

Hamiltoniana en presència d'un camp magnètic IV: Efecte Aharonov-Bhom i condicions de contorn antiperiòdiques

JOSEP PLANELLES

*Departament de Ciències Experimentals, Universitat Jaume I,
Apartat 224, E-12080 Castelló, Spain*

Febrer 2005

Efecte Aharonov-Bhom i condicions antiperiòdiques.

És ben sabut que l'espectre d'autovalors d'un operador ve determinat per les condicions frontera (BCs). Així en el cas de l'operador d'energia cinètica si les BCs determinen que la funció siga zero sobre una superfície esfèrica, cilíndrica o cuboidal, trobem autovalors i autofuncions qualitativa i quantitativament diferents entre les diferents BCs, i aquestes diferències són físicament observables.

Recientment s'ha sintetitzat una estructura nanoscòpica de $NbSe_3$ en forma de cinta de Möbius¹ i no es d'estranyar que si aquest tipus d'estructures demostren aplicabilitats tecnològiques acaben sent rutinariament fabricades.

Amb la finalitat de tenir una comprensió profunda del comportament d'aquest tipus de topologies quant són atravesades per un camp magnètic (efecte Aharonov-Bhom) considerem el cas més simple possible: un anell 1D amb condicions de contorn antiperiòdiques (cinta 1D). Tot i que, estrictament, una cinta de Möbius 2D no pot ser comprimida fins a formar una estructura unidimensional (com si que pot ser-ho un cilindre) la cinta de Möbius 2D i l'anell 1D amb condicions antiperiòdiques de contorn presenten similituds topològiques que fa que l'estudi de l'anell 1D amb condicions antiperiòdiques pugui proporcionar claus per a l'enteniment de l'espectre d'autovalors i autofuncions en una cinta de Möbius 2D.

Comencem considerant l'hamiltonià d'un electró en un anell 1D de radi R , amb condicions de contorn antiperiòdiques (cinta 1D), 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:

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

on Φ és el flux i $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{|e|}$ l'unitat de flux. En unitats atòmiques, considerant un radi

¹S. Tanda, T. Tsuneta, Y. Okajima, K. Inagaki, K. Yamaya and N. Hatakenaka, Nature 417 (2002) 397. La síntesis cintes de Möbius d'estructures orgàniques tipus fullerenes ja s'havia fet amb anterioritat.

$R = 1$ i anomenant $F = \frac{\Phi}{\Phi_0}$, tenim que²:

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

Les funcions pròpies d'aquest hamiltonià són $\Psi_m(\phi) = e^{im\phi}$, i estan associades amb uns valors propis $E_m = \frac{1}{2}(m + F)^2$. Les condicions de contorn, $\Psi_m(\phi + 2\pi) = -\Psi_m(\phi)$, ens permeten determinar els valors del número quàntic $m = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$ que evidencien, en particular, el caràcter doblement degenerat de l'estat fonamental.

La representació de E_m vs. F ens mostra els canvis periòdics de la simetria "m" de l'estat fonamental (vegeu figura 1). Cal notar que aquest diagrama i el corresponent del anell 1D són idèntics, si restem mitja unitat de flux a les abscisses de la figura 1.

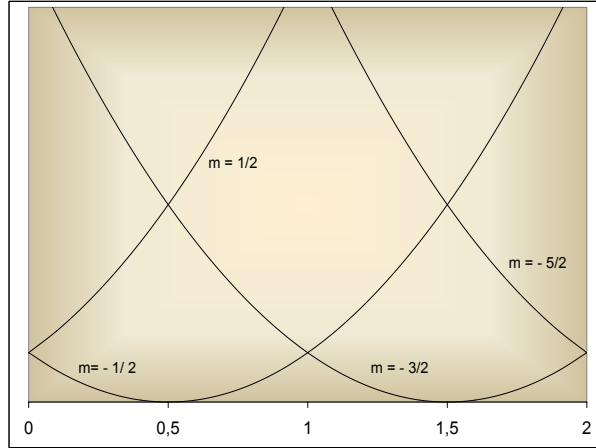


Figure 1: Diagrama qualitatiu dels nivells d'energia dels estats d'un electró en un anell 1D, amb condicions de contorn antiperiòdiques (cinta 1D), en funció del flux.

Considerem ara que hi ha dos electrons. 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):

$$r = 2R \left| \sin \frac{\Delta\phi}{2} \right|. \quad (3)$$

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

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

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

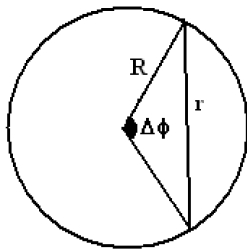


Figure 2: Dos electrons en una cinta 1D.

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 resoldre 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:

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

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'espín. Aquesta darrera podrà anar associada amb $S = 0$ (singlet) i amb $S = 1$ (triplet). La funció singlet, $1/\sqrt{2}(\alpha\beta - \beta\alpha)$, és antisimètrica respecte de l'intercanvi de partícules, mentre que les tres components del triplet, $\{\alpha\alpha, 1/\sqrt{2}(\alpha\beta + \beta\alpha), \beta\beta\}$, són simètriques. El principi de Pauli obliga doncs a que la part espacial del singlet siga un producte simetriztat de les parts espacials monoelectròniques,

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

mentre que la part espacial del triplet serà antisimètrica:

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

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 la cinta amb un electró (vegeu Figura 1). Cal notar de nou que aquest diagrama i el corresponent del anell 1D són idèntics, si restem mitja unitat de flux en les abscisses de la figura 3. Tanmateix, cal ressaltar que l'estat fonamental sempre va també associat a $m_1 = m_2$, és a dir, és singulet, encara que per als valors de flux $F = 0, 1, 2, \dots$ hi ha una múltiple degeneració on s'hi poden trobar triplets. Així, per a $F = 0$ els estats $\{(1/2, 1/2), (1/2, -1/2), (-1/2, -1/2)\}$ estan degenerats. El primer i el tercer són singulets mentre que el segon pot ser singulet i triplet³.

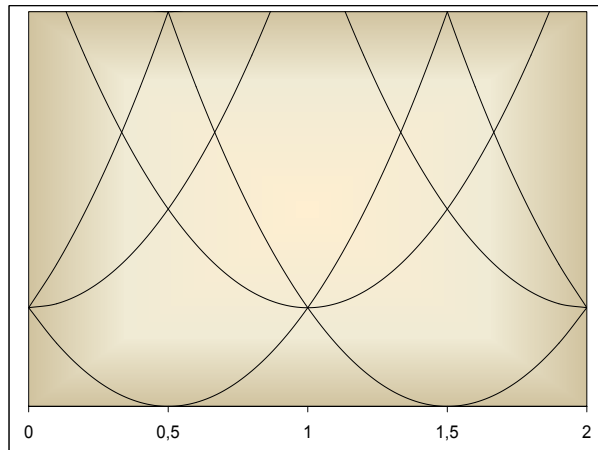


Figure 3: Diagrama qualitatiu del nivells d'energia dels estats de dos electrons independents en un anell 1D, amb condicions de contorn antiperiòdiques (cinta 1D), vs. el flux magnètic.

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

³Cal aclarir que $(m, -m)$ i $(-m, m)$ 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).

relatiu r :

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

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

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

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

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

on $M = m_1 + m_2$ i $m = m_1 - m_2$. Cosa que comporta $M \in Z$, $m \in Z$. Més encara, M i m han de ser de paritat diferent⁴. 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.

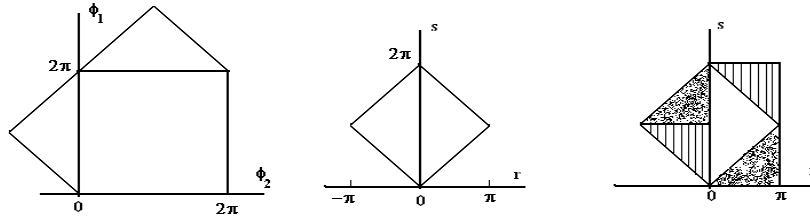


Figure 4: Correspondència entre els dominis de les variables (ϕ_1, ϕ_2) i (r, s) .

⁴Atès que $m_1 = (2p+1)/2$, $m_2 = (2q+1)/2$ amb $p, q \in Z$, tenim que $M = m_1 + m_2 = p + q + 1$ mentre que $m = p - q$. Com la paritat de $p + q$ és la mateixa que la de $p - q$ concloem que M i m han de ser de distinta paritat. Aquest resultat contrasta amb el seu homòleg per a anells 1D amb BCs periòdiques per als quals la paritat dels nombres quàntics M i m ha de ser la mateixa.

Si tenim en compte que M i m han de ser de paritat diferent, no podem combinar l'estat fonamental del moviment del centre de masses ($M = 0$) amb estats del moviment relatiu amb m parell. Aleshores, atès que l'eq. 5 pot ser reescrita en la forma:

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

i que l'estat fonamental per a un flux F donat s'ha de correspondre amb el valor mínim possible de $|m|$ i $|M + 2F|$, l'estat fonamental (M, m) per a $F = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ unitats de flux és $(-1, 0)$, $(-3, 0)$, $(-5, 0)$ \dots , respectivament. És a dir serà singulet (atès que $m = 0$ esta prohibit per a triplets). Per a valors $F = 0, 1, 2, \dots$ hi trobem una triple degeneració on hi apareix un triplet: $\{(-1, 0), (1, 0), (0, 1)\}$, $\{(-1, 0), (-3, 0), (-2, -1)\}$, \dots (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:

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

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 $\{e^{iMs}\}$ en són pròpies amb un valor propi $E(M) = \frac{1}{4}(M + 2F)^2$, 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 (d'antiperiodicitat) han d'aplicar-se conjuntament a tota la funció d'ona.

Les condicions d'antiperiodicitat originals per a les variables ϕ_1 i ϕ_2 impliquen un canvi de fase entre ϕ_1 i $\phi_1 + 2\pi$, i entre ϕ_2 i $\phi_2 + 2\pi$. Aquestes condicions (linealment independents) tindran lloc en les noves variables en les posicions:

$$(s, r) \rightarrow (s + \pi, r + \pi) \quad (14)$$

$$(s, r) \rightarrow (s + \pi, r - \pi) \quad (15)$$

Aquestes condicions es tradueixen en que:

$$e^{iMs} \begin{cases} \sin mr \\ \cos mr \end{cases} = -e^{iMs} e^{iM\pi} \begin{cases} \sin m(r \pm \pi) \\ \cos m(r \pm \pi) \end{cases} \quad (16)$$

i.e.

$$1 \begin{cases} \sin mr \\ \cos mr \end{cases} = -e^{iM\pi} \begin{cases} \sin mr \cos m\pi \pm \cos mr \sin m\pi \\ \cos mr \cos m\pi \mp \sin mr \sin m\pi \end{cases} \quad (17)$$

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

$$1 = -e^{iM\pi} \cos m\pi \quad \text{amb } m \in \mathbb{Z} \quad (18)$$

Des de l'eq. 18 inferim que $M \in Z$. Sabent que $M, m \in Z$, des de l'eq. 18 concloem que M i m han de presentar paritat diferent.

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

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

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

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

la seua equació d'autovalors seria:

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

amb $\tilde{E}_n = 2E_n$ i $\alpha(\alpha-1) = 1$. Aquesta equació (veure e.g. PRB 50(1994)6504-7) presenta uns autovalors $\tilde{E}_n = \frac{n^2}{2} + \alpha(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ 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 resolució 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 $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ a manera de número quàntic que etiquete funcions i energies $E_n, \Psi_n(r)$.

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

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

Ara be, la condició de d'antiperiodicitat en les posicions definides per l'eq. 14, permet escriure que:

$$e^{iMs}\Psi_n(-r) = -e^{iMs}e^{iM\pi}\Psi_n(\pi - r) \Rightarrow \Psi_n(-r) = (-1)^{M+1}\Psi_n(\pi - r), \quad (23)$$

amb la qual cosa,

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

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

$$\Psi_n(\pi - r) = (-1)^n\Psi_n(r) \quad (25)$$

equació que portada a 24 fa concloure que:

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

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

(triplet). Contràriament, si $(M + n)$ és senar la funció espacial serà simètrica i la corresponent d'espín antisimètrica (singulet).

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 $n = 0$ (triplet) del moviment relatiu, també de menor energia, per a conformar l'estat fonamental. La degeneració que hi havia en absència d'interacció Coulòmbica en la posició $F = 0$ es trenca ara en favor del triplet. Si fem créixer 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 $n = 0$ (singulet) del moviment relatiu. Els altres dos estats $M = 0$ i $M = -2$ es combinen també amb $n = 0$ (triplets) i tenen energies menys estables que aquest singulet. Aleshores trobem que en la posició $F = 1/2$ l'estat fonamental presenta un mínim i és un singulet, de la mateixa manera que ja passava en absència d'interacció coulòmbica.

La comparació de l'espectre d'energies vs. el flux F en absència (Fig. 3) i presència (Fig. 5) del terme coulòmbic mostra com aquest terme provoca l'aparició de mínims a valors enters del flux que corresponen a estats triplets intercalats entre el mínims a valors fraccionaris del flux que corresponen a singulets (i que ja apareixien en absència d'interacció coulòmbica).

Veiem doncs que també en anells amb condicions de contorn antiperiòdiques (cintes 1D) és fa present l'efecte Aharonov-Bhom fraccionari (Figura 5). La diferència entre els anells periòdics i antiperiòdics és la permutació de la funció l'espín ($S = 0$, $S = 1$) que acompanya els mínims consecutius: mentre que en anells periòdics si fem créixer el flux des de $F = 0$ trobem consecutivament singulet-triplet-singulet-triplet... en anells antiperiòdics trobem consecutivament triplet-singulet-triplet-singulet...

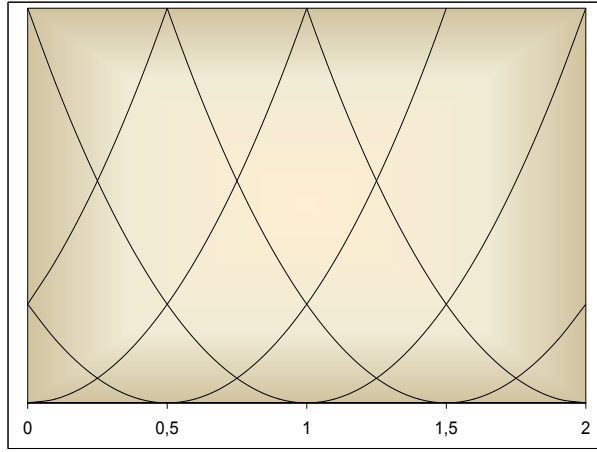


Figure 5: Diagrama qualitatiu del nivells d'energia dels estats de dos electrons interactuats en un anell 1D, amb condicions de contorn antiperiòdiques (cinta 1D), vs. el flux magnètic.

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

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

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 resultats 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 reproduueix exactament igual. En perfecta analogia amb el que passa en el cas de l'anell 1D periòdic.

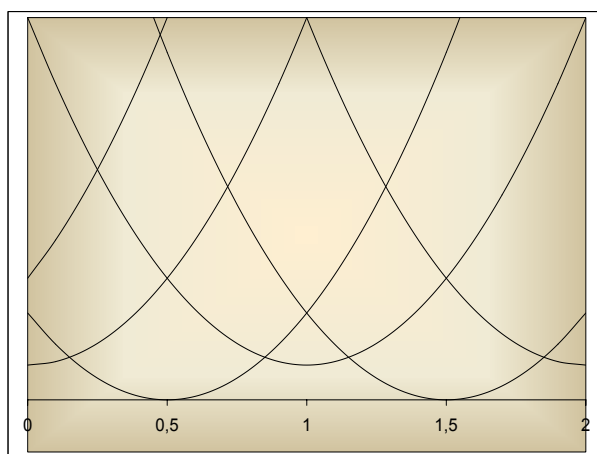


Figure 6: Diagrama qualitatiu del nivells d'energia dels estats de dos electrons en una cinta 1D interactuant amb un potencial sense singularitats, eq. 27, vs. el flux magnètic.