Available online at www.sciencedirect.com
ScienceDirect
C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 347 (2009) 835–839
COMPTES RENDUS MATHEMATIQUE

Physique Mathématique

Estimation semi-classique du courant quantique en présence d'un grand champ magnétique variable

Sourour Negra

Université de Paris-sud, département de mathématiques, bâtiment 425, 91405 Orsay cedex, France

Reçu le 1er juillet 2008 ; accepté après révision le 24 mars 2009

Disponible sur Internet le 26 mai 2009

Présenté par Jean-Michel Bony

Résumé

Nous établissons une asymptotique du courant quantique en présence d'un champ magnétique variable de grande intensité. Dans ce calcul, nous utilisons une identité de commutateur pour l'opérateur Courant qui nous conduit à l'estimation de la somme des valeurs propres négatives d'un opérateur de Pauli modifié. ***Pour citer cet article : S. Negra, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 347 (2009).***

Abstract

Semiclassical estimate of the quantum current in the presence of a strong non-homogeneous magnetic field. We calculate an asymptotic expression of the quantum current in the presence of a strong non-constant magnetic field. Thanks to a commutator identity for the current operator, we are led to estimate the sum of negative eigenvalues of a modified Pauli operator. ***To cite this article: S. Negra, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 347 (2009).***

Abridged English version

Let us consider a single electron submitted to a non-homogeneous magnetic field $\vec{B}_0 : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$ (of intensity $\beta B_0 > 0$) and to an external electric potential $V : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$ which satisfy

$$V \in L^{\frac{3}{2}}\big(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}\big) \cap L^{\frac{5}{2}}\big(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}\big), \qquad \nabla V \in W^{2,2}_{\ell oc}\big(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3\big). \tag{1}$$

The presence of an applied magnetic field induces an electric quantum current in the system. The magnetic field is generated by a magnetic potential $\vec{A}_0$. In this Note we study the current of an electron in a strong non-homogeneous magnetic field. We suppose that the dynamics of an electron is governed by the Pauli operator $\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V)$:

$$\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V) = \big(-ih\nabla + \beta\vec{A}_0(x)\big)^2 \otimes I_{\mathbb{C}^2} + \beta h\vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0(x) + V(x) \otimes I_{\mathbb{C}^2}, \tag{2}$$

Adresse e-mail : Sourour.Negra@math.u-psud.fr.

1631-073X/$ – see front matter
doi:10.1016/j.crma.2009.04.007

acting in $L^2(\mathbb{R}^3;\mathbb{C}^2)$. Here $\vec{\sigma}=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$ is the vector of Pauli matrices:

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\qquad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.$$

$\vec{B}_0$ is a non-homogeneous magnetic field which satisfies

$$\vec{B}_0\in \mathrm{C}^2\big(\mathbb{R}^3;\mathbb{R}^3\big)\cap L^\infty\big(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^3\big),\qquad \inf_{x\in\mathbb{R}^3}\big\|\vec{B}_0(x)\big\|_{\mathbb{R}^3}>0\quad \forall x\in\mathbb{R}^3, \tag{3}$$

where $\vec{A}_0$ is a magnetic potential such that curl $A_0=B_0$ expressed in the coulomb gauge.

The operator $\mathcal{H}(h,\beta\vec{B}_0,V)$ depends on two parameters $h,\beta\in\mathbb{R}_+$, where h is a semi-classical parameter, which will tend to zero. We are interested in the total current $\vec{j}_{h,\beta}$, which is defined (as the distribution) by

$$\vec{a}\mapsto\int_{\mathbb{R}^3}\vec{j}_{h,\beta}(x)\cdot\vec{a}(x)\,\mathrm{d}x\equiv \mathrm{tr}\big[\vec{\mathrm{J}}_{h,\beta}(\vec{a})\mathbb{1}_{]-\infty,0[}\big(\mathcal{H}(h,\beta\vec{B}_0,V)\big)\big], \tag{4}$$

where

$$\mathbb{1}_{]-\infty,0[}\big(\mathcal{H}(h,\beta\vec{B}_0,V)\big)$$

is the spectral projection on the negative eigenspace of the operator $\mathcal{H}(h,\beta\vec{B}_0,V)$ and

$$\vec{\mathrm{J}}_{h,\beta}(\vec{a})=\big(\vec{a}\cdot(-ih\nabla+\beta\vec{A}_0)+(-ih\nabla+\beta\vec{A}_0)\cdot\vec{a}\big)\otimes I_{\mathbb{C}^2}+h\vec{\sigma}\cdot\vec{b} \tag{5}$$

with $\vec{b}=\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{a}$.

Let us introduce the semi-classical limiting energy (independent of h)

$$\forall\mu\in\mathbb{R}_+,\quad E_\mu(\vec{B}_0,V):=-\int_{\mathbb{R}^3}P\big(\mu B_0(u),\big[V(u)\big]_-\big)\,\mathrm{d}u. \tag{6}$$

Here the function $P(b,w)$ is defined for all $(b,w)\in\mathbb{R}_+\times\mathbb{R}_+$, as follows:

$$P(b,w)=\frac{b}{3\pi^2}\left(w^{3/2}+2\sum_{\nu=1}^{\infty}[2\nu b-w]_-^{3/2}\right), \tag{7}$$

$$\text{with}\quad [x]_-=-x\quad \text{if } x\leqslant 0\quad\text{and}\quad [x]_-=0\quad\text{otherwise.}$$

The electric current, in the direction of a given vector field $\vec{a}\in \mathrm{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3;\mathbb{R}^3)$, can be defined as the corresponding directional derivative of the energy (for example introduced in (10)) with respect to the potential $\vec{A}_0$. This is expressed formally in the following way:

$$\mathrm{C}_0^\infty\big(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^3\big)\ni\vec{a}\to\int_{\mathbb{R}^3}\vec{j}(x)\cdot\vec{a}(x)\,\mathrm{d}x=\frac{\mathrm{d}E_Q(h,\vec{A}+t\vec{a},V)}{\mathrm{d}t}\bigg|_{t=0}. \tag{8}$$

Actually, we would expect that the semi-classical behavior of the current is given by the derivative of the semi-classical energy with respect to the magnetic field $\vec{B}_0$. This is indeed the main result of this Note:

Theorem 1. *Assume that the magnetic field $\vec{B}_0$ and the scalar potential V satisfy hypotheses* (3) *and* (1) *below. Let $\vec{a}\in\mathrm{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3,\mathbb{R}^3)$ be such that $\vec{B}_0\cdot\vec{a}=0$. Suppose further more that there exists $\mu>0$ such that*

$$\lim_{h\to 0}h\beta(h)=\mu.$$

Then

$$\lim_{h\to 0}h^2\int_{\mathbb{R}^3}\vec{j}_{h,\beta}(x)\cdot\vec{a}(x)\,\mathrm{d}x=\mu^{-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}E_\mu(\vec{B}_0+s\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{a},V)|_{s=0}. \tag{9}$$

1. Énergie semi-classique

La somme des valeurs propres négatives représente l'énergie quantique $E_Q(h, \beta\vec{B}_0, V)$ du gaz d'électrons dans un potentiel électrique V et un potentiel magnétique $\vec{A}_0$:

$$E_Q(h, \beta\vec{B}_0, V) = \operatorname{tr}\big[\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V)\mathbb{1}_{]-\infty,0[}\big(\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V)\big)\big]. \tag{10}$$

De plus, dans [2, théorème 4.1] pour le cas du champ magnétique non constant, les auteurs ont prouvé une formule semi-classique généralisée qui dépend du champ magnétique et notée $E_{scl}(h, \beta\vec{B}_0, V)$. L'énergie semi-classique est définie par

$$E_{scl}(h, \beta\vec{B}_0, V) := -h^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} P\big(h\beta\big\|\vec{B}_0(x)\big\|_{\mathbb{R}^3}, \big[V(x)\big]_-\big)\,\mathrm{d}x, \tag{11}$$

où, pour $(b, w) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}_+$, la fonction $P(b, w)$ a été définie en (7).

2. Formule du commutateur

Afin de calculer le courant total $\vec{j}_{h,\beta}(\vec{a})$, restreint aux $\vec{a}$ tels que $\vec{a} \cdot \vec{B}_0 = 0$, nous décomposons l'opérateur courant $\vec{\mathrm{J}}_{h,\beta}(\vec{a})$ en la somme d'un commutateur avec $\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V)$ dont la trace est nulle et d'un opérateur dont la trace est plus simple à calculer.

Considérons le champ de vecteurs $\vec{\tilde{a}} = \frac{\vec{B}_0 \times \vec{a}}{\|\vec{B}_0\|^2}$, alors pour tout ψ dans $\mathrm{C}_0^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$, nous avons

$$\begin{aligned}\big[\mathcal{H}, \mathrm{J}^p_{h,\beta}(\vec{\tilde{a}})\big]\psi = {} & -2ih\beta\big(\mathrm{J}^p_{h,\beta}(\vec{a})\big)\psi - 2ih\big(\vec{P}_{h,\beta A_0} \cdot \big(D\vec{\tilde{a}} + (D\vec{\tilde{a}})^t\big)\vec{P}_{h,\beta A_0}\big)\psi \\ & - ih^3\big(\Delta\big(\mathrm{div}(\vec{\tilde{a}})\big)\big)\psi + 2ih^2\beta\big(\big((D\vec{B}_0)\vec{\tilde{a}}\big) \cdot \vec{\sigma}\big)\psi + 2ih(\vec{\tilde{a}} \cdot \nabla V)\psi.\end{aligned} \tag{12}$$

Ici, nous avons noté

$$\mathrm{J}^p_{h,\beta}(\vec{a}) = \vec{a} \cdot \vec{P}_{h,\beta A_0} + \vec{P}_{h,\beta A_0} \cdot \vec{a}.$$

En utilisant le fait que pour toute ψ fonction propre de l'opérateur $\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V)$,

$$\big\langle\psi; \big[\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V), \mathrm{J}^p_{h,\beta}(\vec{a})\big]\psi\big\rangle_{L^2(\mathbb{R}^3,\mathbb{C}^2)} = 0$$

pour réécrire (12) :

$$\begin{aligned}\big\langle\psi; \vec{\mathrm{J}}_{h,\beta}(\beta\vec{a})\psi\big\rangle = {} & \big\langle\psi; \big[\big(-\vec{P}_{h,\beta A_0} \cdot \big(D\vec{\tilde{a}} + (D\vec{\tilde{a}})^t\big)\vec{P}_{h,\beta A_0}\big) + h\beta\vec{\sigma} \cdot \big((D\vec{B}_0)\vec{\tilde{a}} + \vec{b}\big)\big]\psi\big\rangle \\ & - \left\langle\psi; \left[\frac{1}{2}h^2\Delta(\mathrm{div}\,\vec{\tilde{a}}) - \vec{\tilde{a}} \cdot \nabla V\right]\psi\right\rangle.\end{aligned} \tag{13}$$

En sommant (13) pour une base orthonormée de vecteurs propres associés aux valeurs propres négatives de l'opérateur $\mathcal{H}(h, \beta\vec{B}_0, V)$, on obtient :

$$\begin{aligned}& \beta\int_{\mathbb{R}^3} \vec{j}_{h,\beta}(x) \cdot \vec{a}(x)\,\mathrm{d}x \\ & \quad = \operatorname{tr}\big[\big(-\vec{P}_{h,\beta A_0}\big(D\vec{\tilde{a}} + (D\vec{\tilde{a}})^t\big)\vec{P}_{h,\beta A_0} + h\beta\vec{\sigma} \cdot \big((D\vec{B}_0)\vec{\tilde{a}} + \vec{b}\big)\big)\mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(h, \beta B_0, V)\big)\big] \\ & \qquad + \operatorname{tr}\left[\left(\frac{-1}{2}h^2\Delta(\mathrm{div}\,\vec{\tilde{a}}) + \vec{\tilde{a}} \cdot \nabla V\right)\mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(h, \beta B_0, V)\big)\right].\end{aligned} \tag{14}$$

3. Somme des valeurs propres négatives de l'opérateur de Pauli modifié

Pour calculer la première trace dans (14), nous construisons un opérateur de Pauli modifié $\mathcal{H}(t)$, défini pour $t \in]-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[$ par,

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}(0) + t\big[\big(-\vec{P}_{h,\beta A_0}\big(D\vec{\tilde{a}} + (D\vec{\tilde{a}})^t\big)\vec{P}_{h,\beta A_0} + h\beta\vec{\sigma}\cdot\big((D\vec{B}_0)\vec{\tilde{a}} + \vec{b}\big)\big)\big], \tag{15}$$

où $\mathcal{H}(0) = \mathcal{H}(h, \beta B_0, V)$. L'avantage de cet opérateur est qu'on peut estimer la somme de ses valeurs propres négatives $\sum_n \lambda_j(\mathcal{H}_t)$ (l'énergie quantique pour l'opérateur de Pauli modifié)

$$E_Q(t) = \operatorname{tr}\big[\mathcal{H}(t)\mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(t)\big)\big] \tag{16}$$

à l'aide d'une approche variationnelle utilisée par Lieb–Solovej–Yngvason [2] pour le champ magnétique constant et par Erdös–Solovej [1] pour le champ variable.

Sous l'hypothèse que $\beta = \beta(h)$ est une fonction qui vérifie $\lim_{h\to 0} h\beta(h) = \mu$ avec $\mu > 0$, Erdös–Solovej [1] ont démontré pour l'opérateur non-modifié (i.e. lorsque $t = 0$) :

$$\lim_{h\to 0}\big[h^3 E_Q(0)\big] = E_\mu(\vec{B}_0, V), \tag{17}$$

où $E_\mu(\vec{B}_0, V)$ a été défini dans (6). Plus précisement, $E_\mu(\vec{B}_0, V) = E_{\mu,t}(\vec{B}_0, V)|_{t=0}$, où la fonction $E_{\mu,t}(\vec{B}_0, V)|_{t=0}$ est définie pour $t \in]-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[$ et $\mu > 0$ par

$$\begin{aligned} E_{\mu,t}(\vec{B}_0, V) = &\int_{\mathbb{R}^3} \Lambda_t^{-1}(u)P_1\big(\mu\vec{B}_{0,t}(u), \mu\vec{B}_{0,t}(u) - V(u) - \mu\Delta_t(u)\big)\,\mathrm{d}u \\ &- \int_{\mathbb{R}^3} \Lambda_t^{-1}(u)P_0\big(\mu\vec{B}_{0,t}(u), -\mu\vec{B}_{0,t}(u) - V(u) + \mu\Delta_t(u)\big)\,\mathrm{d}u. \end{aligned} \tag{18}$$

Ici, pour un entier $k \in \mathbb{N}$, la fonction P_k est définie par

$$\mathbb{R}^2 \ni (b, w) \mapsto P_k(b, w) := \frac{1}{3\pi^2}\sum_{\nu=k}^{\infty} b[2\nu b - w]_-^{3/2}.$$

Les autres quantités qui interviennent en (18) sont définies à l'aide de la matrice $N_t(u) = \sqrt{I - t(D\vec{\tilde{a}} + (D\vec{\tilde{a}})^t)(u)}$ $(u \in \mathbb{R}^3)$:

$$\begin{aligned} &\Lambda_t(u) = \big|\mathrm{d\acute{e}t}\big(N_t(u)\big)\big|, \qquad \vec{B}_{0,t}(u) = \overrightarrow{\mathrm{rot}}\big(N_t(u)\vec{A}_0\big(N_t(u)x\big)\big), \\ &\Delta_t(u) = \big|\vec{B}_0(u) + t\big(\vec{b}(u) + \big(D\vec{B}_0(u)\big)\vec{\tilde{a}}(u)\big)\big|. \end{aligned}$$

En s'inspirant de la démonstration de (17) dans [1], nous démontrons que, pour tout $t \in]-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}[$,

$$\liminf_{h\to 0}\big(h^3 E_Q(t)\big) \geqslant E_{\mu,t}(\vec{B}_0, V). \tag{19}$$

Par ailleurs, un principe variationnel (cf. [3]) nous permet d'écrire :

$$E_Q(t) \leqslant \operatorname{tr}\big[\mathcal{H}(t)\mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(0)\big)\big]. \tag{20}$$

Maintenant, la combinaison de (15)–(16) et (19)–(20) nous permet de déduire

$$\begin{aligned} &\liminf_{h\to 0}\big(th^3 \operatorname{tr}\big[\big(-\vec{P}_{h,\beta A_0}\big(D\vec{\tilde{a}} + (D\vec{\tilde{a}})^t\big)\vec{P}_{h,\beta A_0} + h\beta\sigma\cdot\big(\big(D\vec{B}_0(x)\big)\vec{\tilde{a}}(x) + \vec{b}(x)\big)\big)\mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(0)\big)\big]\big) \\ &\quad \geqslant E_{\mu,t}(\vec{B}_0, V) - E_\mu(\vec{B}_0, V). \end{aligned} \tag{21}$$

En séparant les cas $t > 0$, $t < 0$, et en faisant tendre t vers 0, nous obtenons

$$\begin{aligned} &\lim_{h\to 0}\big(h^3 \operatorname{tr}\big[\big(\vec{P}_{h,\beta A_0}\big(D\vec{\tilde{a}} + (D\vec{\tilde{a}})^t\big)\vec{P}_{h,\beta A_0} + h\beta\sigma\cdot\big(\big(D\vec{B}_0(x)\big)\vec{\tilde{a}}(x) + \vec{b}(x)\big)\big)\mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(0)\big)\big]\big) \\ &\quad = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E_{\mu,t}(\vec{B}_0, V)|_{t=0}. \end{aligned} \tag{22}$$

Il résulte aussi du principe variationnel et du développement asymptotique obtenu dans (17), la formule suivante valide pour toute $\phi \in L^{3/2}(\mathbb{R}^3) \cap L^{5/2}(\mathbb{R}^3)$,

$$\lim_{h\to 0} h^3\big(\mathrm{tr}\big[\phi \mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(h,\beta B_0,V)\big)\big]\big) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} E_\mu(\vec{B}_0, V + s\phi)|_{s=0}. \tag{23}$$

Lorsqu'on applique la formule (23) avec le choix particulier de $\phi = \frac{-1}{2}h^2\Delta(\mathrm{div}\,\vec{\tilde{a}}) + \vec{\tilde{a}}\cdot\nabla V$, on peut calculer la deuxième trace dans (14) :

$$\lim_{h\to 0} h^3\,\mathrm{tr}\bigg[\bigg(\frac{-1}{2}h^2\Delta(\mathrm{div}\,\vec{\tilde{a}}) + \vec{\tilde{a}}\cdot\nabla V\bigg)\mathbb{1}_{]-\infty,0]}\big(\mathcal{H}(h,\beta B_0,V)\big)\bigg] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} E_\mu\big(\vec{B}_0, V + s(\vec{\tilde{a}}\cdot\nabla V)\big)\big|_{s=0}. \tag{24}$$

4. Un développement asymptotique du courant

La combinaison de (14), (22) et de (24) nous donne :

$$\lim_{h\to 0} h^2 \int_{\mathbb{R}^3} \vec{j}_{h,\beta}(x)\cdot\vec{a}(x)\,\mathrm{d}x = \mathcal{J}(\mu), \tag{25}$$

où

$$\mathcal{J}(\mu) = \mu^{-1}\bigg[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E_{\mu,t}(\vec{B}_0, V)|_{t=0} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}E_\mu\big(\vec{B}_0, V + s(\vec{\tilde{a}}\cdot\nabla V)\big)\big|_{s=0}\bigg]. \tag{26}$$

Après un calcul explicite des dérivées, nous obtenons

$$\mathcal{J}(\mu) = \mu^{-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}E_\mu(\vec{B}_0 + s\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{a}, V)|_{s=0}. \tag{27}$$

Remerciements

Je remercie chaleureusement S. Fournais pour m'avoir proposé ce problème. Je suis profondément reconnaissante à B. Helffer pour son attention constante et ses précieuses suggestions.

Références

[1] L. Erdös, J.P. Solovej, Semiclassical eigenvalue estimates for Pauli operator with strong non-homogeneous magnetic fields. II. Leading order asymptotic estimates, Comm. Math. Phys. 188 (1997) 599–656.

[2] E.H. Lieb, J.P. Solovej, J. Yngvason, Asymptotics of heavy atoms in high magnetic fields. II. Semiclassical regions, Comm. Math. Phys. 161 (1994) 77–124.

[3] E.H. Lieb, A variational principle for many-fermion systems, Phys. Rev. Lett. 46 (1981) 457–459;
E.H. Lieb, Erratum, Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 69.