Tema 14a (pat 1)
Hamiltoniana en presència d'un camp magnètic: Nivells de Landau

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

Hamiltoniana Mecanoquàntica

Si triem el gauge simètric, $\nabla A = 0$, aleshores $\hat{p}\hat{A}\Psi = \hat{A}\hat{p}\Psi$, amb el que l'hamiltonià:

$$\hat{H} = \frac{\widehat{p^2}}{2m} - \frac{e}{m}A\hat{p} + \frac{e^2}{2m}A^2. \tag{1}$$

Com que B i no A és qui té sentit físic (els resultats no depenen de la tria d'A, on hi ha una gran arbitrarietat), per a representar un camp axial constant, $\vec{B} = B_0\vec{k}$, triem $A = (-1/2\, y\, B_0, 1/2\, x\, B_0, 0)$[1]. En efecte:

$$\nabla \wedge A = \left| \begin{array}{ccc} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -1/2\, y\, B_0 & 1/2\, x\, B_0 & 0 \end{array} \right] = B_0\, \vec{k} \tag{2}$$

Comprovem que, com era d'esperar,

$$\nabla A = \partial_x(-1/2\, y\, B_0) + \partial_y(1/2\, x\, B_0) + \partial_z(0) = 0. \tag{3}$$

Calculem ara el producte $A\hat{p}$:

$$\left\{ \begin{array}{c} A = (-1/2\, y\, B_0, 1/2\, x\, B_0, 0) \\ p = -i\hbar\nabla \end{array} \right\} \to A\hat{p} = -\frac{1}{2}i\hbar B_0(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = \frac{1}{2}B_0\hat{L}_z. \tag{4}$$

Anàlogament,

$$A^2 = \frac{1}{4}B_0^2(x^2 + y^2) = \frac{1}{4}B_0^2\rho^2. \tag{5}$$

Des de les equacions (1),(4) i (5) podem escriure:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2 + \frac{1}{2}\omega_c\hat{L}_z, \tag{6}$$

on $\omega_c = -\frac{eB}{m}$ és l'anomenada freqüència del ciclotró.

Si definim ara $\omega = \omega_c/2$ podem reescriure l'equació (6) en la forma:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2 + \omega\hat{L}_z. \tag{7}$$

Confinament magnètic bidimensional

Considerem una massa m carregada amb la unitat negativa de càrrega i, per simplificar, utilitzem unitats atòmiques ($\hbar = e = 1$). Reescrivim l'hamiltonià (7) en la forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{B^2}{8m}\rho^2 + \frac{B\hat{L}_z}{2m} \tag{8}$$

on hem omitit el el subíndex 0 en el camp B i hem substituït ω pel seu valor $B/2m$.

[1] També podem derivar aquest mateix camp del vector $A = (-y\, B_0, 0, 0)$, aquest segon vector A resultant a partir del primer mitjançant el gauge $A \to A - \nabla(\frac{x\, y\, B_0}{2})$.

En l'equació d'autovalors d'aquest hamiltonià , $\hat{H}\Psi = E\Psi$, podem separar la coordenada z. En efecte, si escrivim $\Psi(x,y,z) = \psi(x,y)\cdot Z(z)$ és immediat comprovar que:

$$\frac{1}{\psi(x,y)}\left[\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2)+\frac{B^2}{8m}\rho^2+\frac{B\hat{L}_z}{2m}-E\right]\psi(x,y) = \frac{1}{Z(z)}\left[-\frac{1}{2m}\hat{p}_z^2\right]Z(z) = \lambda \tag{9}$$

on λ és una constant.

En la part $\hat{\mathcal{H}}(x,y)$ de l'hamiltonià $\hat{H}(x,y,z)$ que depen de les coordenades (x,y) podem reconèixer dos termes:

$$\hat{H}_{HO}^{2D} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2)+\frac{B^2}{8m}(x^2+y^2) \tag{10}$$

i

$$\hat{H}^{'} = \frac{B\hat{L}_z}{2m}. \tag{11}$$

El primer hamiltonià, $\hat{H}_{HO}^{2D}$ es correspon amb un oscil·lador harmònic bidimensional. El segon és proporcional a la component z del moment angular.

Podem escriure la part $\hat{H}_{HO}^{2D}$ en coordenades cilíndriques:

$$\hat{H}_{HO}^{2D} = -\frac{1}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\hat{L}_z^2}{\rho^2})+\frac{B^2}{8m}\rho^2. \tag{12}$$

on ara $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$.

De seguida ens adonem que l'equació d'autovalors de $\hat{H}_{HO}^{2D}$ separa les variables (ρ i ϕ), cosa que implica la commutació:

$$[\hat{H}_{HO}^{2D}, \hat{H}^{'}] = 0. \tag{13}$$

En conseqüència, l'energia de l'hamiltonià complet $\hat{\mathcal{H}}(x,y)$ serà suma de l'autovalors de $\hat{H}_{HO}^{2D}$ i $\hat{H}^{'}$. L'energia de l'oscil·lador bidimensional es pot escriure:

$$E_{HO}^{2D} = (v^{'}+\frac{1}{2})\,\omega + (v^{"}+\frac{1}{2})\,\omega \tag{14}$$

on $v^{'}$, $v^{"}$ prenen valors $0,1,2,3\ldots$ i, recordem, $\omega = \frac{B}{2m}$.

Hem vist que en aquest oscil·lador L_z és una constant de moviment. Podem expressar, doncs, aquesta mateixa energia implicant el número quàntic M associat amb $\hat{L}_z$. De fet, si ataquem la ressolució de l'equació d'autovalors d'aquest oscil·lador bidimensional en coordenades cilindriques, aleshores, l'energia ve donada per:

$$E_{HO}^{2D} = (2n+|M|+1)\,\omega, \tag{15}$$

on $n = 0,1,2,3\ldots$ i $M = 0,\pm1,\pm2,\pm3\ldots$

L'energia de l'altre hamiltonià és simplement,

$$E^{'} = \frac{B}{2m}M = \omega M, \tag{16}$$

amb la qual cosa l'energia de l'operador complet $\hat{\mathcal{H}}(x,y)$ resulta:

$$E(n,M) = (2n+|M|+M+1)\,\omega. \tag{17}$$

A les distintes energies, que presenten un comportament lineal enfront del camp, se les anomena nivells de Landau. Els estats amb $M \leq 0$ estan infinitament degenerats mentre que la resta presenten degeneració n+M+1. Cal dir que, en general, per a sistemes 3D confinats, el comportament de les energies en front del camp no és lineal sinó quadràtic. L'oscil·lador és un cas molt particular que contempla el terme quadràtic com el seu propi potencial.