | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \mathbf{r}' \rangle \quad (1.25)$$

L'équation (1.23) aux valeurs propres de l'hamiltonien H indique que

$$\exp(-\xi H) |\varphi_j\rangle = \exp(-\xi E_j) |\varphi_j\rangle \quad (1.26)$$

qui, avec la relation d'orthonormalisation des vecteurs d'états $|\varphi_i\rangle$

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{ij} \quad (1.27)$$

permet d'écrire (1.25) sous la forme

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi) = \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}') \exp(-\xi E_i) \quad (1.28)$$

A partir de cette dernière relation, on peut établir la liaison entre $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ et les quelques quantités physiques que nous avons choisie comme exemples.

Les éléments diagonaux de la matrice de Bloch sont obtenus en posant $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ dans (1.28). On aura alors

$$C(\mathbf{r}; \xi) = \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}) \exp(-\xi E_i) \quad (1.29)$$

La normalisation des fonctions d'onde $\varphi_i(\mathbf{r})$ permet d'obtenir la relation suivante

$$\int C(\mathbf{r}; \xi) d\mathbf{r} = \sum_i \exp(-\xi E_i) \quad (1.30)$$

qui nous servira plus tard dans la recherche du spectre d'énergie du système.

1.3.2 Relation entre MDB et les différentes grandeurs physiques

Avant de chercher les relations entre les éléments de la matrice densité de Bloch et certains grandeurs du système, nous préférons de donner une brève présentation de la transformation de Laplace et de sa transformée inverse pour que la dérivation des relations qui vont suivre soit évidente.

1.3.2.1 La transformation de Laplace \mathcal{L} et sa transformation inverse \mathcal{L}_μ^{-1}

La transformation de Laplace d'une fonction $f(\mu)$, que nous désignons par $\mathcal{L}\{f(\mu)\}$ est donnée par l'intégrale comme suivant

$$\mathcal{L}\{f(\mu)\} = F(\xi) = \int_0^\infty \exp(-\xi\mu) f(\mu) d\mu \quad ; \quad \text{Re}(\xi) > 0 \quad (1.31)$$

tandis que la transformation de Laplace inverse est

$$\mathcal{L}_\mu^{-1}\{F(\xi)\} = f(\mu) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} F(\xi) \exp(\xi\mu) d\xi \quad (1.32)$$

où c est un nombre réelle supérieur à la partie réelle de tous les singularités de $F(\xi)$. Nous donnons ci-dessous un exemple très important pour la suite de l'exposé.

► **Exemple 1: La transformation de Laplace inverse pour la fonction de Heaviside $\Theta(\mu)$**

La fonction saut de Heaviside $\Theta(\mu)$ est définie par

$$\Theta(\mu) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mu > 0 \\ 0 & \text{si } \mu < 0 \end{cases} \quad (1.33)$$

cette fonction peut être obtenue par une transformée de laplace inverse de la fonction $F(\xi) = \xi^{-1}$

$$\Theta(\mu) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\exp(\xi\mu)}{\xi} d\xi \quad (1.34)$$

Pour la forme qui nous intéresse prochainement, c'est une fonction de type $\Theta(\mu - E_i)$ que l'on peut écrire selon (1.34) comme suivant

$$\Theta(\mu - E_i) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\exp(\xi(\mu - E_i))}{\xi} d\xi = \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{\exp(-\xi E_i)}{\xi} \right\} \quad (1.35)$$

où μ sera alors l'énergie de Fermi. C'est l'énergie du dernier niveau occupé par les particules du système.

► **Exemple 2: La transformation de Laplace inverse pour la fonction delta de Dirac $\delta(x)$**

La fonction de distribution $\delta(x)$, appelée fonction delta de Dirac, c'est la fonction nulle partout sauf dans le point zéro où elle prend une valeur infinie. On écrit alors

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{si } x \neq 0 \end{cases} \quad (1.36)$$

Pour ce qui nous intéresse, on aura besoin à la fonction $\delta(\varepsilon - E_i)$ qui est liée à la densité d'états $g(\varepsilon)$. Cette fonction $\delta(\varepsilon - E_i)$ s'écrit comme une transformation de Laplace inverse de la fonction $F(\xi) = \exp(-\xi E_i)$, c'est-à-dire

$$\delta(\varepsilon - E_i) = \mathcal{L}_\varepsilon^{-1} \{ \exp(-\xi E_i) \} = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp(\xi(\varepsilon - E_i)) d\xi \quad (1.37)$$

où on doit remarquer que c'est l'énergie ε qui apparaît en indice dans la transformée inverse $\mathcal{L}_\varepsilon^{-1}$ et non l'énergie du niveau de Fermi μ .

1.3.2.2 Relation entre MDB et la matrice densité de particules $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$

La matrice densité de particules $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$ associée au système constitué de N fermions indépendants est donnée, à température nulle, par l'expression

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}') \Theta(\mu - E_i) \quad (1.38)$$

où μ est le potentiel chimique du système qui devient, pour $T = 0K$, l'énergie du niveau de Fermi. Le signe \sum_i indique que la sommation dans (1.38) est faite sur tout l'ensemble des nombres quantiques i caractérisant les états quantiques $\varphi_i(\mathbf{r})$ associés à l'énergie E_i . Si on remplace la fonction de Heaviside $\Theta(\mu - E_i)$ dans (1.36) par son expression (1.35) on peut écrire

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \mathcal{L}_\mu^{-1} \left[\frac{1}{\xi} \left(\overbrace{\sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}') \exp(-\xi E_i)}^{C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)} \right) \right] \quad (1.39)$$

où nous avons utilisé la relation (1.28). On obtient donc la relation entre la matrice densité de Bloch $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ et la matrice densité de particules.

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \mathcal{L}_\mu^{-1} \left[\frac{1}{\xi} C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi) \right] \quad (1.40)$$

alors la connaissance de $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ permet de dériver l'expression de $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$ sans chercher les solutions $\varphi_i(\mathbf{r})$ dont la forme explicite est exigée par l'expression directe (1.36).

1.3.2.3 Relation entre $C(\mathbf{r}; \xi)$ et la densité locale $\rho(\mathbf{r})$

L'expression de la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$ en fonction des fonctions d'onde $\varphi_i(\mathbf{r})$ est obtenue à partir de l'expression (1.36) de la matrice densité $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$ en posant $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. C'est la partie locale de cette dernière. On écrit alors

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}) \Theta(\mu - E_i) \quad (1.41)$$

Cette densité locale est liée au nombre total N de particules du système par la relation de normalisation

$$\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N \quad (1.42)$$

où l'intégrale est étendue sur tout l'espace du système. Cette relation de normalisation donne d'après (1.39) la relation suivante

$$N = \sum_i \Theta(\mu - E_i) \quad (1.43)$$

qui va nous permettre de calculer le niveau de Fermi μ en fonction du nombre de particule du système. Nous donnerons bientôt la relation entre N et la densité de Bloch $C(\mathbf{r}; \xi)$.

En ce qui concerne la dérivation de la relation entre la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$ et les éléments diagonaux de la matrice densité de Bloch $C(\mathbf{r}; \xi)$, on peut en effet la tirer directement à partir de (1.38) en posant $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, on trouve donc

$$\rho(\mathbf{r}) = \mathcal{L}_\mu^{-1} \left[\frac{1}{\xi} C(\mathbf{r}; \xi) \right] \quad (1.44)$$

C'est l'une des relations que nous allons utiliser dans le prochain chapitre.

1.3.2.4 Relation entre $C(\mathbf{r}; \xi)$ et le nombre de particules N

En substituant (1.42) dans (1.40) on trouve

$$N = \mathcal{L}_\mu^{-1} \left[\frac{1}{\xi} \left(\int C(\mathbf{r}; \xi) d\mathbf{r} \right) \right] \quad (1.45)$$

qui peut être déduite aussi à partir de (1.41). En effet, en utilisant (1.30) et (1.35) dans (1.41) on obtient l'expression (1.43).

1.3.2.5 Relation entre MDB et la densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$

La densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ peut être dérivée à partir de la matrice densité de particules $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$ par la relation

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2Mi} [(\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \quad (1.46)$$

En injectant directement la relation (1.40) dans (1.46) on obtient la relation entre $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ et la matrice densité de Bloch $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ qui est

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2Mi} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} [(\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \right\} \quad (1.47)$$

En effet, pour le système que nous voudrions étudier dans ce travail, à savoir le système de particules chargées en présence d'un champ magnétique, la densité de courant totale est une composition de deux parties. L'une est celle écrite en (1.47), et l'autre vient de l'existence du potentiel vecteur \mathbf{A} dans l'hamiltonien (1.1) et qui produit le terme additionnel suivant

$$\frac{e}{M} \rho(\mathbf{r}) \mathbf{A} \quad (1.48)$$

Sachant que \mathbf{A} est donné dans la jauge symétrique par (1.3), que l'on peut réécrire aussi dans les coordonnées polaires sous la forme

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} B r \mathbf{e}_\varphi \quad (1.49)$$

\mathbf{e}_φ est le vecteur unitaire azimutal ($\mathbf{e}_\varphi = \mathbf{e}_z \times \mathbf{e}_r$). Alors, d'après (1.47), (1.48) et (1.49), l'expression effective de la densité de courant pour notre système est la suivante

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2Mi} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} [(\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \right\} + \omega_L r \rho(\mathbf{r}) \mathbf{e}_\varphi \quad (1.50)$$

où ω_L est donnée par (1.8). On remarque sur cette expression qu'en l'absence du champ magnétique ($\omega_L = 0$) le deuxième terme dans le second membre de (1.50) s'annule.

1.3.2.6 Relation entre $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ et la densité d'états $g(\varepsilon)$

La densité d'états $g(\varepsilon)$ est une quantité physique très importante, en particulier, pour le calcul des propriétés électroniques des systèmes solides. Elle est définie par la relation

$$g(\varepsilon) = \text{Tr}(\delta(\varepsilon - H)) \quad (1.51)$$

Cette trace s'écrit dans la base des vecteurs position $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ comme

$$g(\varepsilon) = \int \langle \mathbf{r} | \delta(\varepsilon - H) | \mathbf{r} \rangle d\mathbf{r} \quad (1.52)$$

Insérons maintenant la relation de fermeture (1.24) dans (1.52) et en utilisant (1.23) on obtient

$$g(\varepsilon) = \sum_i \delta(\varepsilon - E_i) \overbrace{\int \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_i^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}^{=1} = \sum_i \delta(\varepsilon - E_i) \quad (1.53)$$

où nous avons utilisé (1.27) Pour lier cette densité d'états $g(\varepsilon)$ avec la densité de Bloch $C(\mathbf{r}; \xi)$ il suffit de remplacer la fonction delta de Dirac $\delta(\varepsilon - E_i)$ par son expression (1.37) ce qui va donner

$$g(\varepsilon) = \sum_i \mathcal{L}_\varepsilon^{-1} \{ \exp(-\xi E_i) \} = \mathcal{L}_\varepsilon^{-1} \left(\sum_i \exp(-\xi E_i) \right) \quad (1.54)$$

La somme dans (1.54) peut être substituée par (1.30) pour que le résultat final soit

$$g(\varepsilon) = \mathcal{L}_\varepsilon^{-1} \left(\int C(\mathbf{r}; \xi) d\mathbf{r} \right) \quad (1.55)$$

Par cette dernière expression on termine l'établissement des différentes relations exprimant les quantités physiques, que nous avons choisi à titre d'exemples, dans le formalisme de la matrice densité de Bloch. Passons maintenant à l'expression analytique de cette Matrice de Bloch pour le système décrit dans ce travail.

1.3.3 Expression analytique de $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ pour le système étudié

Les éléments de la matrice densité de Bloch associée à l'hamiltonien (1.1) du système étudié dans ce mémoire a été donnée pour la première fois par March et Tosi [9]. Avec certaines modification, ces éléments s'écrivent comme

$$\begin{aligned} C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi) = & \frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\xi\hbar\Omega)} \exp \left\{ \frac{M\Omega}{\hbar} \left[\frac{i \sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} (\mathbf{r} \times \mathbf{r}') \cdot \mathbf{e}_z \right. \right. \\ & - \left(\coth(\xi\hbar\Omega) - \frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \right) \left(\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \right)^2 \\ & \left. \left. - \frac{1}{4} \left(\coth(\xi\hbar\Omega) + \frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \right) (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.56)$$

En introduisant les coordonnées de centre de masse $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$ et relative $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, on peut réécrire (1.56) sous la nouvelle forme adéquate suivante

$$\begin{aligned} C(\mathbf{R}, \mathbf{s}; \xi) = & \frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\xi\hbar\Omega)} \exp \left\{ \frac{M\Omega}{\hbar} \left[\frac{i \sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} (\mathbf{s} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{e}_z \right. \right. \\ & \left. \left. - \left(\coth(\xi\hbar\Omega) - \frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \right) \mathbf{R}^2 - \frac{1}{4} \left(\coth(\xi\hbar\Omega) + \frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \right) \mathbf{s}^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.57)$$

et par conséquent, l'expression des éléments diagonaux $C(\mathbf{r}; \xi)$ sont donc

$$C(\mathbf{r}; \xi) = \frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\xi\hbar\Omega)} \exp \left\{ -\frac{M\Omega}{\hbar} \left[\coth(\xi\hbar\Omega) - \frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \right] \mathbf{r}^2 \right\} \quad (1.58)$$

Ces deux expressions (1.57) et (1.58) seront utilisées pour dériver les expressions de $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$, $\rho(\mathbf{r})$ et $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ caractéristiques de notre système.

1.4 Spectre d'énergie du système

Une des avantages de la connaissance de la forme de la matrice densité de Bloch est de pouvoir obtenir le spectre d'énergie E_i du système sans faire recours à la résolution de l'équation aux valeurs propres (1.23). En effet, ceci est possible grâce à la relation (1.30) qui relie les énergies E_i par les éléments diagonaux de la matrice de Bloch. Sachant que l'expression de ces éléments $C(\mathbf{r}; \xi)$ est donnée par (1.58), faisons alors l'intégrale qui apparait dans le membre gauche de (1.30) qui est de forme gaussienne. En utilisant

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(-\alpha t^2) = \sqrt{\pi/\alpha} \quad (1.59)$$

on trouve que

$$\int C(\mathbf{r}; \xi) d\mathbf{r} = \frac{1}{4} \sinh^{-1}(\xi \hbar \Omega_+) \sinh^{-1}(\xi \hbar \Omega_-) \quad (1.60)$$

où les nouvelles fréquences Ω_+ et Ω_- sont données par

$$\Omega_{\pm} = \Omega \pm \omega_L \quad (1.61)$$

Dans (1.60), on peut utiliser le développement suivant

$$\sinh^{-1}(x) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-(2n+1)x] \quad (1.62)$$

On écrit alors

$$\int C(\mathbf{r}; \xi) d\mathbf{r} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \exp\{-\xi [(n+1/2)\hbar\Omega_+ + (m+1/2)\hbar\Omega_-]\} \quad (1.63)$$

En faisant la comparaison entre (1.30) et (1.63) on trouve que

$$E_i = E_{nm} = (n+1/2)\hbar\Omega_+ + (m+1/2)\hbar\Omega_-; \quad n, m = 0, 1, 2, \dots \quad (1.64)$$

où l'indice i est alors remplacé par les nouveaux nombres quantiques n et m caractérisant l'état du système. On peut réécrire (1.64) pour que les fréquences caractérisant le système apparait explicitement

$$E_{nm} = (n+m+1)\hbar\Omega + (n-m)\hbar\omega_L \quad (1.65)$$

Sachant que le phénomène des oscillations quantiques des différentes quantités physiques, dites généralement oscillations de de Haas - van Alphen, comme par exemple la magnétisation totale \mathbf{M} du système, en fonction de l'intensité du champ magnétique appliqué sur un gaz d'électrons est une conséquence directe de la formation des niveaux de Landau fortement dégénérés, dont la forme est $E_L = (2n+1)\hbar\omega_L$, qui est une des manifestations macroscopiques observables de

la mécanique quantique. On prédit alors, à la base de l'expression du spectre d'énergie (1.64), que ces oscillations quantiques ne peuvent se produire au sein du système étudié ici que pour des champ magnétiques très intenses. En fait, d'après (1.20) et (1.61), on voit qu'on obtiendrait approximativement pour des valeurs $\omega_L \gg \omega_0$ correspondant au cas du champ magnétique très fort

$$E_{nm} \longrightarrow (2n + 1) \hbar\omega_L \quad (1.66)$$

qui sont alors de type niveaux de Landau fortement dégénérés. Cette situation a été discuté plus haut quand on a étudié les conséquences de (1.20). On verra dans le deuxième chapitre comment influence l'intensité du champ magnétique sur la forme de la densité de particules et la densité de courant électrique et dans le chapitre trois sur la magnétisation orbitale locale et totale du système.

Chapitre 2

Densité de Particules et Densité de Courant Electrique

2.1 Introduction

Parmi les issues qui reçoivent toujours une attention particulière dans le domaine des gaz électroniques bidimensionnels, on trouve l'étude des densités de particules et de courants, qui sont deux quantités fondamentaux et nécessaires à la compréhension des propriétés physiques de tels systèmes surtout dans la théorie de la fonctionnelle densité de courant (CDFT). La recherche des expressions analytiques de ces deux grandeurs pour différents systèmes a fait l'objet de nombreux articles [2-4]. En particulier, pour le système constitué d'un gaz d'électrons à deux dimensions confiné par un potentiel harmonique isotrope et soumis simultanément à l'action d'un champ magnétique uniforme perpendiculaire au plan contenant le système, à températures finies ou nulle, des expressions analytiques exactes des densités de particules et de courants ont été trouvées auparavant [3-4, 12-13, 17-21].

Dans ce chapitre, on va dériver ces expressions en utilisant le formalisme de la matrice densité de Bloch à température nulle, ce qui va nous permettre d'étudier ensuite leurs comportements dans des situations diverses suivant l'intensité du champ magnétique appliqué. Le cas où le champ magnétique est très intense présente alors un point essentiel à traiter en détail. En effet, cette dernière situation correspond à l'apparition des niveaux de Landau quantifiés qui influencent la nature des courants électriques circulants dans le système électronique.

2.2 Densité de Particules

Rappelons que le système étudié est constitué d'un gaz bidimensionnel de N électrons confiné par un potentiel harmonique isotrope et soumis à un champ magnétique uniforme perpendiculaire au plan du système. Dans cette première partie nous allons dériver les expressions analytiques exactes de la matrice densité $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$ et de sa partie locale $\rho(\mathbf{r})$ qui est la densité de particules du système.

2.2.1 Calcul de la matrice densité $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$

Connaissant l'expression analytique (1.57) des éléments $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \xi)$ de la matrice densité de Bloch, la recherche de celle relative aux éléments $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$ de la matrice densité de particules s'obtient donc à partir de la relation (1.40) établie dans le premier chapitre. Substituons alors (1.57) dans

(1.40) on obtient

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \frac{1}{2\pi\ell^2} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left[\frac{1}{\xi \sinh(\xi\hbar\Omega)} \exp \left\{ \frac{1}{\ell^2} \left[-\coth(\xi\hbar\Omega) \left(\mathbf{R}^2 + \frac{\mathbf{s}^2}{4} \right) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. \frac{1}{\sinh(\xi\hbar\omega_L)} \left(\cosh(\xi\hbar\omega_L) \left(\mathbf{R}^2 - \frac{\mathbf{s}^2}{4} \right) + i \sinh(\xi\hbar\omega_L) (\mathbf{s} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{e}_z \right) \right] \right\} \right] \quad (2.1)$$

où nous avons introuit la longueur ℓ

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}} \quad (2.2)$$

qui s'identifie à la longueur magnétique $\sqrt{\hbar/M\omega_L}$ dans le cas du champ magnétique intense ($\Omega \rightarrow \omega_L$). L'expression (2.1) peut être écrite sous la forme condensée suivante

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \frac{1}{2\pi\ell^2} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi \sinh(\xi\hbar\Omega)} \exp(-A \coth(\xi\hbar\Omega)) \exp \left(\frac{\exp(\xi\hbar\omega_L)}{2 \sinh(\xi\hbar\Omega)} B + \frac{\exp(-\xi\hbar\omega_L)}{2 \sinh(\xi\hbar\Omega)} B^* \right) \right\} \quad (2.3)$$

où on a posé

$$\begin{cases} A = \frac{1}{\ell^2} \left(\mathbf{R}^2 + \frac{\mathbf{s}^2}{4} \right) \\ B = \frac{1}{\ell^2} \left[\left(\mathbf{R}^2 - \frac{\mathbf{s}^2}{4} \right) + i (\mathbf{s} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{e}_z \right] \\ B^* = \frac{1}{\ell^2} \left[\left(\mathbf{R}^2 - \frac{\mathbf{s}^2}{4} \right) - i (\mathbf{s} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{e}_z \right] \end{cases} \quad (2.4)$$

Pour évaluer la transformée de Laplace inverse dans (2.3) on exploite les développements suivants

$$\exp \left(\frac{\exp(\xi\hbar\omega_L)}{2 \sinh(\xi\hbar\Omega)} B \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{\exp(m\xi\hbar\omega_L)}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^m} B^m \quad (2.5)$$

$$\exp \left(\frac{\exp(-\xi\hbar\omega_L)}{2 \sinh(\xi\hbar\Omega)} B^* \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\exp(-n\xi\hbar\omega_L)}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^n} B^{*n} \quad (2.6)$$

injectés dans (2.3) permet de l'écrire comme

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \frac{1}{\pi\ell^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B^m B^{*n}}{n!m!} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{\exp(-A \coth(\xi\hbar\Omega))}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^{n+m+1}} \exp[(m-n)\xi\hbar\omega_L] \right\} \quad (2.7)$$

si on utilise aussi le développement

$$\frac{\exp(-A \coth(\xi\hbar\Omega))}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^{n+m+1}} = \exp(-A) \sum_{k=0}^{\infty} L_k^{n+m}(2A) \exp[-(2k+n+m+1)\xi\hbar\Omega] \quad (2.8)$$

où $L_k^{n+m}(2A)$ sont les polynômes de Laguerredans. insérée dans (2.7) on obtiendrait

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \frac{\exp(-A)}{\pi\ell^2} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B^m B^{*n}}{n!m!} L_k^{n+m}(2A) \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} \exp[-\xi(2k\hbar\Omega + E_{nm})] \right\} \quad (2.9)$$

Finalement, si on rappelle la relation (1.35), l'expression analytique des éléments de la matrice densité de particules est alors donnée par

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu) = \frac{\exp(-A)}{\pi\ell^2} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{B^m B^{*n}}{n!m!} L_k^{n+m}(2A) \Theta(\mu - 2k\hbar\Omega - E_{nm}) \quad (2.10)$$

L'existence de la fonction de Heaviside limite les valeurs que puissent prendre les trois nombres k , n et m intervenant dans (2.10) et par suite les sommes dans cette dernière expression sont tronquées.

2.2.2 Expression de la densité locale $\rho(\mathbf{r})$

La densité de particules $\rho(\mathbf{r})$ n'est que la partie diagonale de la matrice densité $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mu)$. D'après (2.4) on aura pour $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, c'est-à-dire ($\mathbf{R} = \mathbf{r}$ et $\mathbf{s} = \mathbf{0}$)

$$A = B = B^* = \frac{r^2}{\ell^2} \quad (2.11)$$

substituons ce résultat dans (2.10) on trouve

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi\ell^2} \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} L_k^{n+m} \left(2\frac{r^2}{\ell^2}\right) \Theta(\mu - 2k\hbar\Omega - E_{nm}) \quad (2.12)$$

Ce dernier résultat analytique peut être aussi extraite à partir de (1.44) et (1.58)

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi\ell^2} \mathcal{L}_{\mu}^{-1} \left[\frac{1}{\xi} \frac{1}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \exp\left\{-\left[\coth(\xi\hbar\Omega) - \frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)}\right] \frac{\mathbf{r}^2}{\ell^2}\right\}\right] \quad (2.13)$$

qui, avec des développements appropriés, donnera (2.12). L'utilité de cette dernière écriture de $\rho(\mathbf{r})$ apparaîtra lors du calcul de la magnétisation locale du système dans le chapitre 3.

Formellement, l'expression (2.12) de la densité de particules est différente de celle que l'on peut obtenir en utilisant les expressions explicites des fonctions d'onde du système. En effet, en exploitant les correspondances dérivées de l'analogie rotation-champ magnétique on peut écrire pour la densité locale [11]

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi\ell^2} \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{n!}{(n+|m|)!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{|m|} \left[L_n^{(|m|)}\left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)\right]^2 \Theta(\mu - E_{nm}) \quad (2.14)$$

Au contraire au formalisme de la matrice de Bloch, Le nombre quantique m représente dans cette dernière expression le nombre quantique magnétique, elle correspond à la valeur propre $m\hbar$ de la composante L_z du moment cinétique orbitale \mathbf{L} selon l'axe (Oz), alors que le spectre d'énergie est donné dans ce cas par

$$E_{nm} = (2n + |m| + 1) \hbar\Omega - m\hbar\omega_L \quad (2.15)$$

Cette différence apparente entre (2.12) et (2.14) n'est que formelle comme nous l'avons indiquée. Ces deux expressions mathématiques représentent en effet la même fonction $\rho(\mathbf{r})$. On peut d'ailleurs les transformer l'une à l'autre grâce aux propriétés des polynômes de Laguerre et celles de la fonction de Heaviside.

2.3 Calcul de la densité de courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$

La connaissance de la distribution du courant de particules $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ est nécessaire pour la compréhension des propriétés magnétiques du système en présence du champ magnétique. L'existence de ce dernier modifie la structure de la distribution spatiale de ce courant de particules au sein du système comme l'indique l'équation (1.50). En effet, cette équation peut être obtenue à partir de l'équation de Schrödinger dont l'hamiltonien est donné par (1.1). D'après l'équation de conservation du courant de probabilité $\text{div } \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0$ on trouve pour la composante \mathbf{J}_{nm} de la densité de courant correspondant à un état $\varphi_{nm}(\mathbf{r})$ l'expression suivante

$$\mathbf{J}_{nm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{M} \text{Re} \{ \varphi_{nm}^*(\mathbf{r}) (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \varphi_{nm}(\mathbf{r}) \} \quad (2.16)$$

A cause de l'existence du potentiel vecteur \mathbf{A} dans (2.16), un terme supplémentaire s'ajoute à la partie cinétique du courant de particules associé à l'impulsion \mathbf{p} . Pour la densité du courant total $\mathbf{J}(\mathbf{r})$, ce terme causé par le champ magnétique est donné par

$$\frac{e\mathbf{A}}{M} \left(\overbrace{\sum_{nm} \varphi_{nm}^*(\mathbf{r}) \varphi_{nm}(\mathbf{r}) \Theta(\mu - E_{nm})}^{\rho(\mathbf{r})} \right) \quad (2.17)$$

qui s'écrit donc comme (1.48). Pour la densité du courant électrique du système, on écrit donc d'après (1.50)

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = (-e) \{ \mathbf{j}_{cin}(\mathbf{r}) + \omega_L r \rho(\mathbf{r}) \mathbf{e}_\varphi \} \quad (2.18)$$

où $\mathbf{j}_{cin}(\mathbf{r})$ est la partie cinétique donnée en fonction de la matrice de Bloch par la relation (1.47) et qui peut s'écrire encore comme

$$\mathbf{j}_{cin}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2Mi} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} [\nabla_{\mathbf{s}} C(\mathbf{R}, \mathbf{s}; \xi)]_{\mathbf{s}=0} \right\} \quad (2.19)$$

car on a $(\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'} = 2\nabla_{\mathbf{s}})$. Procédons directement au calcul de cette partie cinétique $\mathbf{j}_{cin}(\mathbf{r})$ tant que la deuxième partie dans le second membre de (2.18) se déduit facilement de l'expression (2.12) de la densité locale $\rho(\mathbf{r})$. D'après (1.57) on trouve que

$$[\nabla_{\mathbf{s}} C(\mathbf{R}, \mathbf{s}; \xi)]_{\mathbf{s}=0} = \frac{M\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\xi\hbar\Omega)} \frac{iM\Omega \sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\hbar \sinh(\xi\hbar\Omega)} (\mathbf{r} \times \mathbf{e}_z) \exp\left(-\frac{M\Omega r^2}{\hbar} g(\xi)\right) \quad (2.20)$$

où on a posé

$$g(\xi) = \coth(\xi\hbar\Omega) - \frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \quad (2.21)$$

Insérons donc le résultat (2.20) dans (2.19) on obtient

$$\mathbf{j}_{cin}(\mathbf{r}) = -e_\varphi \frac{\Omega r}{2\pi\ell^2} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1 \sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\xi \sinh^2(\xi\hbar\Omega)} \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi)\right) \right\} \quad (2.22)$$

Afin d'évaluer la transformée de Laplace inverse, On écrit le terme en exponentiel dans (2.22) comme suivant

$$\exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}g(\xi)\right) = \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\coth(\xi\hbar\Omega)\right) \exp\left(\frac{r^2}{\ell^2}\frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)}\right) \quad (2.23)$$

ensuite on factorise le deuxième exponentiel

$$\exp\left(\frac{r^2}{\ell^2}\frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)}\right) = \exp\left(\frac{r^2}{\ell^2}\frac{\exp(\xi\hbar\omega_L)}{\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega)}\right) \exp\left(\frac{r^2}{\ell^2}\frac{\exp(-\xi\hbar\omega_L)}{\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega)}\right) \quad (2.24)$$

en utilisant le développement d'un exponentiel $\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n/n!$ on trouve que

$$\begin{cases} \exp\left(\frac{r^2}{\ell^2}\frac{\exp(\xi\hbar\omega_L)}{\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega)}\right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^m \frac{\exp(m\xi\hbar\omega_L)}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^m} \\ \exp\left(\frac{r^2}{\ell^2}\frac{\exp(-\xi\hbar\omega_L)}{\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega)}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^n \frac{\exp(-n\xi\hbar\omega_L)}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^n} \end{cases} \quad (2.25)$$

substituée dans (2.24) on trouve

$$\exp\left(\frac{r^2}{\ell^2}\frac{\cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} \frac{\exp[\xi(m-n)\hbar\omega_L]}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^{n+m}} \quad (2.26)$$

ce qui donne d'après (2.23)

$$\begin{aligned} \frac{\sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh^2(\xi\hbar\Omega)} \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}g(\xi)\right) &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} \left(e^{\xi(m-n+1)\hbar\omega_L} - e^{\xi(m-n-1)\hbar\omega_L}\right) \\ &\quad \times \frac{\exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\coth(\xi\hbar\Omega)\right)}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^{n+m+2}} \end{aligned} \quad (2.27)$$

qui peut être écrite aussi en utilisant le développement (2.8) comme suivant

$$\begin{aligned} \frac{\sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh^2(\xi\hbar\Omega)} \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}g(\xi)\right) &= 2 \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} L_k^{n+m+1} \left(2\frac{r^2}{\ell^2}\right) \\ &\quad \left(e^{\{-\xi[(2k+n+m+2)\hbar\Omega + (n-m-1)\hbar\omega_L]\}} - e^{\{-\xi[(2k+n+m+2)\hbar\Omega + (n-m+1)\hbar\omega_L]\}}\right) \end{aligned} \quad (2.28)$$

insérée dans (2.22) suivie par l'utilisation de l'identité (1.35) on trouve pour la partie cinétique du courant l'expression suivante

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{cin}(\mathbf{r}) &= -\mathbf{e}_{\varphi} \frac{\Omega r}{\pi \ell^2} \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} L_k^{n+m+1} \left(2\frac{r^2}{\ell^2}\right) \\ &\quad \{\Theta(\mu - (2k+1)\hbar\Omega - E_{nm} + \hbar\omega_L) - \Theta(\mu - (2k+1)\hbar\Omega - E_{nm} - \hbar\omega_L)\} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Alors que la densité du courant électrique qui règne au sein du système s'obtient à partir de (2.12), (2.18) et (2.29) et on trouve

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}) &= J(r) \mathbf{e}_{\varphi} = j_0 \left(\frac{r}{\ell}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\right) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} \left[L_k^{n+m+1} \left(2\frac{r^2}{\ell^2}\right) \right. \\ &\quad \times \{\Theta(\mu - (2k+1)\hbar\Omega - E_{nm} + \hbar\omega_L) - \Theta(\mu - (2k+1)\hbar\Omega - E_{nm} - \hbar\omega_L)\} \\ &\quad \left. - \alpha L_k^{n+m} \left(2\frac{r^2}{\ell^2}\right) \Theta(\mu - 2k\hbar\Omega - E_{nm}) \right] \mathbf{e}_{\varphi} \end{aligned} \quad (2.30)$$

où le paramètre α a été introduit pour caractériser l'intensité du champ magnétique appliqué

$$\alpha = \frac{\omega_L}{\Omega} = \frac{\omega_L}{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_L^2}} \leq 1 \quad (2.31)$$

D'après cette expressio (2.30), la densité du courant électrique est mesurée donc en unité de j_0 où

$$j_0 = \frac{e\Omega}{\pi\ell} \quad (2.32)$$

On remarque que la circulation du courant électrique dans le système s'effectue seulement selon la direction (positive ou négative) azimutale représentée par le vecteur unitaire \mathbf{e}_φ comme on peut le voir sur la figure (2.3.1) ci-dessous pour un sens directe de circulation par exemple . Ce vecteur de densité de courant électrique $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ induira une magnétisation orbitale M que nous entendons étudier dans le chapitre suivant ses variations locales, c'est-à-dire ses variations en chaque point du plan du système.

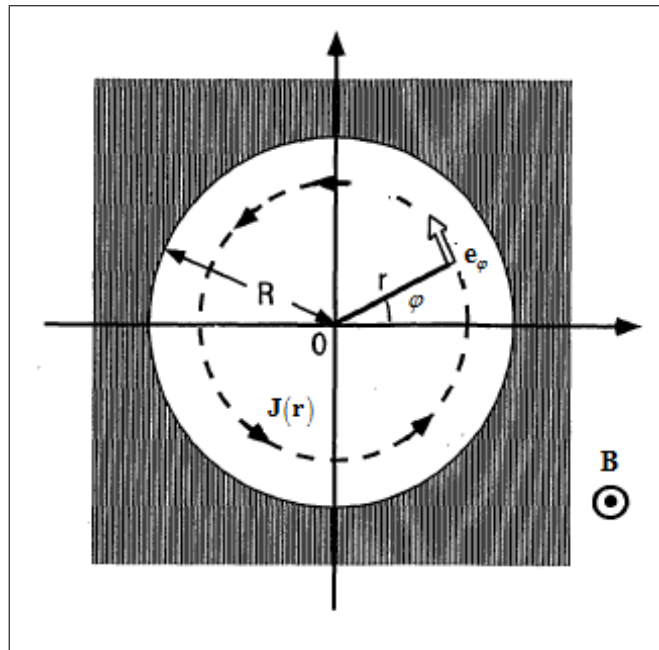


Figure 2.3.1 : La circulation du courant électrique s'effectue seulement selon la direction azimutale \mathbf{e}_φ (ici on a pris le sens directe comme exemple d'illustration).

2.4 Détermination du niveau de Fermi $\mu(N, \alpha)$

Pour mettre en évidence l'influence de l'intensité du champ magnétique appliqué, caractérisée désormais par le paramètre α (voir Eq. (2.31)), sur les propriétés de la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$ et la densité du courant $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ à travers les courbes que nous allons tracer, on aura besoin de

connaître la valeur du niveau de Fermi μ qu'il est lié au nombre total de particules N et aussi au rapport d'intensité α . En effet, à température zéro et sans laisser un niveau vide, les particules occupent tous les niveaux d'énergie E_{nm} disponibles et ceci est à partir du niveau le plus bas jusqu'au dernier niveau correspondant à l'épuisement de toutes les particules. Tous ces niveaux sont alors inférieurs au niveau de Fermi. Cette situation est exprimée par la relation (1.43) que l'on écrira aussi comme

$$N = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{m=0}^{m_{\max}} 1 \quad (2.33)$$

où n_{\max} et m_{\max} sont les valeurs maximales possibles pour les nombres quantiques n et m caractérisant chaque état quantique. Ces deux valeurs maximales peuvent être déterminées à partir de la condition suivante

$$E_{nm} \leq \mu \Rightarrow (n + 1/2) \hbar\Omega_+ + (m + 1/2) \hbar\Omega_- \leq \mu \quad (2.34)$$

ce qui donne pour n_{\max} la valeur

$$n_{\max} = \text{integer} \left(\frac{\mu}{\hbar\Omega_+} - \frac{\Omega}{\Omega_+} \right) = \text{integer} \left(\frac{\tilde{\mu} - 1}{1 + \alpha} \right) \quad (2.35)$$

où $\tilde{\mu}$ est l'énergie du niveau de Fermi mesurée en unité de $\hbar\Omega$, c'est-à-dire

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu}{\hbar\Omega} \quad (2.36)$$

Pour une valeur quelconque du nombre quantique n on aura pour m_{\max} la valeur suivante

$$m_{\max} = \text{integer} \left(\frac{\mu}{\hbar\Omega_-} - \frac{\Omega_+}{\Omega_-} n - \frac{\Omega}{\Omega_-} \right) = \text{integer} \left(\frac{\tilde{\mu} - (1 + \alpha)n - 1}{1 - \alpha} \right) \quad (2.37)$$

où "integer" dans (2.35) et (2.37) signifie la partie entière de la valeur positive entre parenthèses. On voit sur l'équation (2.37) que m_{\max} prend des valeurs considérables pour des champs magnétiques très intenses ($\alpha \rightarrow 1$), ce qui explique la forte dégénérescence des niveaux d'énergie qui deviennent au fur et à mesure de type niveaux de Landau quand on augmente l'intensité du champ magnétique (voir (1.66)).

Si on revient maintenant à la relation (2.33) on trouve que

$$N = \frac{\tilde{\mu}^2 + (1 - \alpha)\tilde{\mu} + \alpha(1 - 2\alpha)}{2(1 - \alpha^2)} \quad (2.38)$$

La résolution de cette équation de deuxième degré en $\tilde{\mu}$ permet alors de donner une bonne estimation du niveau de Fermi $\mu(N, \alpha)$ pour un nombre de particules N et intensité du champ α .

2.5 Tracés des densité de particules et de courant

Afin de visualiser l'évolution des variations locales des densités de particules $\rho(\mathbf{r})$ et de courants $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ en fonction de l'intensité ω_L du champ magnétique appliqué, on choisit un nombre totale de particules du système $N = 2000$ et trois valeurs pour l'intensité du champ α allant de faible valeur à une valeur très élevée . Un programme de calcul conçu à cette fin permet alors de tracer les courbes souhaitées [12]. L'interface de ce programme est très simple à utiliser comme le montre la figure (2.5.1). Il suffit en effet d'introduire les ingrédients nécessaires pour le calcul de $\rho(\mathbf{r})$ et $\mathbf{J}(\mathbf{r})$, tels le rapport d'intensité α et la valeur du niveau de Fermi $\tilde{\mu}$ estimé à partir de (2.38), ensuite le programme calcule et trace ou exporte les données en format Excel selon le choix.

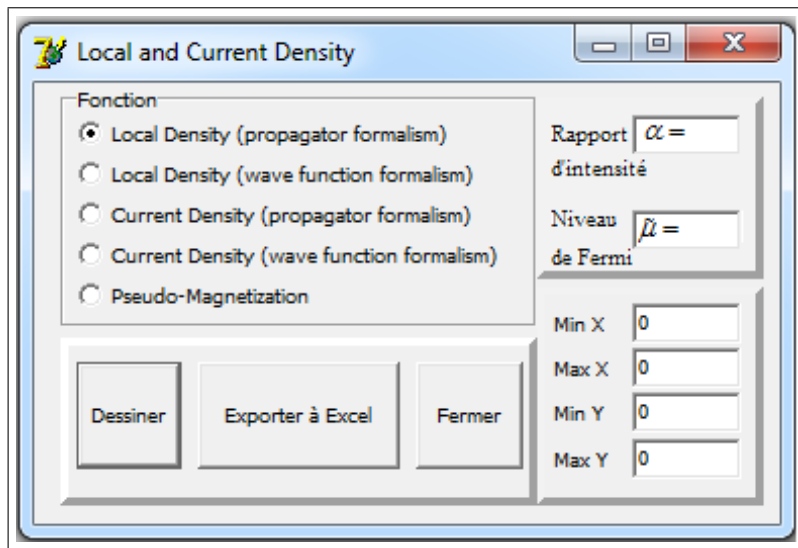


Figure 2.5.1 : Interface du programme utilisé pour visualiser les courbes des densités de particules et de courant.

Dans le tableau ci-dessous on met les valeurs choisies pour N et α et par suite celles de $\tilde{\mu}$ qui les correspondent.

Le rapport d'intensité			
$\alpha = \omega_L / \Omega$			
	$\alpha=0.95$	$\alpha=0.99$	$\alpha=0.995$
$N=2000$	$\tilde{\mu} = 19.75$	$\tilde{\mu} = 8.975$	$\tilde{\mu} = 6.324998$

2.5.1 Tracés de la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$

Avec un choix convenables des unités de mesure des longueurs et densités, on a tracé alors sur la même figure (2.5.2) les trois courbes correspondant aux trois valeurs choisies pour l'intensité α du champ magnétique afin de voir comment évoluer la densité $\rho(\mathbf{r})$ en fonction de ces intensités α croissantes. Il s'agit en effet de prendre comme unité de mesure de la distance r des particules au centre du système O la longueur ℓ donnée par (2.2) et celle de mesure de la densité $\rho(\mathbf{r})$ la valeur $1/\pi\ell^2$.

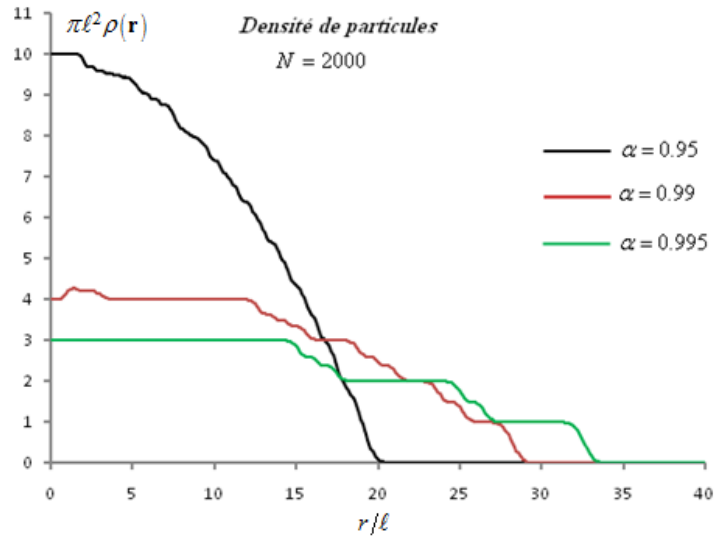


Figure 2.5.2 : La densité de particules pour $N=1000$ particules. On observe sur cette figure l'alternance régions incompressibles (plateaux) - compressibles dès que l'intensité α du champ magnétique soit proche de l'unité. La formation des plateaux de densité reflète la structure des niveaux d'énergie de type niveaux de Landau.

Progressivement, on observe qu'avec l'accroissement de l'intensité α , il y'a formation d'une série de régions où la densité est constante (structure en plateaux) séparées par des régions où la densité est variable avec la position et ceci tout en remarquant que ces plateaux de densités se produisent exactement pour des valeurs quantifiées de la densité $\rho(\mathbf{r}) = \nu/\pi\ell^2$ où ($\nu = 1, 2, \dots$). Cette alternance de régions incompressibles-compressibles dans la structure de densité $\rho(\mathbf{r})$ se voit bien quand le champ magnétique appliqué soit très intense $\alpha \rightarrow 1$, ce qui correspond à un spectre d'énergie de type niveaux de Landau.

2.5.2 Tracés de la densité de courant $J(\mathbf{r})$

Pour examiner le comportement du flux de particules au sein du système (c'est un flux radial) on prend comme unité de mesure de la densité de courant électrique la valeur j_0 définie en (2.32). Pour les trois valeurs de l'intensité α , on voit clairement sur la figure (2.32) l'établissement progressif d'une structure régulière pour des champs très intenses. On aperçoit qu'il y a un renversement de sens de circulation des électrons dans des régions bien déterminées. Il ne peut s'agir en effet que les régions compressibles et incompressibles.

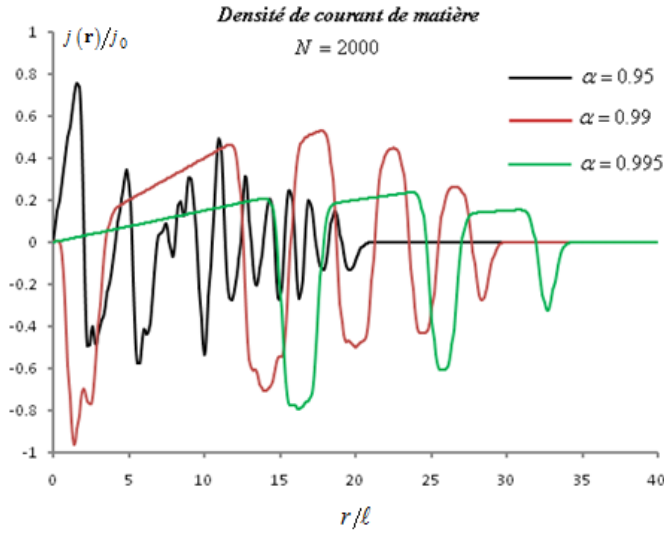


Figure 2.5.3 : On observe que le courant électrique présente des oscillations d'une façon irrégulière qui commence de prendre une régularité dès que le rapport d'intensité devient proche de 1, c'est-à-dire en entrant dans le régime des niveaux de Landau.

La distribution du courant présente des fortes oscillations pour les faibles valeurs du champ magnétique appliqué et il commence à prendre une structure régulière à des valeurs d'intensité très grandes pour lesquelles la densité de particules présente une structure régulière qui consiste en l'alternance de régions incompressibles-compressibles comme on l'a vu dans la figure (2.5.2). On observe que le courant de électrique change le sens de sa circulation à la fin de chaque plateau de densité pour qu'il circule dans le sens inverse dans la région compressible. Il rétablit cette oscillation régulière à chaque début d'une nouvelle alternance de régions. Chaque plateau correspond à un remplissage d'un nouveau niveau de Landau qui suit directement le niveau d'énergie précédent bien rempli dans la séquence du spectre d'énergie. Pour la figure (2.5.3) ci-dessus on a une séquence formée de trois niveau ($n = 0, 1, 2$) pour $\alpha = 0.995$.

Dans le but de voir clairement l'inversion de courant électrique au cours du passage d'une région à son adjacente on met ci-dessous sur la même figure (2.5.4) les densités de particules et de courant.

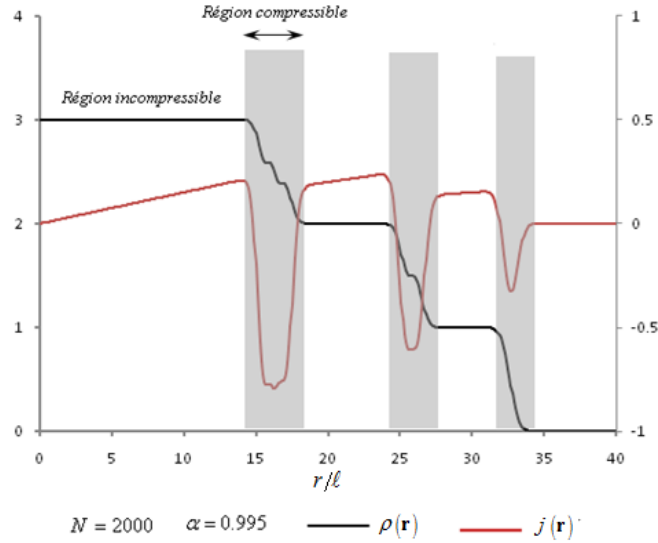


Figure 2.5.4 : Les valeurs de la densité locale sont données sur l'axe des ordonnées à gauche en unité de l'inverse de $\pi\ell^2$, alors que celles de la densité de courant sont mises à droite en unité de j_0 . La densité est un multiple entier de $1/\pi\ell^2$ pour les régions incompressibles dans lesquels le courant électrique circule dans le sens directe (flux d'électrons s'effectue par suite dans le sens indirecte) alors que dans les régions compressibles (zones grises) la densité de particules est décroissante avec la distance r et le courant électrique circule dans le sens inverse (négatif).

On peut voir sur cette figure qu'il n'existe qu'un seul type de courant dans chacune des régions. Dans la région incompressible, le courant est proportionnel au gradient du potentiel confinant, c'est un courant de volume (bulk current) qui est un courant de Hall quantique, alors que dans la région de densité compressible, le courant est proportionnel au gradient de la densité de particules $\rho(\mathbf{r})$ et par suite il possède une structure de courant de bord (edge current). le courant électrique est la somme de deux types de courants [12-13].

En utilisant le formalisme de la fonction de Green, ce fait spectaculaire de renversement de sens de circulation du courant électrique a été prédit y a longtemps (1994) dans [13]. et a été très récemment confirmé expérimentalement en 2020 [14].

Chapitre 3

La Magnétisation Orbitale Locale et Intégrale du système

3.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de calculer la magnétisation orbitale locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ induite par le courant électrique orbital $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ régnant dans le système subissant l'action d'un champ magnétique \mathbf{B} . La magnétisation totale du système \mathbf{M} , dite aussi *Aimantation* du système, peut être calculée facilement pour ce système bidimensionnel soit en intégrant la magnétisation locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ sur tout l'espace à deux dimensions, soit en utilisant la loi de la physique statistique qui permet de la dériver à partir du spectre d'énergie du système comme on va le voir dans la section suivante.

Il est bien connu que cette magnétisation totale \mathbf{M} présente un comportement oscillatoire en fonction de l'intensité du champ magnétique appliqué α sur un solide, mais aussi en fonction de la température du système T . Cet effet purement quantique a été découvert expérimentalement pour la première fois en (1930) et il est connu sous le nom "Oscillations de de Haas - van Alphen" après avoir été prédit théoriquement, dans la même année, par Landau qui a montré qu'il est une manifestation macroscopique due à la quantification des niveaux d'énergie des électrons en présence du champ magnétique. En fait, un gaz d'électron dans un métal montre une dépendance oscillatoire de plusieurs observables physiques, autres que la magnétisation, en fonction de l'intensité du champ magnétique comme par exemple les oscillations de la résistivité (oscillations de Shubnikov–de Haas), oscillations de la résistance de Hall ou les oscillations de la chaleur spécifique [15].

Parmi ces oscillations quantiques, celles de l'aimantation totale \mathbf{M} d'un système électronique constituent en particulier un outil précieux en physique du solide parce qu'elles sont exploitées couramment pour étudier la surface de Fermi. En fait, elles fournissent en plus des informations très importantes sur la masse effective des électrons libres et aussi sur la distance de libre parcours moyen dans les solides à travers le calcul de la période de ces oscillations.

Dans notre travail, le point essentiel à traiter ici est l'expression analytique de la partie locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ de cette magnétisation orbitale totale, comment elle se comporte en fonction du champ magnétique \mathbf{B} et sa relation avec la densité du courant électrique $\mathbf{J}(\mathbf{r})$.

3.2 La Magnétisation orbitale totale \mathbf{M}

A température finie T , le potentiel thermodynamique Ω_{th} d'un gaz de fermion dégénéré est donné par la relation [15]

$$\Omega_{th} = -\frac{1}{\beta} \sum_i \ln [1 + \exp (\beta (\mu - E_i))] \quad (3.1)$$

avec $\beta = 1/k_B T$ et k_B est la constante de Boltzmann. E_i sont les niveaux d'énergie du système. L'écriture Ω_{th} où on a écrit "th" en indice bas, a été adoptée pour le distinguer de la fréquence Ω . Pour notre système, on réécrit cette expression comme

$$\Omega_{th} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \ln [1 + \exp (\beta (\mu - E_{nm}))] \quad (3.2)$$

La magnétisation totale \mathbf{M} du système se déduit à partir de ce potentiel thermodynamique Ω_{th} par la relation [14-15]

$$\mathbf{M} = - \left(\frac{\partial \Omega_{th}}{\partial B} \right)_{T, V, \mu} \quad (3.3)$$

qui donne alors d'après (3.2) le résultat suivant

$$\mathbf{M} = - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\partial E_{nm}}{\partial B} \right) f(E_{nm}) \quad (3.4)$$

où $f(E_{nm})$ est la distribution de Fermi-Dirac donnée par

$$f(E_{nm}) = \frac{1}{1 + \exp (\beta (E_{nm} - \mu))} \quad (3.5)$$

qui devient pour une température nulle une fonction saut de Heaviside, c'est-à-dire

$$f(E_{nm}) \xrightarrow{T=0^{\circ}K} \Theta(\mu - E_{nm}) \quad (3.6)$$

alors, la relation (3.4) donne pour une température nulle l'expression suivante

$$\mathbf{M} = - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\partial E_{nm}}{\partial B} \right) \Theta(\mu - E_{nm}) \quad (3.7)$$

En utilisant l'expression (1.65) des énergies E_{nm} on trouve que

$$\frac{\partial E_{nm}}{\partial B} = \frac{\partial \omega_L}{\partial B} \frac{\partial E_{nm}}{\partial \omega_L} = \frac{e}{2M} \left[(n+m+1) \frac{\hbar \omega_L}{\Omega} + (n-m) \hbar \right] \quad (3.8)$$

alors

$$\mathbf{M} = \mu_B \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} [m - n - \alpha (n+m+1)] \Theta(\mu - E_{nm}) \quad (3.9)$$

avec μ_B est le magnéton de Bohr où

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2M} \quad (3.10)$$

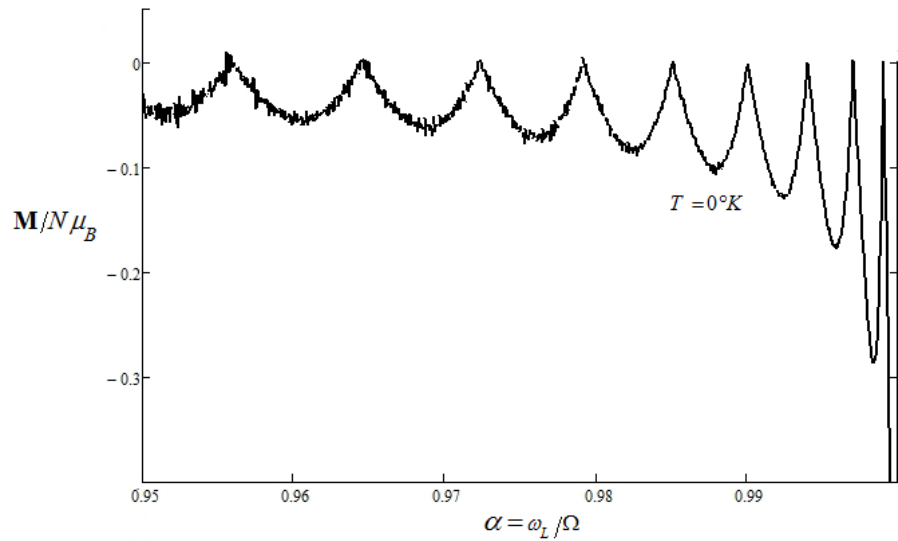


Figure 3.2.1 : Oscillations de la magnétisation par particule en fonction de l'intensité du champ magnétique appliqué (calculé en unité μ_B pour $N = 2000$).

Cette magnétisation orbitale totale montre un comportement oscillatoire en fonction de l'intensité α du champ magnétique appliqué comme on peut le voir sur la figure (3.2.1) ci-dessus.

C'est ces oscillations quantiques que l'on appelle oscillations de de Haas-van Alphen et qui sont dues à la quantification des niveaux d'énergie de Landau.

Le fait que les valeurs de cette magnétisation deviennent strictement négatives pour les champs très intenses n'est pas en effet surprenant parce que on n'a pris en compte que le mouvement orbitale des électrons du gaz et négligé les interactions des spins des électrons avec le champ magnétique. Ce que nous avons traité c'est donc le diamagnétisme de Landau. La susceptibilité du système ainsi calculée est par suite négative, alors que la susceptibilité totale du système doit être la somme des deux contributions paramagnétique de Pauli (dû aux spins des électrons) et celle du diamagnétisme de Landau (dû aux degrés de liberté orbitaux).

Dans la section prochaine, nous voulons calculer la partie locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ de la magnétisation orbitale totale du système et étudier sa variation avec la position et aussi avec l'intensité du champ magnétique.

3.3 La Magnétisation orbitale locale $\mathbf{M}(r)$

Nous avons indiqué dans le chapitre 2 que la présence du champ magnétique modifie la structure du courant électrique régnant dans le système. Ce dernier induit une magnétisation orbitale locale

$\mathbf{M}(\mathbf{r})$ dont la relation avec la densité du courant électrique \mathbf{J} est donnée par

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad (3.11)$$

où $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ est dirigée selon l'axe Oz . C'est-à-dire

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = M(\mathbf{r}) \mathbf{e}_z \quad (3.12)$$

La magnétisation orbitale totale \mathbf{M} s'obtient donc en intégrant cette partie locale sur tout le volume du système, c'est-à-dire à deux dimensions comme c'est le cas de notre système

$$\mathbf{M} = \int \mathbf{M}(\mathbf{r}) dS = 2\pi \int_0^\infty \mathbf{M}(r) r dr \quad (3.13)$$

Dans l'intégrale du dernier membre de cette relation on a écrit $\mathbf{M}(r)$ au lieu de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ car on montrera plus bas que la magnétisation locale ne dépend que de la distance r et non pas à la direction \mathbf{e}_φ , d'où le résultat (3.13) dans les coordonnées polaires. Evidemment, le calcul de la magnétisation orbitale totale \mathbf{M} à partir de cette intégrale doit donner le même résultat (3.9) tiré à partir de l'expression du potentiel thermodynamique (3.2). En effet, une démonstration rigoureuse peut être faite pour confirmer l'identité des deux résultats et que l'on ne fera pas ici.

Pour la dérivation de l'expression de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, rappelons qu'en coordonnées polaires à 2D on a

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_\varphi \quad (3.14)$$

alors, d'après (3.11) et (3.12) on obtient

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\partial}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{e}_\varphi \right) \times M(\mathbf{r}) \mathbf{e}_z = -\frac{\partial M(\mathbf{r})}{\partial r} \mathbf{e}_\varphi + \frac{1}{r} \frac{\partial M(\mathbf{r})}{\partial \varphi} \mathbf{e}_r \quad (3.15)$$

Puisque $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = J(r) \mathbf{e}_\varphi$, c'est-à-dire qu'il n'a de composante que sur la direction \mathbf{e}_φ (voir (2.30)), on en déduit que la magnétisation locale $M(\mathbf{r})$ ne dépend que de la distance r car on aura d'après (3.15)

$$\frac{\partial M(\mathbf{r})}{\partial \varphi} = 0 \quad (3.16)$$

Par suite, on trouve que

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = J(r) \mathbf{e}_\varphi = -\frac{\partial M(r)}{\partial r} \mathbf{e}_\varphi \Rightarrow \frac{\partial M(r)}{\partial r} = -J(r) \quad (3.17)$$

Maintenant, vue que l'expression (2.30) de $J(r)$ contient des polynômes de Laguerre tandis que l'intégrale sur r dans (3.17) que l'on doit faire pour trouver $M(r)$ est indéterminée, il serait commode de partir de l'expression (2.18) tout en utilisant (2.13) et (2.22), ce qui donne alors

$$\frac{\partial M(r)}{\partial r} = - \left(\frac{e\Omega}{2\pi\ell^2} \right) r \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi \sinh(\xi\hbar\Omega)} \left(\frac{\sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} - \alpha \right) \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) \right\} \quad (3.18)$$

que l'on peut mettre sous la forme condensée suivante

$$\frac{\partial M(r)}{\partial r} = \left(\frac{e\Omega}{2\pi\ell^2} \right) r \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ -\frac{1}{\xi} \lambda \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) \right\} \quad (3.19)$$

avec

$$\lambda = \lambda(\xi) = \frac{1}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \left(\frac{\sinh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} - \alpha \right) \quad (3.20)$$

et la fonction $g(\xi)$ donnée par (2.21) et que l'on écrira ici comme

$$g(\xi) = \frac{\cosh(\xi\hbar\Omega) - \cosh(\xi\hbar\omega_L)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} = \frac{2 \sinh(\xi\hbar\Omega_+/2) \sinh(\xi\hbar\Omega_-/2)}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \quad (3.21)$$

La magnétisation locale s'obtient en faisant l'intégrale dans (3.19) qui peut être interchangée avec la transformée de Laplace inverse \mathcal{L}_μ^{-1} comme suivant

$$M(r) = \left(\frac{e\Omega}{2\pi\ell^2} \right) \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ -\frac{1}{\xi} \lambda \int r \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) dr \right\} \quad (3.22)$$

On a

$$I = \int r \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) dr = -\frac{\ell^2}{2g(\xi)} \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) \quad (3.23)$$

Alors (3.22) devient

$$M(r) = \left(\frac{e\Omega}{4\pi} \right) \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{\lambda}{g(\xi)} \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) \right\} \quad (3.24)$$

Avec une constante d'intégrale près que l'on prend zéro pour $M(r \rightarrow \infty) = 0$. D'après (3.20) et (3.21) on a

$$\frac{\lambda}{g(\xi)} = \frac{1}{2 \sinh(\xi\hbar\Omega)} \left(\frac{\sinh(\xi\hbar\omega_L) - \alpha \sinh(\xi\hbar\Omega)}{\sinh(\xi\hbar\Omega_+/2) \sinh(\xi\hbar\Omega_-/2)} \right) \quad (3.25)$$

insérée dans (3.24), l'expression de la magnétisation $M(r)$ devient

$$M(r) = \left(\frac{e\Omega}{8\pi} \right) \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{1}{\sinh(\xi\hbar\Omega)} \left(\frac{\sinh(\xi\hbar\omega_L) - \alpha \sinh(\xi\hbar\Omega)}{\sinh(\xi\hbar\Omega_+/2) \sinh(\xi\hbar\Omega_-/2)} \right) \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) \right\} \quad (3.26)$$

Afin de performer la transformée de Laplace inverse, il est nécessaire d'effectuer les simplifications suivantes. Pour le terme exponentiel dans (3.26) il peut être écrit d'après (2.23) et (2.26) comme

$$\exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} g(\xi) \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2} \right)^{n+m} \frac{\exp[\xi(m-n)\hbar\omega_L]}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^{n+m}} \exp \left(-\frac{r^2}{\ell^2} \coth(\xi\hbar\Omega) \right) \quad (3.27)$$

D'autre part, si on utilise le développement

$$\sinh^{-1}(x) = 2 \sum_{p=0}^{\infty} \exp[-(2p+1)x] \quad (3.28)$$

On aurait

$$\frac{1}{\sinh(\xi\hbar\Omega_+/2) \sinh(\xi\hbar\Omega_-/2)} = 4 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} \exp \left[-\left(p + \frac{1}{2} \right) \xi\hbar\Omega_+ - \left(q + \frac{1}{2} \right) \xi\hbar\Omega_- \right] \quad (3.29)$$

l'expression dans l'exponentiel n'est que celle du spectre d'énergie (1.64) écrit pour les nouveaux indices p et q . Alors

$$\frac{1}{\sinh(\xi\hbar\Omega_+/2)\sinh(\xi\hbar\Omega_-/2)} = 4 \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} \exp(-\xi E_{pq}) \quad (3.30)$$

Insérons maintenant les deux relations (3.27) et (3.30) dans (3.26) on trouve que

$$\begin{aligned} M(r) = & \left(\frac{e\Omega}{2\pi}\right) \sum_{n,m,p,q} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{2}{\xi} (\sinh(\xi\hbar\omega_L) - \alpha \sinh(\xi\hbar\Omega)) \right. \\ & \left. \times \exp[\xi(m-n)\hbar\omega_L - \xi E_{pq}] \frac{\exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2} \coth(\xi\hbar\Omega)\right)}{(\exp(\xi\hbar\Omega) - \exp(-\xi\hbar\Omega))^{n+m+1}} \right\} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Aussi, en utilisant le développement (2.8) on obtient

$$\begin{aligned} M(r) = & \left(\frac{e\Omega}{2\pi}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\right) \sum_{k,n,m,p,q} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} L_k^{n+m} \left(2\frac{r^2}{\ell^2}\right) \\ & \times \mathcal{L}_\mu^{-1} \left\{ \frac{1}{\xi} \left\{ \exp[-\xi((2k-\alpha)\hbar\Omega + E_{nm} + E_{pq})] - \exp[-\xi((2k+\alpha)\hbar\Omega + E_{nm} + E_{pq})] \right. \right. \\ & \left. \left. - \alpha \left[\exp[-\xi((2k-1)\hbar\Omega + E_{nm} + E_{pq})] - \exp[-\xi((2k+1)\hbar\Omega + E_{nm} + E_{pq})] \right] \right\} \right\} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Maintenant, il ne nous reste que d'utiliser (1.35) pour trouver finalement que l'expression de la magnétisation locale est

$$\begin{aligned} M(r) = & \left(\frac{\mu_B}{\pi\ell^2}\right) \sum_{k,n,m,p,q} \frac{1}{n!m!} \left(\frac{r^2}{\ell^2}\right)^{n+m} \exp\left(-\frac{r^2}{\ell^2}\right) L_k^{n+m} \left(2\frac{r^2}{\ell^2}\right) \\ & \left\{ \Theta(\mu - (2k-\alpha)\hbar\Omega - E_{nm} - E_{pq}) - \Theta(\mu - (2k+\alpha)\hbar\Omega - E_{nm} - E_{pq}) \right. \\ & \left. - \alpha \left[\Theta(\mu - (2k-1)\hbar\Omega - E_{nm} - E_{pq}) - \Theta(\mu - (2k+1)\hbar\Omega - E_{nm} - E_{pq}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Où on rappelle que $\mu_\beta = e\hbar/2m_e$ est le magnéton de Bohr. On montre dans la figure (3.3.1) ci-dessus les oscillations avec la position de la magnétisation locale $M(r)$.

On voit sur cette figure que la magnétisation locale $M(r)$ est décroissante dans les régions de densité incompressibles tandis qu'elle est croissante dans les régions compressibles, en accord avec la relation (3.17). On remarque aussi qu'à chaque remplissage d'un nouveau niveau de Landau ($n = 0, 1, 2$), c'est-à-dire à chaque formation d'un nouveau plateau de densité de particules, la magnétisation $M(r)$ prend une valeur maximale qui à partir de laquelle elle commence à décroître jusqu'à atteindre une valeur minimale correspondant à la formation d'une nouvelle région de densité compressible où le sens de circulation des électrons se renverse.

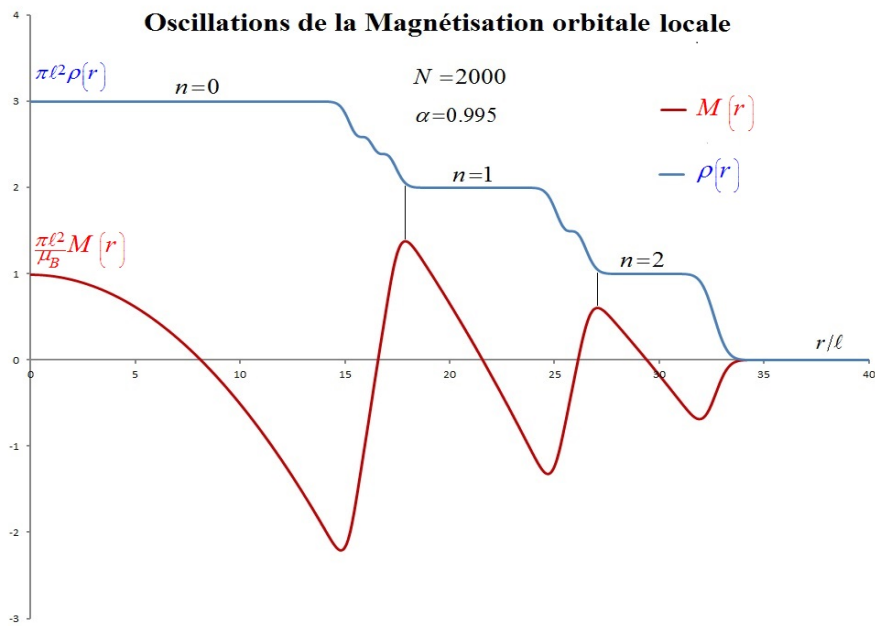


Figure 3.3.1 : Oscillations de la magnétisation locale en fonction de la position r dans le régime de Landau. Dans le cas d'un système de $N = 2000$ électrons et pour une intensité du champ magnétique $\alpha = 0.995$, une séquence de trois niveaux de Landau s'établit qui seront occupés à partir du plus bas ($n = 0$).

Conclusion Générale

Nous avons traité dans ce mémoire un système constitué d'un gaz de N électrons confiné par un potentiel harmonique isotrope et soumis à l'action d'un champ magnétique perpendiculaire au système bidimensionnel. Les quantités physiques qui ont été étudiées dans ce mémoire sont la densité de particules, la densité de courant, la magnétisation orbitale totale et sa partie locale.

Nous avons exposé premièrement l'approche suivie pour cette étude et la raison pour laquelle nous l'avons choisie. Dans le même premier chapitre, nous avons décrit soigneusement les caractéristiques de notre système, en particulier l'évolution du spectre d'énergie en fonction de l'intensité du champ magnétique où nous avons signalé la formation d'une séquence des niveaux de Landau pour les champs assez forts.

Ensuite, nous avons passé au calcul des expressions analytiques exactes de toutes les quantités citées ci-dessus. On a vu qu'avec une intensité magnétique forte, la densité de particules prend une forme très particulière où elle est formée de deux types de régions. Dans l'une d'entre elles, la densité est constante et dans l'autre la densité est décroissante avec la position des particules. Par ailleurs, la densité de courant présente aussi une structure assez régulière dans ces limites des champs très intenses où elle est constituée de deux types de courants circulants en sens inverses et chacun d'eux est dans une région de densité bien déterminée.

En ce qui concerne la magnétisation orbitale du système, on a dérivé l'expression de la magnétisation totale à partir du potentiel thermodynamique et étudié les oscillations quantiques de de Haas-van Alphen qui se produisent comme résultat de la quantification des niveaux d'énergie. La magnétisation orbitale locale est ensuite calculée à partir de la densité de courant électrique trouvée précédemment. La variation de cette partie locale montre un comportement oscillatoire avec la position, mais aussi en fonction de l'intensité du champ magnétique. Les oscillations de cette magnétisation locale reflètent en effet la structure des inversions des courants électriques régnant dans le système.

Références Bibliographiques

- [1] M. Brack, R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics* (Frontiers in Physics, vol.96, Westview, Boulder, 2003)
- [2] M. Brack et al., *Phys. Rev. Lett.* 86, 1574 (2001); M. Brack et al., *J. Phys. A* 36, 1111 (2003); B.P. van Zyl et al., *Phys.Rev. A* 67,023609 (2003); P. Shea et al., *J. Phys. A* 40, 10589 (2007); P. Shea et al., *J. Phys. A.* 41, 135305 (2008); B.P. van Zyl et al., *Phys. Rev. B* 69 024520 (2004); K. Bencheikh et al., *Phys. Rev. A* 78 053614 (2008). N H March et al., *Phys. Rev.* 120 830 (1960).
- [3] P. Shea et al.,*Phys. Rev. B* 74, 205334 (2006)
- [4] H. Naidja et al., *Phys. Rev. A* 83, 053631 (2011).
- [5] S. Medjedel et al, *Physics Letters A* 383, 1915–1921 (2019).
- [6] I S Gradshteyn and I M Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, New York, 5th edition, 1994).
- [7] P. Ring, P. Schuck, *the Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1980).
- [8] E. H. Sondheimer et al., *Proc. R. Soc. A*, 210, 173 (1951).
- [9] N. H. March et al, *J. Phys. A: Math. Gen.* 18, L643-L645 (1985).
- [10] K. Husimi, *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn* 22, 264 (1940); E. H. Sondheimer et al., *Proc. R. Soc. A*, 210, 173 (1951); N H March et al., *Phys. Rev.* 120 830 (1960); N. H. March et al., *J. Phys. A: Math. Gen.* 18 L643 (1985); J. M. Manoyant, *Phys. A: Math. Gen.* 19. 3013 (1986); M. A. Habeeb, *J. Phys. A: Math. Gen.* 20, 5549-5554 (1987); R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (New York: McGraw-Hill) (1965). ch 10; K. Yonei, *J. Phys. A: Math. Gen.* 22. 2415 (1989).
- [11] I. Saidi, *Densité de Particules et de Courant d'un Gaz Fermionique Ultra Froid en Rotation Rapide*, Mémoire Master, Université de M'sila, Algérie, (2018).
- [12] S. Medjedel. *Calcul des densités de courants dans les systèmes quantiques confinés en dimensions réduites*. Thèse de Doctorat en physique théorique. Université Ferhat Abbes-Sétif 1 (2016). Algérie.
- [13] M. R. Geller et al., *Phys. Rev. B* 50, 11714 (1994).
- [14] Uri, A. et al., *Nat. Phys.* 16, 164–170 (2020).
- [15] N.W. Ashcroft, D. Mermin, *Physique du Solide*, EDP Sciences (2002), France.
- [16] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique statistique*, Première partie, Edition MIR (1984), Moscou, Russie.
- [17] D.U. Felderhof, et al, *Physica A* 82 (1976) 151.

- [18] Y. Ishikawa, et al, J. Phys. Soc. Jpn. 68 (1999) 2405.
- [19] J.C. Lin, et al, Phys. Rev. B 65 (2001) 035304.
- [20] Y. Li et al, Phys. Lett. A 380, 353 (2016).
- [21] Y. Li, Physica B 481, 38 (2016).
- [22] R. V.Denton: Z. Phys. 265 (1973) 119
- [23] R.Nemeth:Z. Phys. B 81 (1990) 89
- [24] D.Yoshioka et al, J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 2368
- [25] Y.Meir, et al, Phys. Rev. B 42 (1990) 8351.

درسنا في هذه المذكرة غاز إلكترونات ثنائي البعد محصور بواسطة كمون هزاز توافقي وموجود تحت تأثير حقل مغناطيسي موجه بشكل عمودي على مستوى الجملة. تمت دراسة كثافة الجسيمات وكثافة التيار الكهربائي وكذا المغناطيسية المدارية الكلية والمحلية لهذا الغاز.

دلّت الدراسة على أن كثافة الجسيمات تتميز ببنية منتظمة تتمثل في كونها مقسمة إلى نوعين من المناطق. فهناك مناطق تكون فيها الكثافة ثابتة بينما هناك مناطق مجاورة لها تكون فيها متغيرة مع موضع الجسيمات. كذلك الأمر بالنسبة للتيارات الكهربائية الحادثة في الجملة، فهي تتمتع أيضا ببنية منتظمة بحيث وجدنا أن هذه التيارات الكهربائية تسير في اتجاهات متعاكسة حسب المنطقة التي تتدفق عبرها بحيث لا نجد إلا نوعا واحدا من التيارات في كل منطقة.

أثبتت دراسة المغناطيسية المدارية الكلية أنها تُظهر اهتزازات كمومية، أي اهتزازات de Haas-van alphen، من أجل حقول مغناطيسية شديدة، بينما تغير المغناطيسية المدارية المحلية مع الموضع يعكس بنية الانعكاسية في اتجاهات التيارات الكهربائية المدروسة.

الكلمات المفتاحية: غاز إلكترونات ثنائي البعد، كثافة التيار، كثافة الجسيمات، انقلابات التيار الكهربائي. اهتزازات de Haas-van alphen

Abstract:

In this work, we studied a two-dimensional electron gas (2DEG) confined by an isotropic harmonic potential and subjected to a magnetic field perpendicular to the plane of the gas. The studied physical quantities are the particle density, current density, total orbital magnetization and its local part.

The study made here shows a very particular behavior of these physical quantities. For a strong magnetic field, we show that the particle density is formed of two types of regions. In one of them, the density is constant and in the other region, the density decreases with the position of the particles. On the other hand, the current density also has a very regular structure within the limits of very intense fields where it is also made up of two types of currents flowing in opposite directions and each of the density regions contain only one type of these currents. For the total orbital magnetization, the quantum oscillations of de Haas-van Alphen have been studied, while its local part shows an oscillatory behavior with the position for these intense fields, which reflects the structure of the inversions of the electric currents flowing in the system.

Key words: 2DEG, Current and particle densities, current reversals, Orbital magnetization.

Résumé :

Nous avons étudié dans ce mémoire un système constitué d'un gaz de N électrons bidimensionnel confiné par un potentiel harmonique isotrope et soumis à l'action d'un champ magnétique perpendiculaire au plan du gaz. Les quantités physiques qui ont été étudiées sont la densité de particules, la densité de courant, la magnétisation orbitale totale et sa partie locale.

L'étude faite ici montre un comportement très particulier de ces grandeurs physiques. Pour une intensité magnétique forte, la densité de particules prend une forme très particulière où elle est formée de deux types de régions. Dans l'une d'entre elles, la densité est constante et dans l'autre la densité est décroissante avec la position des particules. Par ailleurs, la densité de courant présente aussi une structure assez régulière dans ces limites des champs très intenses où elle est constituée aussi de deux types de courants circulants en sens inverses et chacun d'eux se trouve seul dans une région de densité bien déterminée. Pour la magnétisation orbitale totale on a étudié les oscillations quantiques de de Haas-van Alphen, alors que sa partie locale montre un comportement oscillatoire avec la position pour ces champs intenses et ceci reflète la structure des inversions des courants électriques régnant dans le système.

Mots-clés : gaz d'électrons, densité de courant, inversions des courants, Magnétisation orbitale. Oscillations de de Haas-van alphen