

ÉCOLE DOCTORALE

Laboratoire de Physique et Chimie Théorique (LPCT)

S/c

Unité de Recherche de Matière Condensée, d'Electronique et de Traitement du Signa (URMACETS)

Propriétés du polaron dans un cristal polaire 3D sousmis à un champ magnétique : Approche des intégrales de chemin de Feyman

> FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES

Présenté par: Kemlekeu-Djoutchet Gabin

Encadreur: **Prof Lucong Corneluis Fai** Université de Dschang _____

ANNEE ACADEMIQUE 2022 / 2023

Co encadreur Pr Jaures Tchinda Diffo Université de Maroua

PLAN DE TRAVAIL

MOTIVATION

MODEL ET RÉSULTAT ANALYTIQUE

RESULTATS NUMÉRIQUES





MOTIVATION



Fig 1: Vue d'artiste d'un polaron [J.T. Devreese et F. Peeters]

INTRODUCTIO

Ν

Fig 2: Diagramme de phase qualitatif du modèle de Fr¨ohlich [Fabian Grusdt et Eugene Demler]

Trois régime de couplage

Dans le régime de couplage faible. $(\alpha \prec 1)$

CONTEXTE ET

PROBLEMATIQ

UE

Dans le régime de couplage fort. $(\alpha > 7)$

CONCLUSION

RESULTATS

NUMÉRIQUE

```
Dans le régime couplage intermédiaire (1 \le \alpha \le 7)
```

RESULTATS ANALYTIQUE

MODEL ET RÉSULTAT ANALYTIQUE

Le lagrangien d'un électron accompagné d'une distorsion du réseau et soumis a un champs magnétique externe orienté suivant l'axe des z s'écrit:

$$L(i\hbar\tau) = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 + \frac{ie}{\hbar c} \left(\frac{dr_i}{d\tau}A_i\right) - \sum_{k_j} \left(\frac{\dot{q}_{v_{\vec{k}j}}^2}{\hbar^2} + \omega_{v_{\vec{k}j}}^2 q_{\vec{k}j}^2\right) + \sum_{k_j} \gamma_{\vec{k}j} \left(r(\tau)\right) q_{\vec{v}_{kj}}(\tau) \qquad (1)$$

L'amplitude du couplage interaction électron-phonon

$$\int \sum_{k_j}^{\infty} k_j \left(\tau\right) = \left| V_{v_{kj}} \right| \sqrt{\frac{2}{V}} \begin{cases} \sin\left(k_j, r\right), & k_x = 0\\ \cos\left(k_j, r\right), & k_x < 0 \end{cases}$$
(2)

(3)

L'action modèle construit a basse du lagrangien (1) s'écrit

Nous trouvons la fonction de partition de l'action qui imite le système réel.

$$Z_0(H) = Z_0(0) \exp\left\{-\left(\beta\hbar\omega_c\right)^2 \left[\frac{u_2}{2\beta\hbar\nu}\left(\frac{u_2}{4}+u_1\right)F_\nu(0)-2Z_\nu\left(\frac{u_2}{4}\right)^2+\frac{2}{\varpi}\left(\frac{u_1}{4}\right)^2\right]\right\}$$
(4)



MODEL ET RÉSULTAT ANALYTIQUE

Pour déterminer la masse et energie du polaron nous utilisons l'inégalité de Feynman:

CONTEXTE ET

PROBLEMATIQ

UE

$$E \le E_F = -\frac{1}{\beta} \ln \left(Z_0 \right) - \frac{1}{\beta} \left\langle S - S_0 \right\rangle_{S_0}$$

(5)

5

CONCLUSION

$$E_{p} = \frac{u_{2}}{2\nu} \left(\frac{u_{2}}{4} + u_{1} \right) \hbar \omega_{c}^{2} - \frac{\hbar}{2} \left(3\omega_{f} - \nu \right) - M \omega_{f}^{2} \left(\sum_{i=2}^{4} \frac{\hbar \ell_{i}}{2m_{i} \upsilon_{i}} + \frac{\hbar a_{2}}{4m\nu} \right) - \frac{\hbar M \omega_{f} C_{1}^{2}}{2m} - \frac{\hbar M \omega_{f} u_{1}}{4m} + \frac{\hbar u_{2}}{4m\nu} \frac{M \omega_{f}^{3}}{\omega_{f} + \nu} + \sum_{i=2}^{4} \frac{\hbar \ell_{i}}{2m_{i} \upsilon_{i}} \frac{M \omega_{f}^{3}}{\left(\omega_{f} + \upsilon_{i}\right)} - \frac{\alpha_{F}}{16\pi} \left(\frac{\hbar^{5} R_{F}^{5} \omega_{0}^{3}}{m} \right)^{1/2} \int_{0}^{+\infty} d\tau \exp\left\{ -\hbar \omega_{0} \tau \right\} \sqrt{\frac{\pi}{A_{1z}(\tau)}} g\left(\frac{A_{1xy}(\tau)}{A_{1z}(\tau)} \right) \quad (6)$$

$$\frac{m_{p}}{m} = \exp\left\{\frac{2M}{3m}\left(C_{1}^{2} + \frac{u_{1}}{2}\right) + \frac{\alpha_{F}}{48\pi^{2}}\left(\frac{\hbar^{7}R_{F}^{5}\omega_{0}^{3}}{m^{3}}\right)^{1/2}\int_{0}^{\infty} d\tau \frac{1}{\sqrt[3]{A_{z}}}\left[u_{1}\pi^{2}p\left(\frac{A_{1xy}(\tau)}{A_{1z}(\tau)}\right) + C_{1}^{2}\sqrt[3]{\pi}f\left(\frac{A_{1xy}(\tau)}{A_{1z}(\tau)}\right)\right]\exp\left(-\hbar\omega_{0}\tau\right)\right\}(7)$$

RESULTATS

ANALYTIQUE

Avec

INTRODUCTIO

Ν

$$A_{1z}(\tau) = \frac{\hbar^2 u_1 \tau}{2m} + \frac{\hbar u_2}{2m\nu} \left[1 - \exp(-\hbar\nu\tau) \right] ; A_{1xy}(\tau) = \frac{\hbar^2 C_1^2 \tau}{2m} + \sum_{i=2}^4 \frac{\hbar \ell_i}{2m_i \nu_i} \left[1 - \exp(-\hbar\nu_i\tau) \right]$$
(8)

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x}} \operatorname{arsh} \sqrt{\frac{1}{x} - 1}, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt[3]{1-x}} \left\{ -\sqrt{1-x} + \operatorname{arsh} \sqrt{\frac{1}{x} - 1} \right\}, \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt[3]{1-x}} \left\{ \frac{1}{x} \sqrt{1-x} - \operatorname{arsh} \sqrt{\frac{1}{x} - 1} \right\} (9)$$

RESULTATS

NUMÉRIQUE

MODEL ET RÉSULTAT ANALYTIQUE

Utilisant l'approche fonction mémoire, le tenseur conductivité et mobilié sont déterminé

$$\sigma(\omega) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(\omega) & -\sigma_{xy}(\omega) & 0\\ \sigma_{xy}(\omega) & \sigma_{xx}(\omega) & 0\\ 0 & 0 & \sigma_{zz}(\omega) \end{pmatrix} \qquad \qquad \mu = \begin{pmatrix} \mu_{xx} & -\mu_{yx} & 0\\ \mu_{xy} & \mu_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \mu_{zz} \end{pmatrix} \qquad \qquad \sigma_{xx}(\omega) = \frac{ie^2\omega}{m} \frac{\omega^2 + \chi(\omega)}{(\omega^2 + \chi(\omega))^2 - \omega_c^2 \omega^2}$$
(10)
$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{ie^2\omega}{m} \frac{\omega^2 + \chi(\omega)}{(\omega^2 + \chi(\omega))^2 - \omega_c^2 \omega^2}$$
(11)

Fonction mémoire,

$$\chi(\omega) = -\alpha_F \pi^2 \sqrt{\pi} R_F^{5/2} \int_0^{+\infty} dt \left[\exp\left\{i\omega t\right\} - 1 \right] \operatorname{Im} \left\{ F_{\omega_0}^*\left(t\right) \left(\frac{\pi}{D_z\left(t\right)}\right)^{3/2} f\left(\frac{D_{xy}\left(t\right)}{D_z\left(t\right)}\right) \right\}$$
(12)

RESULTATS

NUMÉRIQUE

 $\omega \omega$

(10)

CONCLUSION

Le rayon du polaron est estimée comme

INTRODUCTIO

Ν

CONTEXTE ET

PROBLEMATIQ

UE

$$R_{p}^{2} = \langle \left(\vec{r} - R \right)^{2} \rangle_{S_{0}} = R_{//}^{2} + R_{\perp}^{2} \quad (13)$$

RESULTATS

ANALYTIQUE

$$R_{\perp}^{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{cases} \frac{C_{2}^{2}(v_{2})}{v_{2}} F_{v_{2}}(0) \left[\left(1 - F_{2}(v_{2})\right)^{2} + 2F_{2}^{2}(v_{2}) + F_{2}^{2}(v_{2})J_{2}(v_{2}) \left(-2 + J_{2}(v_{2}) + J_{2}(v_{2})K_{2}^{2}(v_{2}) - 2K_{2}(v_{2})\right) \right] \\ + \frac{C_{3}^{2}(v_{3})}{v_{3}} F_{v_{3}}(0) \left[\left(1 - F_{3}(v_{3})J_{3}(v_{3})\right)^{2} + F_{3}^{2}(v_{3}) \left(1 - 2J_{3}(v_{3}) + 2J_{3}^{2}(v_{3}) + J_{3}^{2}(v_{3})K_{3}^{2}(v_{3}) - 2J_{3}^{2}(v_{3})K_{3}(v_{3})\right) \right] \\ - \frac{C_{4}^{4}(v_{4})}{v_{4}} F_{v_{4}}(0) \left[\left(1 - F_{4}(v_{4})J_{4}(v_{4})K_{4}(v_{4})\right)^{2} + F_{4}^{2}(v_{4}) \left(1 + J_{4}^{2}(v_{4}) + 2J_{4}^{2}(v_{4})K_{4}^{2}(v_{4}) - 2F_{4}^{2}(v_{4})J_{4}(v_{4})K_{4}(v_{4}) - 2F_{4}(v_{4})J_{4}^{2}(v_{4}) \right] \\ - \frac{F_{4}^{2}(v_{4})}{v_{4}} F_{v_{4}}(0) \left[\left(1 - F_{4}(v_{4})J_{4}(v_{4})K_{4}(v_{4})\right)^{2} + F_{4}^{2}(v_{4}) \left(1 + J_{4}^{2}(v_{4}) + 2J_{4}^{2}(v_{4})K_{4}^{2}(v_{4}) - 2F_{4}^{2}(v_{4})J_{4}(v_{4})K_{4}(v_{4}) - 2F_{4}(v_{4})J_{4}^{2}(v_{4}) \right] \right] \\ - \frac{F_{4}^{2}(v_{4})}{v_{4}} F_{v_{4}}(0) \left[\left(1 - F_{4}(v_{4})J_{4}(v_{4})K_{4}(v_{4})\right)^{2} + F_{4}^{2}(v_{4}) \left(1 + J_{4}^{2}(v_{4}) + 2J_{4}^{2}(v_{4})K_{4}^{2}(v_{4}) - 2F_{4}^{2}(v_{4})J_{4}(v_{4})K_{4}(v_{4}) - 2F_{4}^{2}(v_{4})J_{4}^{2}(v_{4}) \right] \right] \\ - \frac{F_{4}^{2}(v_{4})}{v_{4}} F_{v_{4}}(0) \left[\left(1 - F_{4}(v_{4})J_{4}(v_{4})K_{4}(v_{4})\right)^{2} + F_{4}^{2}(v_{4}) \left(1 + J_{4}^{2}(v_{4}) + 2J_{4}^{2}(v_{4})K_{4}^{2}(v_{4}) - 2F_{4}^{2}(v_{4})J_{4}^{2}(v_{4}) \right] \right]$$

RÉSULTAT NUMÉRIQUE





Fig 3: Représentation graphique d'énergie en fonction du couplage électron-phonon.

Fig 4: Graphe de la masse effective du polaron en fonction du couplage électron-phonon



RÉSULTAT NUMÉRIQUE



Fig 5: Représentation graphique de la conductivité du polaron en fonction de la fréquence.

8



CONCLUSION

L'augmentation du champs magnétique contribue au confinement de l'électron dans le cristal polaires. C'est ainsi que le phonon suit l'impureté de manière adiabatique.



La dépendance de l'énergie et la masse du polaron en fonction du couplage sont respectivement les fonctions de la forme $E \sim a \cdot \alpha + b$ et $M \sim c^{\alpha}$ ou a < 0 et c > 1

RESULTATS

ANALYTIQUE



INTRODUCTIO

Ν

CONTEXTE ET

PROBLEMATIQ

UE

Augmentation du champs magnétique diminue la conductivité du matériaux. Pour une fréquence du cyclotron de $6,00\omega_0$ appliqué aux matériaux, le milieux est plus conducteur $\omega < 25\omega_0$ par contre pour $125\omega_0 < \omega < 50\omega_0$ le milieu est plus isolant et enfin pour les pulsations $0\omega_0 < \omega$ celle-ci conserve les même valeurs indépendant du champs magnétique appliqué.

RESULTATS

NUMÉRIQUE

CONCLUSION

MERCI POUR VOTRE ATTENTION