

Lacunes spectrales des Hamiltoniens périodiques en dimension 2 induites par un champ magnétique¹

Horia D. Cornean
Department of Mathematical Sciences,
Aalborg University
Aalborg, Denmark
cornean@math.aau.dk

Bernard Helffer
Laboratoire de Mathématiques Jean Leray,
Nantes Université
Nantes, France
Bernard.Helffer@univ-nantes.fr

Radu Purice
Simion Stoilow Institute of Mathematics
of the Romanian Academy
Bucharest, Romania
Radu.Purice@imar.ro

Résumé — Pour une classe d'opérateurs périodiques en dimension 2 avec un champ magnétique régulier, nous construisons des Hamiltoniens effectifs de type Peierles-Onsager, avec des estimations précises sur la distance entre leurs spectres et ceux du Hamiltonien magnétique. Nous les utilisons pour démontrer l'apparition de lacunes spectrales dans le spectre du Hamiltonien magnétique.

Mots clés — analyse spectrale, modélisation mathématique, transport quantique, champ magnétique.

I. INTRODUCTION

La phénoménologie du transport quantique dans des solides soumis à un champ électro-magnétique représente un domaine d'une extrême importance scientifique et technologique. Un des modèles de base dans ce domaine est celui d'un ensemble infini d'électrons à charge électrique négative, se déplaçant dans un champ électrique périodique, ou presque-périodique, décrivant le champ moyen produit par un réseau d'ions positifs considérés comme fixes ou en vibration autour des positions d'équilibre formant un réseau périodique. La description mathématique d'un tel système se construit à l'aide d'Hamiltoniens quantiques décrivant l'évolution dans le temps de la densité de présence des électrons dans l'espace. Un tel Hamiltonien est du point de vue mathématique un opérateur non-borne auto-adjoint dans l'espace de Hilbert des fonctions de carré intégrable sur l'espace des positions, et sa mesure spectrale associée. Celle-ci est une fonction associant à tout sous-ensemble de l'axe réel (dans une certaine classe admissible) le projecteur orthogonal sur le sous-espace des états d'énergie dans ce sous-ensemble. La transformée de Fourier donne une procédure pour relier les propriétés de l'évolution à celles du support de la mesure spectrale, appelée le spectre du Hamiltonien. Un aspect très intéressant de cette correspondance est qu'elle permet de montrer que la présence des lacunes spectrales, i.e. un spectre ayant des composantes bien séparées l'une de l'autre, a des conséquences sur la conductivité électrique du solide. Pour des raisons expliquées ci-dessous, nous considérons des systèmes quasi-bidimensionnels, i.e. ayant une dimension très petite dans une direction, en comparaison avec les deux autres directions.

II. LE CADRE MATHÉMATIQUES [1], [2]

A. Les Hamiltoniens périodiques

Le modèle de base que nous utilisons contient un certain nombre de "simplifications" permettant de négliger dans un

premier temps certains aspects qu'on estime contribuer à une échelle plus petite et qu'on peut prendre en compte ultérieurement par des méthodes perturbatives. Ainsi on considère que les électrons n'interagissent pas entre eux et que les ions du réseau sont fixes et produisent donc un potentiel périodique. Notre modèle consiste donc à étudier l'évolution d'un électron dans l'espace physique de dimension 2 (vu notre hypothèse de quasi bidimensionalité), dans lequel est présent un potentiel scalaire périodique $V: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$.

Les observables physiques de ce système sont d'un côté les constantes : charge électrique et masse qui caractérisent l'électron et les observables dynamiques: position, impulsion et énergie. En théorie quantique, l'état de l'électron à chaque instant $t \in \mathbb{R}$ est décrit par un vecteur de norme un ψ dans $L^2(\mathbb{R}^2)$ (l'espace de Hilbert des fonctions de carré intégrable sur $\mathbb{R}^2$), i.e. $\int_{\mathbb{R}^2} dx |\psi(x)|^2 = 1$. Alors, la description quantique affirme que la position de l'électron, en tant que vecteur de $\mathbb{R}^2$ est avec probabilité $\int_A dx |\psi(x)|^2$ dans le sous-ensemble (mesurable) $A \subset \mathbb{R}^2$ et que son impulsion, en tant que vecteur de $\mathbb{R}^2$ aussi, est avec probabilité $\int_B d\xi |\hat{\psi}(\xi)|^2$ dans le sous-ensemble (mesurable) $B \subset \mathbb{R}^2$, où $\hat{\psi}$ est la transformée de Fourier de la fonction $\psi \in L^2(\mathbb{R}^2)$. L'observable physique : énergie du système, ou Hamiltonien du système, est alors donnée par l'extension auto-adjointe de l'opérateur :

$$H = - \sum_{j=1,2} \partial_j^2 + V(x) \quad (1)$$

agissant sur l'espace des fonctions régulières et à décroissance rapide sur $\mathbb{R}^2$, vu comme sous-espace dense de $L^2(\mathbb{R}^2)$, où $V(x)$ est l'opérateur de multiplication par la fonction réelle périodique V introduite plus haut. Alors l'évolution de l'état du système entre le temps $t_0 \in \mathbb{R}$ et le temps $t > t_0$ est décrite par l'opérateur unitaire $U(t-t_0) := \exp(-i(t-t_0)H)$, défini par le calcul fonctionnel des opérateurs auto-adjoints.

B. La théorie de Bloch-Floquet

Étudier les Hamiltoniens périodiques introduits plus haut revient donc à considérer des opérateurs différentiels (ou pseudo-différentiels) sur $\mathbb{R}^2$ qui sont invariants par rapport aux translations par les éléments d'un sous-groupe discret, isomorphe à $\mathbb{Z}^2$ qui définit la périodicité du potentiel $V: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. La théorie de Bloch-Floquet montre que tout opérateur de cette forme est unitairement équivalent (par la transformée de Bloch-Floquet) à une intégrale directe

¹ Travail partiellement réalisé dans le cadre du IRN ECO-Math (CNRS). <http://www.imar.ro/GDRI/index.php>

d'opérateurs différentiels (ou pseudo-différentiels) agissant sur le tore de dimension 2, indexés par un tore de dimension 2. Le résultat fondamental de la théorie de Bloch-Floquet est le théorème décrivant la structure, dite de bandes, du spectre des Hamiltoniens périodiques (dû aux contraintes de cette présentation, il y a des termes apparaissant dans l'hypothèse du théorème suivant que nous ne pouvons pas expliquer ici et nous renvoyons le lecteur à des monographies comme [3]) : **Théorème.** *Tout opérateur pseudo-différentiel H de symbole réel, elliptique et Z^2 -périodique sur $L^2(\mathbb{R}^2)$ est unitairement équivalent à une famille lisse d'opérateurs $\{\hat{H}_\theta\}_{\theta \in S^2}$ indexée par le tore S^2 de dimension 2, chacun étant unitairement équivalent à un opérateur auto-adjoint défini sur $L^2(S^2)$ et à résolvante compacte.*

Conséquences.

- 1) Il existe une famille dénombrable de fonctions continues $\{S^2 \ni \theta \rightarrow \lambda_k(\theta) \in \mathbb{R}\}_{k \in \mathbb{N}}$ telles que $\lambda_k(\theta) \leq \lambda_{k+1}(\theta)$ pour tout $k \in \mathbb{N}$ et tout $\theta \in S^2$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k(\theta) = +\infty$ pour tout $\theta \in S^2$ et le spectre de chaque $\hat{H}_\theta$ est égal à $\{\lambda_k(\theta)\}_{k \in \mathbb{N}}$.
- 2) Pour tout $k \in \mathbb{N}$ et tout ouvert connexe $O \subset S^2$ sur lequel la multiplicité de $\theta \rightarrow \lambda_k(\theta)$ est constante, la fonction $O \ni \theta \rightarrow \lambda_k(\theta) \in \mathbb{R}$ est lisse.
- 3) Le spectre de H est contenu dans une demi-droite $[E_0, +\infty)$ et se compose d'une réunion de bandes $\{\lambda_k(\theta), \theta \in S^2\}_{k \in \mathbb{N}}$ (qui peuvent s'intersecter ou non).

C. Le champ magnétique

Sans nous attarder sur le formalisme géométrique des formes différentielles, précisons que pour des systèmes à deux dimensions, le champ magnétique est décrit par une fonction $B : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ qui change de signe quand on change l'orientation du plan $\mathbb{R}^2$. Un tel champ magnétique est dit régulier, quand la fonction qui le décrit est lisse et bornée ainsi que toute ses dérivées. Un tel champ magnétique peut s'écrire (d'une manière non-unique !) sous la forme $B = \partial_1 A_2 - \partial_2 A_1$ où $A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ est un champ de vecteurs lisse ayant au plus une croissance linéaire à l'infini. La description quantique du système physique ayant le Hamiltonien (1), revient à remplacer les opérateurs de différentiation $\{-i\partial_j\}_{j=1,2}$ par les dérivées covariantes $\{-i\partial_j - A_j(x)\}_{j=1,2}$ associées au champ $A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ et donc à remplacer (1) par

$$H^A = - \sum_{j=1,2} (\partial_j - iA_j(x))^2 + V(x). \quad (2)$$

D. La substitution de Peierls-Onsager

Dès le début des études théoriques des phénomènes quantiques dans les solides, un des outils de base a été l'approximation du Hamiltonien H^A par des Hamiltoniens effectifs obtenus par la procédure appelée "substitution de Peierls-Onsager" [4], [5]. Cette procédure consiste à regarder les fonctions $\lambda_k : S^2 \rightarrow \mathbb{R}$ comme des fonctions périodiques sur l'espace $\mathbb{R}^2$ des impulsions et, pour un intervalle d'énergie I assez étroit, à approximer le Hamiltonien H^A par la quantification d'un Hamiltonien classique de la forme $h(x, \xi) := \lambda_k(\xi - iA(x))$, tel que $I \subset \{\lambda_k(\theta), \theta \in S^2\}$. Nous appelons les points $\theta \in S^2$ des quasi-impulsions. Construire de telles approximations et estimer la "distance" entre leurs spectres et ceux du Hamiltonien

complet H^A pour des situations particulières, ce qu'on appelle obtenir des résultats rigoureux concernant la substitution de Peierls-Onsager, a été et reste un très riche domaine d'activité en physique mathématique.

III. NOS RESULTATS

Nos études dans [6]–[8] ont été consacrées à l'analyse spectrale du Hamiltonien (1) pour un potentiel Z^2 -périodique $V : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ lisse et pour un champ magnétique de la forme:

$$B = B^\bullet + \epsilon B^\circ + \kappa \epsilon B^\epsilon \quad (3)$$

où

- $B^\bullet : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ est un champ magnétique Z^2 -périodique vérifiant l'hypothèse:

$$\int_{|x_1| \leq 1} dx_1 \int_{|x_2| \leq 1} dx_2 B^\bullet(x_1, x_2) = 0 \quad (4)$$

et admettant donc [9] un potentiel vecteur $A^\bullet : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$

Z^2 -périodique,

- $\epsilon \in [0, \epsilon_0]$ pour un $\epsilon_0 > 0$ qu'on va choisir assez petit,
- $B^\circ > 0$ est un champ magnétique constant,
- $\{B^\epsilon\}_{0 \leq \epsilon \leq 1}$ est une famille bornée de champs magnétiques lisses avec serivées bornées et $\kappa \in [0, 1]$.

Nous considérons donc un Hamiltonien périodique H^A dans un champ magnétique régulier et faible ($B^\circ + \kappa B^\epsilon$) contrôlé par le paramètre $\epsilon \in [0, \epsilon_0]$ qui a son tour a une partie constante plus une 'petite' partie oscillante contrôlée par le paramètre $\kappa \in [0, 1]$. La partie constante ϵB° assure qu'il y a une perturbation assez forte (non-analytique) du Hamiltonien H^A .

A. Le problème

Le problème spectral que nous considérons est lié à la description mathématique de l'effet Hall quantique [10] et consiste à montrer que pour $\epsilon_0 > 0$ et $\kappa \in [0, 1]$ assez petits, le champ magnétique (3) produit des lacunes spectrales dans certaines régions du spectre du H^A . L'existence de telles lacunes spectrales permet d'expliquer des changements abrupts dans la conductivité électrique. Notre approche consiste à montrer que localement en énergie et en quasi-impulsions une substitution de Peierls-Onsager approche bien (à l'ordre $(\kappa + \epsilon)$) le vrai Hamiltonien H^A et que le spectre du Hamiltonien effectif ainsi construit a des lacunes spectrales.

Dans nos articles [6]–[8] nous avons mis en évidence deux situations du type décrit plus haut, sous les hypothèses suivantes:

a) Il existe $k_0 \in \mathbb{N}$ et $\theta_0 \in S^2$ tels que $\lambda_{k_0}(\theta_0) = 0$ est un minimum global de $\lambda_{k_0} : S^2 \rightarrow \mathbb{R}$ et il existe $d_0 > 0$ tel que $\sup_{\theta \in S^2} \lambda_{k_0-1}(\theta) < -d_0$.

b) Il existe un intervalle compact $J := [-\Lambda, \Lambda] \subset \mathbb{R}$ contenant 0 dans son intérieur, $k_0 \in \mathbb{N}$ et $\theta_0 \in S^2$ avec un de ses voisinages compacts difféomorphe à un disque Σ_J tels que:

- $J \cap \lambda_k(S^2) = \emptyset$ seulement pour $k \in \{k_0, k_0 + 1\}$;
- $[-\Lambda, 0] = \Sigma_J \cap \lambda_{k_0}(S^2)$, $[0, \Lambda] = \Sigma_J \cap \lambda_{k_0+1}(S^2)$;
- $\lambda_{k_0}(\theta_0) = \lambda_{k_0+1}(\theta_0)$ si et seulement si $\theta = \theta_0$;

- l'application $S^2 \ni \theta \rightarrow D_0 := \lambda_{k0}(\theta)\lambda_{k0+1}(\theta)$ a un maximum non-dégénéré, i.e. ayant des dérivées non-nulles, et égale à 0 au point $\theta_0 \in S^2$.

L'importance des hypothèses spectrales ci-dessus réside dans le fait qu'elles impliquent l'existence d'un intervalle d'énergies tel que le spectre de H^A dans cet intervalle a une forme simple :

a) $J \cap \sigma(H^{A*}) = \lambda_{k0}(\Sigma_J)$ où $\Sigma_J \subset S^2$ est un voisinage compact de θ_0 topologiquement trivial et $\lambda_{k0}(\theta_0)$ est un minimum global de $\lambda_{k0}: S^2 \rightarrow \mathbb{R}$;

b) $J \cap \sigma(H^{A*}) = \lambda_{k0}(\Sigma_J) \cup \lambda_{k0+1}(\Sigma_J)$ où $\Sigma_J \subset S^2$ est un voisinage compact de θ_0 topologiquement trivial, $\lambda_{k0}(\theta_0) \cup \lambda_{k0+1}(\theta_0) = 0$ et θ_0 est un maximum non-dégénéré du produit $\lambda_{k0}(\theta)\lambda_{k0+1}(\theta)$.

B. Notre résultat

Pour tout voisinage ouvert $(-L, L) \subset \mathbb{R}$ de $0 \in \mathbb{R}$ contenu dans $\epsilon \subset \mathbb{R}$ (choisi comme décrit ci-dessus), il existe $\epsilon_0 > 0$ et $\kappa_0 \in (0, 1)$ tels que dans $(-L, L)$, le spectre du Hamiltonien H^A de champ magnétique (3) avec $\epsilon \in (0, \epsilon_0)$ et $\kappa \in [0, \kappa_0]$, sous l'hypothèse (a) ou (b) ci-dessus, a des lacunes spectrales d'ordre ϵ dans le cas (a) et resp. d'ordre $\sqrt{\epsilon}$ dans le cas (b).

[11.]

REFERENCES

- [1.] G. Dell'Antonio: "Lectures on the mathematics of quantum mechanics I", Atlantis Press, 2015.
- [2.] G. Dell'Antonio: "Lectures on the mathematics of quantum mechanics I", Atlantis Press, 2016.
- [3.] Lars Hormander: "The analysis of linear partial differential operators III: pseudo-differential operators", Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [4.] R.E. Peierls: "Quantum theory of solids", Oxford University Press, 1955.
- [5.] J.M. Luttinger: "The Effect of a magnetic Field on Electrons in a Periodic Potential", Phys. Rev. vol. 84, pp. 814-817, 1951.
- [6.] H. D. Cornean, B. Helffer et R. Purice: "Low lying spectral gaps induced by slowly varying magnetic fields", Journal of Functional Analysis. vol. 273, pp. 206-282, 2017.
- [7.] H. D. Cornean, B. Helffer et R. Purice: "Peierls' substitution for low lying spectral energy windows", Journal of Spectral Theory. vol. 9, pp. 1179-1222, 2019.
- [8.] H. D. Cornean, B. Helffer et R. Purice: "Spectral analysis near a Dirac type crossing in a weak non-constant magnetic field", Transactions of the American Mathematical Society. vol. 374, pp. 7041-7104, 2021.
- [9.] R. Hempel et I. Herbst: "Bands and gaps for magnetic periodic Hamiltonians", dans "Partial Differential Operators and Mathematical Physics", OT 78, Birkhauser, pp 175-184, 1995.
- [10.] J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale et M. D. Nijs: "Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential", Phys. Rev. Lett. 49, 405.