Peierls subtitution

Josep Planelles
Departament de Química Física i Analítica, Universitat Jaume I,
Apartat 224, E-12080 Castelló, Spain

Introducció del camp magnètic

Considerem el terme d'energia cinètica de l'hamilatonià en absència $\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m}$ y presència $\mathcal{H} = \frac{(p+A)^2}{2m}$ de camp magnètic. Anomenem $\{E_n^0, \Phi_n^0\}$ les solucions de $\mathcal{H}_0$ i $\{E_n, \Psi_n\}$ les de $\mathcal{H}$.

Podem escriure $\Psi(\mathbf{r}) = \exp\left[-i\int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(r')d\mathbf{r}'\right]\chi(\mathbf{r})$, amb $\chi(\mathbf{r})$ una funció indeterminada que ens permet escriure la identitat. Anomenem $F(\mathbf{r}) = \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(r')d\mathbf{r}'$, de manera que $\Psi(\mathbf{r}) = \exp\left[-iF(\mathbf{r})\right]\chi(\mathbf{r})$.

Com $dF(\mathbf{r}) = \nabla F \cdot d\mathbf{r} = F(\mathbf{r}+d\mathbf{r}) - F(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$, tenim que $\nabla F = \mathbf{A}$. Per tant,

$$(-i\nabla + A)\exp\left[-iF(\mathbf{r})\right]\chi(\mathbf{r}) = \exp\left[-iF(\mathbf{r})\right](-i\nabla\chi(\mathbf{r}) + A(\mathbf{r})\,\chi(\mathbf{r}) - A(\mathbf{r})\,\chi(\mathbf{r})) = \exp\left[-iF(\mathbf{r})\right](-i\nabla\chi(\mathbf{r}))$$

En conseqüència, $(-i\nabla + A)^2\exp\left[-iF(\mathbf{r})\right]\chi(\mathbf{r}) = \exp\left[-iF(\mathbf{r})\right](-\nabla^2\chi(\mathbf{r}))$ i, per tant,

$$\frac{1}{2m}(-i\nabla + A)^2\exp\left[-iF(\mathbf{r})\right]\chi(\mathbf{r}) = E\exp\left[-iF(\mathbf{r})\right]\chi(\mathbf{r})$$

es tranforma en:

$$-\frac{1}{2m}\nabla^2\chi = E\chi,$$

que és l'equació s'autovalors en absència de camp, i.e., $\chi = \Phi$. Ara be, E és l'energia *en presència de camp* perquè les condicions de contorn BCs *cal aplicar-les* a la funció completa $\Psi(\mathbf{r}) = \exp\left[-iF(\mathbf{r})\right]\Phi(\mathbf{r})$ (són aquestes BCs les que fan que E puga ser diferent de E^0).

La transformació: $\Phi(\mathbf{r}) \to \exp\left[-i\int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(r')d\mathbf{r}'\right]\Phi(\mathbf{r})$ s'anomena substitució de Peierls.

Anàlogament podem trobar una substituió de l'hamiltonià, des de $\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V$ fins $\mathcal{H} = \frac{(p+A)^2}{2m} + V$:

$$\mathcal{H} = \exp\left[-iF\right]\mathcal{H}_0\exp\left[iF\right]$$

En efecte,

$$\nabla(\exp\left[iF\right]\Phi) = \exp\left[iF\right]\nabla\Phi + \Phi\exp\left[iF\right]\nabla F = \exp\left[iF\right]\nabla\Phi + A\exp\left[iF\right]\Phi$$

Per tant, operant, és immediat trobar que:

$$\nabla^2(\exp\left[iF\right]\Phi) = \exp\left[iF\right](\nabla^2\Phi + 2A\nabla\Phi + A^2\Phi) = \exp\left[iF\right](\nabla + A)^2\Phi$$

En conseqüència, comprovem que l'hamiltonià en presència de camp $\mathcal{H} = \left[(\nabla + A)^2 + V\right]$ por ser obtingut per la substitució $\exp\left[-iF\right]\left[\frac{1}{2m}\nabla^2 + V\right]\exp\left[iF(\mathbf{r})\right]$:

$$\exp\left[-iF\right]\left[\frac{1}{2m}\nabla^2 + V\right]\exp\left[iF(\mathbf{r})\right]\Phi = \exp\left[-iF\right]\exp\left[iF\right]\left[(\nabla + A)^2 + V\right]\Phi = \left[(\nabla + A)^2 + V\right]\Phi$$

Example1: quantum ring 1D

$$F(\mathbf{r}) = \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(r')d\mathbf{r}' = \int_0^{\theta} \frac{Ba^2}{2\rho}\rho d\phi = \frac{B\pi a^2}{2\pi}\theta = F\theta$$

$$\Psi(\theta) = e^{-iF\theta}e^{iM\theta}$$

$$E_M = \frac{M^2}{2I}$$

BCs: $\Psi(\theta + 2\pi) = \Psi(\theta) \rightarrow (M - F) = 0 \pm 1 \pm 2...$

No magnetic field: $M = 0 \pm 1 \pm 2... \in \mathcal{Z}$

With field: $M = F, F \pm 1, F \pm 2... \in \mathcal{R}$

$$\vec{A} = A_\phi \vec{u}_\phi = \begin{cases} 0 & 0 < \rho < a \\ \frac{\rho^2 - a^2}{2\rho} B\, \vec{u}_\phi & a < \rho < \infty \end{cases}$$

$$-\frac{1}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$$

$$\Psi = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$$

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}, \quad k_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0, \pm 1 \pm 2...$$

$$E_n = \frac{k_n^2}{2m} = \frac{2\pi^2 n^2}{mL^2}$$

$$\Psi = \exp\left[-i \int_0^x A(x')dx'\right] e^{ikx}$$

BCs: $\Psi(0) = \Psi(L) \rightarrow 1 = e^{-iF} e^{ikL}$,

$$kL - 2\pi F = 2\pi n \quad \rightarrow \quad k = \frac{2\pi}{L}(F + n) \;\; n = 0 \pm 1 \pm 2$$

$$\vec{A}_0 = \begin{cases} \frac{\rho}{2}(B_1 - B_2)\, \vec{u}_\phi & 0 < \rho < a_1 \\ \frac{a_1^2}{2\rho}(B_1 - B_2)\, \vec{u}_\phi & a_1 < \rho < \infty \end{cases}$$

$$\vec{A}_1 = \begin{cases} \frac{\rho}{2} B_2\, \vec{u}_\phi & 0 < \rho < a_2 \\ \frac{a_2^2}{2\rho} B_2\, \vec{u}_\phi & a_2 < \rho < \infty \end{cases}$$

$$\vec{A} = \vec{A}_0 + \vec{A}_1$$

$$E_M = \frac{(M + F)^2}{2I}$$

No magnetic field: $m = 0 \pm 1 \pm 2... \in \mathcal{Z}$