

Poziomy Landaua

Klasycznie ruch naładowanej cząstki w stałym polu magnetycznym skierowanym wzdłuż osi z odbywa się po spirali wzdłuż kierunku pola magnetycznego. Kwantowo ruch w kierunku osi z jest swobodny, natomiast ruch w płaszczyźnie $x - y$ jest skwantowany, co prowadzi do dyskretnego spektrum energii – tzw. poziomów Landaua. Celem tego zadania jest obliczenie energii poziomów Landaua ze szczególnym zwróceniem uwagi na ich degenerację. Zadanie to rozwiążemy na trzy różne sposoby.

1. Hamiltonian dla cząstki o ładunku q poruszającej się w polu magnetycznym przyjmuje postać:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2, \quad (1)$$

gdzie q jest ładunkiem cząstki, zaś c prędkością światła. Aby rozwiązać odpowiednie równanie Schrödingera musimy wybrać cechowanie, które prowadzi do pola magnetycznego skierowanego wzdłuż osi z . Pole magnetyczne określone jest wzorem

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

Wykazać, że następujące dwa wybory prowadzą do takiego samego pola \mathbf{B} :

Cechowanie I

$$\mathbf{A} = B \begin{bmatrix} -y \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

czyli

$$A_i = -B r_2 \delta_{i1}.$$

Cechowanie II

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} B \begin{bmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

czyli

$$A_i = B \varepsilon_{i3j} r_j,$$

Rozwiązanie

Pole magnetyczne w cechowaniu (2) jest równe

$$B_i = \varepsilon_{ijk} \nabla_j A_k = \varepsilon_{i21} \nabla_2 A_1 = B \delta_{i3}.$$

Pole magnetyczne w cechowaniu (3) jest równe

$$B_i = \frac{1}{2} B \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{k3l} \nabla_j r_l = \frac{1}{2} B \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{3jk} = B \delta_{i3}.$$

2. Rozwiązać równanie Schrödingera w cechowaniu (2). W tym celu rozpisać równanie na składowe odpowiednio w zmiennych x , y i z . Przyjmując funkcję falową w postaci

$$\psi(x, y, z) = f(y)e^{-ip_x x/\hbar}e^{-ip_z z/\hbar}.$$

problem redukuje się do ruchu swobodnego w kierunku osi z oraz oscylatora harmonicznego w pewnej nowej zmiennej związanej z y o częstości

$$\tilde{\omega} = \frac{qB}{m_e c} = 2\omega$$

Rozwiązanie

Rozpisujemy hamiltonian:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 = \frac{1}{2m_e} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{qB}{c} y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] \\ &= \frac{1}{2m_e} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_z^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_y^2 + \frac{m_e}{2} \left(\frac{qB}{m_e c} \right)^2 y^2 + \frac{qB}{m_e c} y \hat{p}_x.\end{aligned}$$

Podstawiając f. falową podaną w zadaniu otrzymujemy zredukowany hamiltonian w zmiennej y , wyrażony przez wartości własne $p_{x,z}$

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m_e} p_z^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_y^2 + \frac{m_e}{2} \tilde{\omega}^2 y^2 + \tilde{\omega} y p_x + \frac{1}{2m_e} p_x^2 \\ &= \frac{1}{2m_e} p_z^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_y^2 + \frac{m_e}{2} \tilde{\omega}^2 \left(y^2 + 2 \frac{1}{m_e \tilde{\omega}} p_x y + \frac{1}{m_e^2 \tilde{\omega}^2} p_x^2 \right),\end{aligned}$$

gdzie

$$\tilde{\omega} = \frac{qB}{m_e c} = 2\omega$$

Zmieniając zmienne

$$\eta = y + \frac{p_x}{m_e \tilde{\omega}}$$

otrzymujemy

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} p_z^2 + \frac{1}{2m_e} \hat{p}_\eta^2 + \frac{m_e}{2} \tilde{\omega}^2 \eta^2.$$

Jest to hamiltonian oscylatora o częstości $\tilde{\omega}$ (plus ruch swobodny w kierunku z):

$$\begin{aligned}E_{n,p_z} &= \hbar \tilde{\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m_e} \\ &= \hbar \omega (2n + 1) + \frac{p_z^2}{2m_e}.\end{aligned}$$

Zwróćmy uwagę, że poziomy te są nieskończenie razy zdegenerowane ze względu na ciągły parametr p_x .

3. Rozpisać równanie Schrödingera w cechowaniu (3) na składowe w zmiennych x , y i z . Podobnie jak poprzednio będziemy mieli do czynienia z ruchem swobodnym wzdłuż osi z oraz dwoma oscylatorami w zmiennych x i y gdzie rolę potencjału kwadratowego pełnią człony kwadratowe w B . Człony liniowe w B należy potraktować jako zaburzenie.

Najpierw należy rozwiązać problem bez członów liniowych w B . Zbadać degenerację poszczególnych poziomów. Następnie dla kilku najniższych poziomów należy obliczyć poprawkę od części liniowej w B . W tym celu zapisać zaburzenie przy pomocy operatorów kreacji i anihilacji i zastosować zdegenerowany rachunek zaburzeń. Spróbować uogólnić otrzymany wynik na wszystkie poziomy niezaburzone.

Okazuje się, że otrzymuje się dokładny wynik z poprzedniego zadania, co oznacza, że nie ma poprawek od wyższych rzędów rachunku zaburzeń. Dlaczego? Przedyskutować degenerację.

Rozwiązanie

Zajmiemy się tylko ruchem w płaszczyźnie $x - y$

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{1}{2m_e} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{qB}{2c} y \right)^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{qB}{2c} x \right)^2 \right] \\
 &= \frac{1}{2m_e} \left[\left(\hat{p}_x^2 + \left(\frac{qB}{2c} \right)^2 y^2 \right) + \left(\hat{p}_y^2 + \left(\frac{qB}{2c} \right)^2 x^2 \right) \right] + \frac{1}{m_e} \left(\frac{qB}{2c} \right) [\hat{p}_x y - \hat{p}_y x] \\
 &= \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2} \left(\frac{qB}{2cm_e} \right)^2 x^2 \right) + \left(\frac{\hat{p}_y^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2} \left(\frac{qB}{2cm_e} \right)^2 y^2 \right) + \left(\frac{qB}{2cm_e} \right) [\hat{p}_x y - \hat{p}_y x] \\
 &= \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2} \omega^2 x^2 \right) + \left(\frac{\hat{p}_y^2}{2m_e} + \frac{m_e}{2} \omega^2 y^2 \right) + \omega [\hat{p}_x y - \hat{p}_y x] \\
 &= H_0 + H'.
 \end{aligned}$$

Niezaburzony operator H_0 jest sumą dwóch oscylatorów harmonicznycch o częstotliwości ω i ma poziomy

$$E_{n=n_x+n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) = \hbar\omega(n + 1) \quad (4)$$

każdy $n + 1$ razy zdegenerowany. Zauważmy, że dokładny wynik z poprzedniego zadania ma postać

$$\hbar\omega(2n + 1),$$

co oznacza, że pierwsze przybliżenie ma „niechciane” energie dla nieparzystych n .

Wprowadźmy numerowanie zdegenerowanych stanów o energii (4)

$$|1\rangle = |0\rangle_x |n\rangle_y, |2\rangle = |1\rangle_x |n-1\rangle_y, \dots |n\rangle = |n-1\rangle_x |1\rangle_y, |n+1\rangle = |n\rangle_x |0\rangle_y.$$

Ogólnie dla n -tej powłoki stany mają postać $|k\rangle = |k-1\rangle_x |n-k+1\rangle_y$ gdzie $k = 1, 2, \dots, n+1$ oraz $n = 0, 1, 2, \dots$

Mamy

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

czyli

$$H' = \omega [\hat{p}_x y - \hat{p}_y x] \quad (5)$$

$$= \frac{i}{2} \hbar \omega [(\hat{a}_x^\dagger - \hat{a}_x)(\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y) - (\hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_y)(\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x)] \quad (6)$$

$$= \frac{i}{2} \hbar \omega [(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y - \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x \hat{a}_y) - (\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y - \hat{a}_x \hat{a}_y)] \quad (7)$$

$$= i\hbar\omega [\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y - \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger]. \quad (8)$$

Przypomnienie

$$\begin{aligned} \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned}$$

Działamy na stan $|k\rangle = |k-1\rangle_x |n-k+1\rangle_y$ z powłoki E_n :

$$\begin{aligned} H' |k\rangle &= i\hbar\omega [\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_y - \hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger] |k-1\rangle_x |n-k+1\rangle_y \\ &= i\hbar\omega \left[\sqrt{k(n-k+1)} |k\rangle_x |n-k\rangle_y - \sqrt{(k-1)(n-k+2)} |k-2\rangle_x |n-k+2\rangle_y \right] \\ &= i\hbar\omega \left[\sqrt{k(n-k+1)} |k+1\rangle - \sqrt{(k-1)(n-k+2)} |k-1\rangle \right]. \end{aligned}$$

Widzimy, że hamiltonian H' przesuwa stan $|k\rangle$ do stanów sąsiednich. Oznacza to, że k -ta kolumna macierzy H' ma postać

$$\begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ -\sqrt{(k-1)(n-k+2)} \\ 0 \\ \sqrt{k(n-k+1)} \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow \text{wiersz } k$$

Czyli

$$H' = i\hbar\omega \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{n} & & & \\ \sqrt{n} & 0 & -\sqrt{2(n-1)} & & \\ & \sqrt{2(n-1)} & 0 & & \\ & & \sqrt{3(n-2)} & \ddots & -\sqrt{n} \\ & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Zatem H' działając na niezdegenerowany stan podstawowy $n = 0$ o energii $\hbar\omega$ daje zero. Dla pierwszego stanu wzbudzonego $n = 1$ o energii $E_1 = 2\hbar\omega$ hamiltonian H' jest macierzą 2×2

$$H' = i\hbar\omega \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (9)$$

o wartościach własnych $\pm\hbar\omega$. Widzimy zatem, że stan o $n = 1$ rozszczepia się w następujący sposób

$$E_1 = 2\hbar\omega \rightarrow \begin{cases} 3\hbar\omega \\ \hbar\omega \end{cases}.$$

Stan ten znika ze spektrum, dodaje jeden stan o energii stanu podstawowego, czyli podnosi jego degenerację, oraz dorzuca stan do energii $3\hbar\omega$ także podnosząc jego degenerację.

Dla $n = 2$ mamy trzykrotnie zdegenerowany stan o energii $3\hbar\omega$, a hamiltonian H' ma postać

$$H' = i\hbar\omega \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

o wartościach własnych $\lambda = \pm 2\hbar\omega, 0$. Zatem stan ten nie znika ze spektrum, ale rozszczepia się na trzy niezdegenerowane stany

$$E_1 = 3\hbar\omega \rightarrow \begin{cases} 5\hbar\omega \\ 3\hbar\omega \\ \hbar\omega \end{cases}$$

dorzucając jeden stan do stanu podstawowego $n = 0$ i do stanu $n = 4$, i pozostawiając jeden stan $n = 2$.

Zauważmy, że w hamiltonianie ze wzoru (9) występuje macierz Pauliego σ_2 , a we wzorze (10) macierz J_2 dla krętu $j = 1$ (np. podręcznik L. Schiffa, wzór (27.26)). Nie jest to przypadek, gdyż hamiltonian zaburzający (8) ma postać z -towej składowej momentu pędu. Okazuje się, że w bazie stanów własnych H_0 , hamiltonian H' nie jest diagonalny i patrząc na wzory (9) i (10) możemy założyć

$$H' = 2\omega J_2, \quad (11)$$

gdzie $j = 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ (\hbar jest włączone do definicji J_2). Ponieważ stany H_0 są $(n+1)$ -krotnie zdegenerowane, rozmiar macierzy H' wynosi $n+1$. Pamiętając, że przestrzeń stanów o określonej wartości j ma wymiar $2j+1$, otrzymujemy, że dla n -tego poziomu wzbudzonego

$$j = \frac{n}{2}.$$

Po zdiagnozowaniu (11) wartości własne J_2 wynoszą

$$-\hbar j, -\hbar(j-1), \dots, +\hbar(j-1), +\hbar j,$$

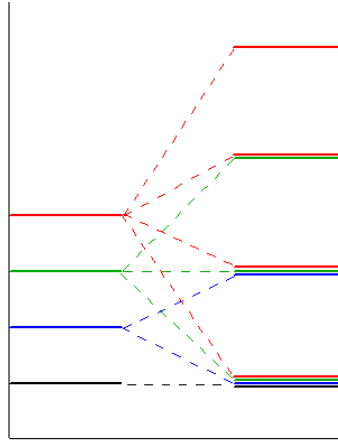
a w konsekwencji wartości własne H' są równe

$$-\hbar\omega n, -\hbar\omega(n-2), \dots, +\hbar\omega(n-2), +\hbar\omega n,$$

Oznacza to, że stany n o energiach $\hbar\omega(n+1)$ rozszczepiają się na stany o energiach

$$\hbar\omega, 3\hbar\omega, \dots, (2n+1)\hbar\omega,$$

przy czym energie te zawierają energię wyjściową (brak przesunięcia) dla n parzystego, natomiast stany o nieparzystych n znikają ze spektrum, co ilustruje rysunek 1.



Rysunek 1: Schematyczna ilustracja rozszczepień poziomów Landaua.

Zauważmy, że operator H' działając na dowolny stan z podprzestrzeni o określonej energii E_n , prowadzi do stanu o tej samej energii. Jest tak, gdyż H' obniża energię jednego oscylatora, a podwyższa energię drugiego. Aby poprawki w wyższych rzędach rachunku zburzeń były niezerowe, H' powinien mieć niezerowe elementy macierzowe do stanów o innych energiach, co nie zachodzi. Stąd pierwsza poprawka daje wynik dokładny.

- Poziomy Landaua w cechowaniu (3) można obliczyć przy pomocy pewnego triku. Rozpisany na składowe hamiltonian (1) w części zależnej od x i y należy zapisać wyciągając stałą

$$\frac{1}{2}\hbar\tilde{\omega}.$$

Definiujemy operatory

$$\hat{\pi}_x = \frac{\hat{p}_x + \frac{1}{2}m_e\tilde{\omega}y}{\sqrt{m_e\hbar\tilde{\omega}}}, \quad \hat{\pi}_y = \frac{\hat{p}_y - \frac{1}{2}m_e\tilde{\omega}x}{\sqrt{m_e\hbar\tilde{\omega}}}$$

Wyrazić przy pomocy tych operatorów hamiltonian (1). Z badać komutator

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y].$$

Okaże się, że reguła komutacji jest taka jak dla p oraz x (z $\hbar = 1$). W związku z tym z operatorów $\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y$ można utworzyć kombinacje liniowe

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y).$$

Wykazać, że operatory te spełniają regułę komutacji operatorów kreacji i anihilacji. Wyrazić hamiltonian przez \hat{a} i \hat{a}^\dagger . Znaleźć spektrum energii. Degenrację tak otrzymanego spektrum przedyskutujemy na zajęciach.

Rozwiązanie

Rozpisujemy hamiltonian

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_e} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{qB}{2c} y \right)^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{qB}{2c} x \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \hbar \tilde{\omega} \left[\frac{(\hat{p}_x + \frac{1}{2} m_e \tilde{\omega} y)^2}{m_e \hbar \tilde{\omega}} + \frac{(\hat{p}_y - \frac{1}{2} m_e \tilde{\omega} x)^2}{m_e \hbar \tilde{\omega}} \right] + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_e} \end{aligned}$$

i zapisujemy go przy pomocy operatorów $\hat{\pi}$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \tilde{\omega} [\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2] + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_e}.$$

Zbadajmy komutator

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = \frac{1}{m_e \hbar \tilde{\omega}} \left\{ -\frac{1}{2} m_e \tilde{\omega} [\hat{p}_x, x] + \frac{1}{2} m_e \tilde{\omega} [y, \hat{p}_y] \right\} = i.$$

Widzimy zatem, że relacja komutacji $[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y]$ przypomina (z dokładnością do \hbar) relację komutacji między położeniem a pędem. Skonstruujmy nowe operatory

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y),$$

których relacja komutacji jest w rzeczywistości relacją komutacji operatorów kreacji i anihilacji:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{i}{2} \{ -[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] + [\hat{\pi}_y, \hat{\pi}_x] \} = 1.$$

Z kolei

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2 + i[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y]) = (\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2 - 1),$$

czyli

$$\frac{1}{2} (\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2) = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}.$$

Zatem

$$\hat{H} = \hbar \tilde{\omega} \left[\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right] + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_e}.$$

Dostajemy stąd, że energia poziomów Landaua

$$E = \hbar \frac{\tilde{\omega}}{2} (2n + 1) + \frac{p_z^2}{2m_e} = \hbar \omega (2n + 1) + \frac{p_z^2}{2m_e}.$$

Zgodnie z naszymi poprzednimi rozważaniami, poziomy Landaua są nieskończenie zdegenerowane. Aby się przekonać, że w cechowaniu (3) mamy także do czynienia z nieskończoną degeneracją, wystarczy zbadać degenerację stanu podstawowego, który spełnia równanie

$$\hat{a} \psi_0(x, y) = 0.$$

Zapiszmy operator anihilacji \hat{a} w reprezentacji położenia:

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2m_e \hbar \tilde{\omega}}} \left\{ \hat{p}_x + \frac{1}{2} m_e \tilde{\omega} y + i \left(\hat{p}_y - \frac{1}{2} m_e \tilde{\omega} x \right) \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m_e \hbar \tilde{\omega}}} \left\{ -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - i \frac{1}{2} m_e \tilde{\omega} (x + iy) \right\}, \end{aligned}$$

co daje równoważne równanie różniczkowe

$$\left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{m_e \tilde{\omega}}{2\hbar} (x + iy) \right\} \psi_0(x, y) = 0. \quad (12)$$

Wielkość $\hbar/m_e \omega$ ma wymiar kwadratu długości i ma sens kwadratu promienia klasycznej orbity elektronu w ruchu w polu magnetycznym \vec{B} . Oznaczmy:

$$r_B^2 = \frac{\hbar}{m_e \tilde{\omega}}.$$

Wprowadźmy nowe zmienne

$$u = x + iy, \quad v = x - iy.$$

Wówczas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial}{\partial v} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

i równanie (12) przyjmuje postać

$$\left(\frac{\partial}{\partial v} + \frac{1}{4r_B^2} u \right) \psi_0(u, v) = 0.$$

Rozwiązanie tego równania jest bardzo proste

$$\psi_0 = f(u) e^{-\frac{uv}{4r_B^2}},$$

gdzie $f(u)$ jest dowolną funkcją spełniającą warunek normalizacji. Zatem rzeczywiście stan podstawowy jest nieskończenie zdegenerowany. Łatwo pokazać, że stany wzbudzone, które otrzymujemy działając wielokrotnie na stan podstawowy operatorem

$$\hat{a}^\dagger = -i \frac{r_B}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{4r_B^2} v \right)$$

zachowują tę degenerację.