Hamiltoniana en presència d'un camp magnètic III: Efecte Aharonov-Bhom fraccionari

JOSEP PLANELLES

Departament de Ciències Experimentals, Universitat Jaume I,

Apartat 224, E-12080 Castelló, Spain

Febrer 2005

Efecte Aharonov-Bhom fraccionari: influència de la repulsió coulòmbica.

L'hamiltonià d'un electró en un anell 1D de radi R, a través del qual hi ha un flux Φ, però de manera que el camp magnètic aplicat siga zero en la regió on s'hi troba l'electró, és un cas particular del que hem estudiat en l'apartat II i s'escriu:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e R^2}\left(\frac{\partial}{\partial\phi} - i\frac{eBa^2}{2\hbar}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e R^2}\left(\frac{\partial}{\partial\phi} + i\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 \qquad (1)$$

on Φ és el flux i $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{|e|}$ l'unitat de flux. En unitats atòmiques, considerant un radi $R = 1$ i anomenant $F = \frac{\Phi}{\Phi_0}$, tenim que[1]:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - 2\ i\ F\frac{\partial}{\partial\phi} + F^2\right) \qquad (2)$$

Les funcions $\Psi_m(\phi) = e^{im\phi}$, $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ en són pròpies i estan associades amb uns valors propis $E_m = \frac{1}{2}(m+F)^2$.
La representació de E_m vs. F ens mostra els canvis periòdics de la simetria "m" de l'estat fonalmental (vegeu figura 1)

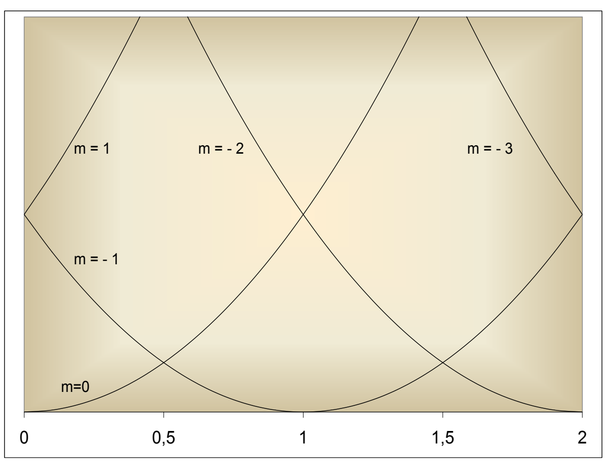

Figure 1: Diagrama qualitatiu del nivels d'energia dels estats d'un electró en un anell 1D en funció del flux.

[1]Notem que $\hat{\mathcal{H}}$ i $(R^2\hat{\mathcal{H}})$ tenen els mateixos autovectors i els seus autovalors són proporcionals.

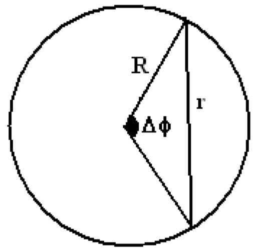

Figure 2: Dos electrons en un anell 1D.

Considerem ara que hi ha dos electrons en l'esmentat anell. Si la diferència d'angles dels dos electrons és $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2$, la distància r que els separa la podem escriure (vegeu Figura 2):

$$r = 2\,R\,|\sin\frac{\Delta\phi}{2}|. \tag{3}$$

L'hamiltonià d'aquest sistema el podem escriure (en a.u):

$$\hat{\mathcal{H}}(1,2) = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\phi_1} + iF\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\phi_2} + iF\right)^2 + \frac{R}{2\,|\sin\frac{\phi_1-\phi_2}{2}|} \tag{4}$$

on, com en l'equació 2, $\hat{\mathcal{H}}$ és, en realitat, l'hamiltonià multiplicat per R^2.

Procedim en primer lloc a obviar el terme coulòmbic i ressoldre el problema de dos electrons independents. Atès que $\hat{\mathcal{H}}(1,2) = \mathcal{H}(1) + \mathcal{H}(2)$, les funcions pròpies i valors pròpis es poden escriure com producte i suma de les solucions monoelectròniques. Així:

$$E(m_1, m_2) = \frac{1}{2}\left[(m_1 + F)^2 + (m_2 + F)^2\right] \tag{5}$$

A l'hora d'escriure les funcions pròpies tindrem cura però d'aplicar el principi de Pauli. Els dos electrons, a banda de les seues variables espacials, presenten variables d'espín i com l'hamiltonià eq. 4 no inclou variables d'espín, la funció d'ona es podrà factoritzar com un producte d'una funció espacial per una funció d'espin. Aquesta darrera podrà anar associada amb $S = 0$ (singulet) i amb $S = 1$ (triplet). La funció singulet, $1/\sqrt{2}(\alpha\beta - \beta\alpha)$, és antisimètrica respecte de l'intercanvi de partícules, mentre que les tres components del triplet, $\left\{\alpha\alpha, 1/\sqrt{2}(\alpha\beta + \beta\alpha), \beta\beta\right\}$, són simètriques. El principi de Pauli obliga doncs a que la part espacial del singulet siga un producte simetritzat de les parts espacials monoelectroniques,

$$\Psi_0(m_1, m_2) = e^{im_1\phi_1} e^{im_2\phi_2} + e^{im_1\phi_2} e^{im_2\phi_1}, \tag{6}$$

mentre que la part espacial del triplet serà antisimètrica:

$$\Psi_1(m_1, m_2) = e^{im_1\phi_1} e^{im_2\phi_2} - e^{im_1\phi_2} e^{im_2\phi_1}. \tag{7}$$

Fixem-nos, eq. 7, que si $m_1 = m_2$ no existeix triplet. Excepte aquesta restricció de doble ocupació d'un orbital amb dos electrons amb el mateix espín, no hi ha altra, de manera que d'existir el triplet ($m_1 \neq m_2$), aquest estarà degenerat amb el singulet associat als mateixos números quàntics (m_1, m_2). La representació de l'energia $E(m_1, m_2)$ vs. F mostra canvis periòdics de l'estat fonamental (vegeu Figura 3) en les mateixes posicions que l'anell amb un electró (vegeu Figura 1). Tanmateix, cal ressaltar que l'estat fonamental sempre va associat a $m_1 = m_2$, és a dir, és singulet, encara que cal dir que per als valors de flux $F = 1/2, 3/2, 5/2, \ldots$ hi ha una múltiple degeneració on s'hi poden trobar triplets. Així, per a $F = 1/2$ els estats $\{(0,0), (-1,0), (-1,-1)\}$ estan degenerats. El primer i el tercer són singulets mentre que el segon pot ser singulet i triplet[2].

Abans de considerar el terme coulòmbic, ressoldrem de cap nou aquest problema però en unes altres coordenades. Definim les coordenades del centre de masses s i del moviment relatiu r:

$$s = \frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) \tag{8}$$

$$r = \frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2) \tag{9}$$

En termes d'aquestes noves coordenades les eqs. 6 i 7 poden ser reescrites en la forma:

$$\Psi_0(M, m) = e^{iMs}\left(e^{imr} + e^{-imr}\right) = e^{iMs} \cos mr \tag{10}$$

[2] Cal aclarir que $(m, 0)$ i $(0, m)$ no representen estats diferents. La seua combinació simètrica és singulet i la seua antisimètrica triplet. En el cas (m, m) sols podem formar la combinació simètrica (singulet).

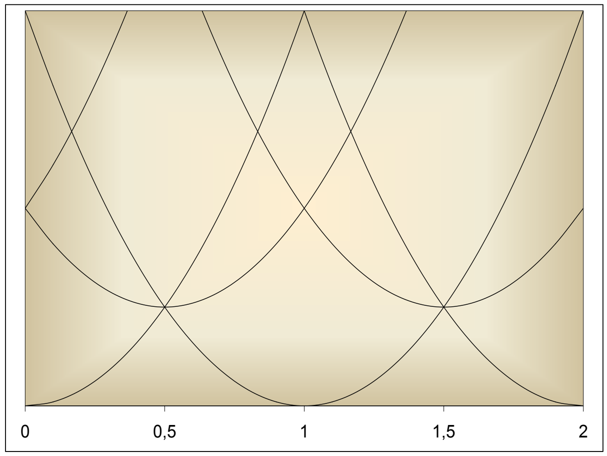

Figure 3: Diagrama qualitatiu del nivels d'energia dels estats de dos electrons independents en un anell 1D vs. el flux magnètic.

$$\Psi_1(M,m) = e^{iMs}\left(e^{imr} - e^{-imr}\right) = e^{iMs}\sin mr \tag{11}$$

on $M = m_1 + m_2$ i $m = m_1 - m_2$. Cosa que comporta $M = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Fixem-nos que $m = 0$ no és admissible per a triplets (vegeu eq. 11). Altres restriccions les discutirem més endavant.

Els dominis de les noves variables r i s, d'acord amb la seua definició, eqs. 8 i 9, són $(0, 2\pi)$ i $(-\pi, \pi)$ respectivament. Tanmateix, en la Figura 4 mostrem el *mapping* entre els dominis dels dos conjunts de variables, que serà crucial per a justificar restriccions sobre els possibles valors conjunts que M i m posen assolir.

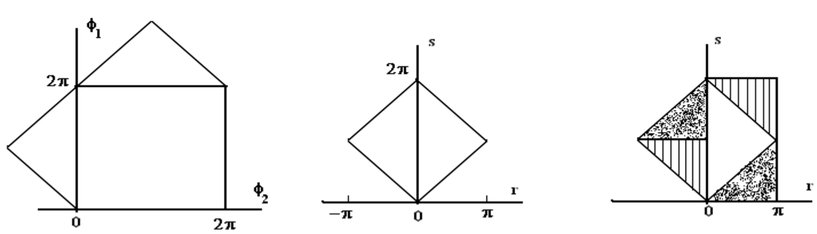

Figure 4: Correspondència entre els dominis de les variables (ϕ_1,ϕ_2) i (r,s).

Si tenim en compte que $M = m_1 + m_2$ i $m = m_1 - m_2$, concloem de seguida que $(M+m)$ i $(M-m)$ han de ser parells, atès que $M+m = 2\,m_1$ i $M-m = 2\,m_2$. Açò introdueix restriccions en les combinacions de funcions. Per exemple, no podem combinar l'estat fonamental del moviment del centre de masses ($M=0$) amb estats del moviment relatiu amb m senar. Aleshores, atès que l'eq. 5 pot ser reescrita en la forma:

$$E(M,m) = \frac{1}{4}\left[(M+2\,F)^2 + m^2\right], \tag{12}$$

i que l'estat fonamental per a un flux F donat s'ha de correspondre amb el valor mínim possible de $|m|$ i $|M+2\,F|$, l'estat fonamental (M,m) per a $F = 0,1,2,\ldots$ unitats de flux serà sempre singulet: (0,0), (-2,0), (-4,0) ... Per a valors $F = 1/2, 3/2, 5/2, \ldots$ hi trobem una triple degeneració on hi apareix un triplet: $\{(0,0),(-2,0),(-1,-1)\}$, $\{(-2,0),(-4,0),(-3,-1)\}$,... (vegeu Fig. 3).

Procedirem ara a retrobar aquest mateix resultat i, en particular, les restriccions entre els valors M, m que es combinen, procedint a efectuar el canvi de variable (eqs. 8, 9) sobre l'hamiltonià $\hat{\mathcal{H}}(1,2)$, eq. 4, el qual es converteix amb aquest canvi en:

$$\hat{\mathcal{H}}(1,2) = -\frac{1}{4}\left(\frac{\partial}{\partial s} + 2\,iF\right)^2 - \frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{R}{2\,|\sin r|} = \hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_r \tag{13}$$

Aquest hamiltonià és de variables separables. Aleshores procedim a trobar les solucions separadament. Considerem primer l'hamiltonià $\hat{\mathcal{H}}_s$. Comprovem que la família de funcions $\left\{e^{iMs}\right\}$ en són pròpies amb un valor propi $E(M) = \frac{1}{4}(M+2\,F)^2$, on M queda fixat per les condicions frontera.

Fem notar que la permutació de partícules deixa inalterada la variable s. En conseqüència les funcions d'ona associades al cdm són simètriques respecte l'intercanvi de partícules.

Considerem ara el moviment relatiu. Considerem en primer lloc el cas de partícules independents (i.e., ometem el terme coulòmbic). En aquestes condicions, la família de funcions $\{e^{imr}\}$ en són pròpies amb un valor propi $E(m) = \frac{1}{4}m^2$, on m ve determinat per les condicions frontera.

Com la variable s és simètrica respecte l'intercanvi de partícules, l'aplicació del principi de Pauli consisteix a extraure la part simètrica (per a singulets) i antisimètrica (per a triplets) de la funció d'ona del moviment relatiu. La degeneració dels parells de funcions $(e^{\pm imr})$ ens permet seleccionar $\sin mr$ i $\cos mr$ associades amb $S = 1$ i $S = 0$, respectivament.

Cal adonar-se, però, que els dominis de les variables r i s no son independents (vegeu Figura 4b) per això les condicions de contorn (de periodicitat) han d'aplicar-se conjuntament a tota la funció d'ona.

Les condicions de periodicitat originals per a les variables ϕ_1 i ϕ_2 són $\phi_1 \equiv \phi_1 + 2\pi$, $\phi_2 \equiv \phi_2 + 2\pi$. Aquestes condicions (linelament independents) dónen lloc en les noves variables a que:

$$(s, r) \equiv (s + \pi, r + \pi) \tag{14}$$

$$(s, r) \equiv (s + \pi, r - \pi) \tag{15}$$

Aquestes condicions es tradueixen en que:

$$e^{i\,M\,s} \begin{cases} \sin mr \\ \cos mr \end{cases} \equiv e^{i\,M\,s} e^{i\,M\,\pi} \begin{cases} \sin m(r \pm \pi) \\ \cos m(r \pm \pi) \end{cases} \tag{16}$$

i.e.

$$1 \begin{cases} \sin mr \\ \cos mr \end{cases} \equiv e^{i\,M\,\pi} \begin{cases} \sin mr \cos m\pi \pm \cos mr \sin m\pi \\ \cos mr \cos m\pi \mp \sin mr \sin m\pi \end{cases} \tag{17}$$

Des de l'eq. 17 concloem que necessàriament $m \in Z$. Incorporant aquest resultat en la mateixa eq. 17 obtenim:

$$1 = e^{i\,M\,\pi} \cos m\pi \qquad \text{amb m} \in \text{Z} \tag{18}$$

Des de l'eq. 18 inferim que $M \in Z$. Sabent que $M, m \in Z$, des de l'eq. 18 concloem que si M és parell/senar aleshores m ha de ser parell/senar.

Considerem ara la inclussió del terme coulòmbic en el moviment relatiu.

$$\hat{\mathcal{H}}_r = -\frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{R}{2\,|\sin r|} \qquad -\pi < r < \pi \tag{19}$$

No hi ha solucions analítiques per a $\hat{\mathcal{H}}_r$ (Tot i que en PRB 68(2003)453241-7 expandeixen el potencial en una sèrie infinita, al remat, energies i funcions s'obtenen numericament).

Tanmateix si el potencial fos inversament proporcional al quadrat de la distància, en lloc de ser-ho a la primera potencia d'aquesta, de manera que

$$\hat{\mathcal{H}}_r = -\frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{4\,\sin^2 r} \tag{20}$$

la seua equació d'autovalors seria:

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2 R_n(r)}{\partial r^2} + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2}\frac{1}{\sin^2 r}R_n(r) = \tilde{E}_n R_n(r) \tag{21}$$

amb $\tilde{E}_n = 2E_n$ i $\alpha(\alpha-1) = 1$. Aquesta equació (veure e.g. PRB 50(1994)6504-7) presenta uns autovalors $\tilde{E}_n = \frac{n^2}{2} + \alpha(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ i autofuncions $\Psi_n(r) = \sin^\alpha r\; C_n^{[\alpha]}(\cos r)$, on $C_n^{[\alpha]}(x)$ són els anomenats polinomis de Gegenbauer.

Cal subratllar que el terme potencial $1/\sin^2 r$ defineix un domini natural $0 < r < \pi$ de manera que $\Psi_n(r=0) = \Psi_n(r=\pi) = 0$ són les condicions naturals de contorn implícites en la ressolució analítica del problema. En aquest interval, les distinties autofuncions, que són totes no degenerades, presenten la adequada seqüenciació nodal.

Cal adonar-se que tot i que hem vist que $-\pi < r < \pi$, el domini de valors per a la variable r va lligat al de la variable s (vegeu Fig. 4). La periodicitat del problema permet canviar l'interval bidimensional on esta definit el problema des del romb original al rectangle definit per les desigualtats (linealment independents) $0 < s < 2\pi$, $0 < r < \pi$ (vegeu Fig. 4c).

Si considerem l'hamiltonià eq. 19 podem, de la mateixa manera, considerar el domini $0 < r < \pi$. Ara l'equació d'autovalors no té solució analítica i requereix una integració numèrica, però les propietats essencials de les solucions (no degeneració i seqüenciació nodal) no canvien. Aleshores podem definir una etiqueta $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ a manera de número quàntic que etiquete funcions i energies E_n, $\Psi_n(r)$.

Sabem que les funcions del cdm, $\left\{e^{i\,M\,s}\right\}$, són simètriques respecte l'intercanvi de partícules. Estudiem ara el comportament de $\Psi_n(r)$:

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}\Psi_n(r) = \Psi_n(-r) \tag{22}$$

Ara be, la condició de periodicitat, eq. 14, permet escriure que:

$$e^{i\,M\,s}\Psi_n(-r) = e^{i\,M\,s}e^{i\,M\,\pi}\Psi_n(\pi - r) \Rightarrow \Psi_n(-r) = (-1)^M\Psi_n(\pi - r), \tag{23}$$

amb la qual cosa,

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}\Psi_n(r) = (-1)^M\Psi_n(\pi - r). \tag{24}$$

La simetria de les funcions vs. $r = \pi/2$ conjuntament amb la seqüenciació nodal permet establir que:

$$\Psi_n(\pi - r) = (-1)^n\Psi_n(r) \tag{25}$$

equació que portada a 24 fa concloure que:

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}\Psi_n(r) = (-1)^{M+n}\Psi_n(r), \tag{26}$$

Aleshores podem afirmar que si $(M + n)$ és parell la funció espacial serà simètrica respecte del intercanvi de partícules i, aleshores, la seua partener d'espín sera antisimètrica (singulet). Contràriament, si $(M + n)$ és senar la funció espacial serà antisimètrica i la corresponent d'espín simètrica (triplet).

Una conseqüència immediata és que a flux zero l'estat $M = 0$ del cdm, que és el de menor energia, es combinarà amb l'estat $n = 0$ (singlet) del moviment relatiu, també de menor energia, per a conformar l'estat fonalmental. Si fem crèixer el flux fins a $F = 1/2$, aleshores, l'estat $M = -1$ del cdm és ara el de menor energia. Aquest es combina amb l'estat $n = 0$ (triplet) del moviment relatiu. Altres dos estats $M = 0$ i $M = -2$ es combinen també amb $n = 0$ (singulets) i tenen energies pròximes però menys estables que aquest triplet. La degeneració que hi havia en absència d'interacció Coulòmbica en la posició $F = 1/2$ es trenca ara en favor del triplet. Conseqüència d'açò és que apareixen mínims a valors fraccionaris del flux que corresponen a estats triplets intercalats entre el mínims a valors enters del flux que corresponen a singulets (i que ja apareixien en absència d'interacció coulòmbica). Aquest resultat es coneix com Efecte Aharonov-Bhom fraccionari i ve mostrat en la Figura 5.

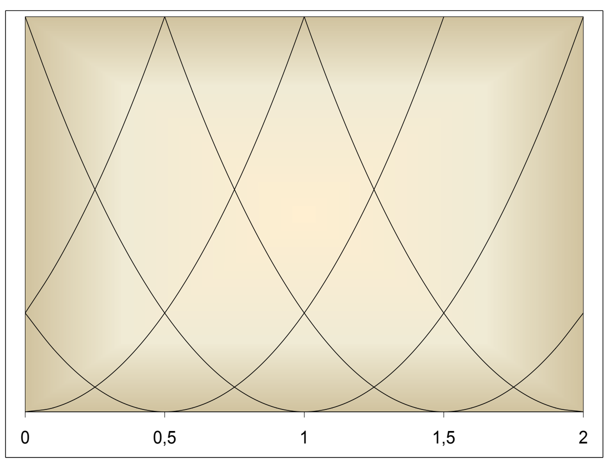

Figure 5: Diagrama qualitatiu del nivels d'energia dels estats de dos electrons interactualts en un anell 1D vs. el flux magnètic.

Finalment estudiem la incorporació paulatina dels efectes coulombics amb l'hamiltonià:

$$\mathcal{H}_\xi = -\frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{R}{\xi + 2\,\sin r} \tag{27}$$

on ξ és un paràmetre de manera que $\mathcal{H}_{\xi=\infty}$ és l'hamiltonià de partícules independents i $\mathcal{H}_{\xi=0}$ és l'hamiltonià del sistema de dos electrons interactuants. Valors finits de ξ representen potencial repulsius sense singularitats en $r = 0$ i $r = \pi$.

Integrem numèricament aquest problema. De seguida es pot comprovar que si $\xi = 10^{12}$ ó $\xi = 10^{-12}$ recuperem els resultas mostrats de manera qualitativa en les Figures 3 i 5. La Figura 6 mostra el creuament d'estats per a un valor intermedi del paràmetre ξ. Veiem que malgrat presentar els triplets finestres més estretes i mínims menys estables, l'efecte Aharonov-Bhom fraccionari es reprodueix exactament igual.

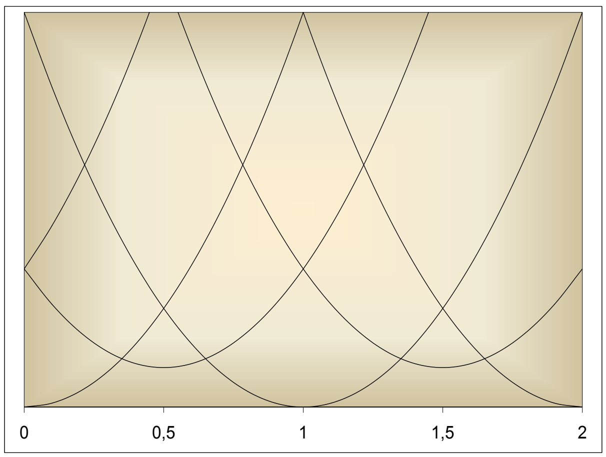

Figure 6: Diagrama qualitatiu del nivels d'energia dels estats de dos electrons en un anell 1D interactuant amb un potencial sense singularitats, eq. 27, vs. el flux magnètic.

Anell 1D en un camp magnètic homogèni

D'acord amb les eqs. 13, 14 del tema II, el potencial vector $\vec{A}$ en la zona on $\vec{B}$ és constant i diferent de zero és tal que:

$$\hat{A}\hat{p} = -i\hbar \frac{B}{2}\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{B}{2}\hat{L}_z \tag{28}$$

$$\hat{A}^2 = \frac{1}{4}B^2\rho^2 \tag{29}$$

de manera que cal afegir el terme $i\hbar\frac{e}{m_e}\frac{B}{2}\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{e^2}{2m_e}\frac{B^2\rho^2}{4}$ a l'hamiltonià $\hat{\mathcal{H}}_0$ que no inclou camp magnètic (eq. 1, tema II) per obtenir l'hamiltonià $\hat{\mathcal{H}}$ (eq. 11 tema II) en presència de camp.

Si en l'esmentat hamiltonià $\hat{\mathcal{H}}_0$ fem el canvi:

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\to\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{ie}{\hbar}\frac{B\,\rho^2}{2} \tag{30}$$

obtenim que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\to-\frac{\hbar^2}{2m_e\rho^2}\left(\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{ie}{\hbar}\frac{B\,\rho^2}{2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\phi}-\frac{ie}{\hbar}\frac{B\,\rho^2}{2}\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m_e\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+i\frac{e\,\hbar\,B}{2\,m_e}\frac{\partial}{\partial\phi}+\frac{e^2B^2\rho^2}{8\,m_e}. \tag{31}$$

En altres paraules, la introducció del camp magnètic constant pot implementar-se simplement pel canvi:

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\to\frac{\partial}{\partial\phi}+i\frac{\Phi(\rho)}{\Phi_0}, \tag{32}$$

on $\Phi_0=\frac{2\pi\hbar}{|e|}$ és la unitat de flux i $\Phi=\pi\rho^2B$ el flux a través d'un cercle de radi ρ.

Fixem-nos que si fem que un camp $\vec{B}$ axial sia zero en tot l'espai excepte un cercle de radi ρ_B inscrit dins de l'anell de radi ρ_0, de manera que $\rho_B<\rho_0$, el canvi que cal fer, eq. 17 del tema II, és

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\to\frac{\partial}{\partial\phi}-i\frac{e\,B\,\rho_B^2}{2\,\hbar}=\frac{\partial}{\partial\phi}+i\frac{\Phi(\rho_B)}{\Phi_0}=\frac{\partial}{\partial\phi}+iF, \tag{33}$$

on F és el flux, en unitats de Φ_0, que travessa l'anell.

Tanmateix, si ara fem que $\rho_B>\rho_0$, aleshores, el potencial vector a considerar és un altre i el canvi associat és l'esmentat adés:

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\to\frac{\partial}{\partial\phi}+i\frac{\pi\rho^2B}{\Phi_0}, \tag{34}$$

Ara be, en integrar l'equació d'autovalors constatem que ρ és una constant ($\rho = \rho_0$). Açò vol dir que si fem créixer ρ_B des de $\rho_B < \rho_0$ fins a $\rho_B = \rho_0$ mantenint fix el valor del camp B, fem créixer el flux que travessa l'anell des d'un valor inicial donat fins un valor màxim $\Phi_M = \pi\rho_0^2 B$. Aquest increment del flux ve recollit en l'hamiltonià (i provoca canvis de l'estructura electrònica). Un creixement posterior de ρ_B,

- no fa créixer el flux a través de l'anell i,
- no suposa cap canvi en l'hamiltonià, perquè la presència de camp en el sistema ens fa triar el canvi $\frac{\partial}{\partial\phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial\phi} + i\frac{\pi\rho^2 B}{\Phi_0}$. Aleshores, en resoldre l'equació de valors propis on, com dèiem, $\rho = \rho_0$ és una constant, trobem els mateixos resultats independentment del valor del radi del cercle on el camp és no nul (sempre que aquest sia major que ρ_0).

En resum, per a un anell 1D, independentment que l'anell estiga o no en la zona de camp zero, el canvi de variable a efectuar per a considerar la presència del camp B és únic:

$$\frac{\partial}{\partial\phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial\phi} + i\frac{\Phi}{\Phi_0}. \tag{35}$$