Hamiltoniana en presència d'un camp magnètic

JOSEP PLANELLES

Departament de Ciències Experimentals, Universitat Jaume I,

Apartat 224, E-12080 Castelló, Spain

Setembre 2001 (revisat febrer 2005)

Equació de Lagrange per a potencials $U(q, \dot{q})$ que depenen (també) de la velocitat.

La primera llei de Newton,

$$\frac{d}{dt}p - F = 0, \tag{1}$$

té el seu paral·lel en l'equació de Lagrange,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \tag{2}$$

amb $L = T - V$ i $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$.

Podem substituir L en l'equació (2) pel seu valor $T - V$ i obtenir:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial T}{\partial q} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial V}{\partial q} \equiv Q. \tag{3}$$

Si $V = V(q)$, aleshores, $\frac{\partial V}{\partial \dot{q}} = 0$ i Q representa la força sobre el sistema ($F = -\frac{\partial V}{\partial q}$).

Si $V = U(q, \dot{q})$, aleshores Q té el sentit d'una força generalitzada. En altres paraules, si el sistema presenta una força que depen (també) de la velocitat i que siga expressable en la forma $Q = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial U}{\partial q}$, podem definir la Lagrangiana $L = T - U$, de manera que L automàticament satisfà l'equació (2) de Lagrange. Podem també definir la hamiltoniana $H = p\dot{q} - L$, on $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ és el moment canònic conjugat [que cal distingir-lo del moment cinemàtic $\pi = m\dot{q}$].

Açò és precísament el que li passa a una partícula carregada en presencia d'un camp electromagnètic.

La força electromagnètica en funció d'un potencial generalitzat $U(q, \dot{q})$

La tercera equació de Maxwell relaciona variacions espacials de camp elèctric amb variacions temporals de camp magnètic:

$$\nabla \wedge E + \frac{\partial B}{\partial t} = 0 \tag{4}$$

Atès que el camp magnètic és irrotacional, i.e. $\nabla B = 0$, podem escriure sempre B en termes d'un potencial vector $\vec{A}(x, y, z, t)$ en la forma $B = \nabla \wedge A$, perquè $\nabla(\nabla \wedge A) = 0$ [la divergència d'un rotacional és sempre zero]. Si substituïm B en termes del potencial vector en la tercera equació de Maxwell (4), apleguem a que,

$$\nabla \wedge E + \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \wedge A) = \nabla \wedge (E + \frac{\partial A}{\partial t}) = 0. \tag{5}$$

De l'equació (5) inferim que el parènteis $(E + \frac{\partial A}{\partial t})$ es comporta com el gradient d'un potencial escalar Φ [Recordem que el rotacional d'un gradient és sempre nul: $\nabla \wedge \nabla \Phi = 0$]. Aleshores podem expressar aquest parèntesi com el gradient d'un camp escalar $\Phi(x, y, z, t)$:

$$(E + \frac{\partial A}{\partial t}) = \nabla \Phi. \tag{6}$$

Recordem ara l'equació de la força electromagnètica de Lorentz i combinem aquesta equació amb l'equació (6):

$$F = e(E + v \wedge B) = e(\nabla \Phi - \frac{\partial A}{\partial t} + v \wedge \nabla \wedge A). \tag{7}$$

En aquesta equació e representa la càrrega (positiva o negativa) que està sotmesa al camp electromagnètic.

Tenim que,

$$\nabla \wedge A = (\partial_y A_z - \partial_z A_y)\,\vec{\imath} - (\partial_x A_z - \partial_z A_x)\,\vec{\jmath} + (\partial_x A_y - \partial_y A_x)\,\vec{k} \tag{8}$$

on representem per ∂_α la derivada $\frac{\partial}{\partial\alpha}$. Aleshores la component x del triple producte $v \wedge \nabla \wedge A$ resulta:

$$
\begin{aligned}
(v \wedge \nabla \wedge A)_x &= v_y(\partial_x A_y - \partial_y A_x) + v_z(\partial_x A_z - \partial_z A_x) \\
&= v_y \partial_x A_y + v_z \partial_x A_z + (v_x \partial_x A_x) - v_y \partial_y A_x - v_z \partial_z A_x - (v_x \partial_x A_x) \\
&= \partial_x (v \cdot A) - \textstyle\sum_{x,y,z} v_i \partial_i A_x \\
&\equiv \tfrac{\partial (v\cdot A)}{\partial x} - \textstyle\sum_{x,y,z} v_i \left(\tfrac{\partial A_x}{\partial q_i}\right)
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Per una altra banda tenim que,

$$
\frac{dA_x}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial t} + \sum_{x,y,z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial q_i}\right)\left(\frac{\partial q_i}{\partial t}\right) \equiv \frac{\partial A_x}{\partial t} + \sum_{x,y,z} v_i \left(\frac{\partial A_x}{\partial q_i}\right). \tag{10}
$$

Per comparació de les equacions (9) i (10), concloem que:

$$
(v \wedge \nabla \wedge A)_x = \frac{\partial (v \cdot A)}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{dA_x}{dt}. \tag{11}
$$

Portant aquest resultat, equació (11), a la component x de l'equació (7) (component x de la força de Lorentz) apleguem a que:

$$
\begin{aligned}
F_x &= e\left(\tfrac{\partial \Phi}{\partial x} - \tfrac{\partial A_x}{\partial t} + \left[\tfrac{\partial}{\partial x}(v \cdot A) + \tfrac{\partial A_x}{\partial t} - \tfrac{dA_x}{dt}\right]\right) \\
&= e\left(\tfrac{\partial \Phi}{\partial x} + \tfrac{\partial}{\partial x}(v \cdot A) - \tfrac{dA_x}{dt}\right).
\end{aligned}
\tag{12}
$$

És obvi que $\frac{\partial}{\partial v_x}(v \cdot A) = A_x$ i que $\frac{\partial \Phi}{\partial v_i} = 0$ (atès que $A = A(x, y, z, t)$ i $\Phi = \Phi(x, y, z, t)$). Aleshores l'equació (12) es pot reescriure en la forma:

$$
F_x = e\left[\frac{\partial}{\partial x}(\Phi + v \cdot A) - \frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial v_x}(\Phi + v \cdot A)\right]. \tag{13}
$$

Si definim $U = -e\,(\Phi + v \cdot A)$, la component x de la força, equació (13), queda reescrita segons:

$$
F_x = -\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{d}{dt}\frac{\partial U}{\partial v_x}. \tag{14}
$$

Podem definir, doncs, la Lagrangiana $L = T - U = T + e\,\Phi + e\,v \cdot A$. Tenint en compte que $\frac{\partial \Phi}{\partial v_x} = 0$ i que $\frac{\partial}{\partial v_x}(v \cdot A) = A_x$, la component x del moment canònic conjugat, $p_x = \frac{\partial L}{\partial v_x}$, resulta ser:

$$
p_x = \frac{\partial T}{\partial v_x} + e\,\frac{\partial \Phi}{\partial v_x} + e\,\frac{\partial}{\partial v_x}(v \cdot A) = m v_x + e\,A_x = \pi_x + e\,A_x \tag{15}
$$

on $\pi_x = m\frac{dx}{dt}$ és el moment cinemàtic. Tenim, doncs, que:

$$p = \pi + e\,A. \tag{16}$$

L'hamiltoniana, $H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L$, amb l'equació (16) queda en la forma:

$$\begin{aligned} H &= \textstyle\sum_{i=x,y,z}(\pi_i + e\,A_i)\,v_i - \left[\sum_{i=x,y,z}(\frac{1}{2}\pi_i v_i) + e\,\Phi + e\,\sum_{i=x,y,z}(v_i\,A_i)\right] \\ &= \textstyle\sum_{i=x,y,z}(\frac{1}{2}\pi_i v_i) - e\,\Phi \\ &= \textstyle\frac{1}{2m}\sum_{i=x,y,z}\pi_i^2 - e\,\Phi \\ &= \textstyle\frac{1}{2m}\pi^2 - e\,\Phi \end{aligned} \tag{17}$$

que, en termes del moment canònic, resulta:

$$H = \frac{1}{2m}(p - e\,A)^2 - e\,\Phi \tag{18}$$

on, recordem, e és la càrrega, positiva o negativa, de la partícula sotmesa al camp.

Fem notar que p és el moment canònic conjugat, mentre que $\pi = m\frac{d\vec{r}}{dt}$ és el moment cinemàtic.

El gauge

El potencial vector $A(x, y, z, t)$ no està univocament determinat pel camp B (que és la magnitud que té el sentit físic). En efecte, atès que $B = \nabla \wedge A$, donat la magnitud escalar $\chi(x, y, z, t)$, resulta que A i $(A - \nabla\chi)$ donen lloc al mateix camp magnètic B, ja que:

$$\begin{aligned} \nabla \wedge (\nabla\chi) &= \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ \partial_x\chi & \partial_y\chi & \partial_z\chi \end{vmatrix} \\ &= (\partial_{yz}\chi - \partial_{zy}\chi)\,\vec{\imath} - (\partial_{xz}\chi - \partial_{zx}\chi)\,\vec{\jmath} + (\partial_{xy}\chi - \partial_{yx}\chi)\,\vec{k} = 0 \end{aligned} \tag{19}$$

Podem triar χ de manera que $\nabla A = 0$. A aquesta tria s'anomena gauge simètric o de Coulomb. Encara, però, el potencial vector A no està completament determinat i podem afegir condicions per a fixar-lo.

També Φ admet un gauge. Si les fonts del camp estan llunyanes del nostre sistema (de manera que la densitat de càrrega que genera el camp és zero en el lloc on està situat el nostre sistema) podem triar $\Phi = 0$. Aleshores hi ha prou amb A per a determinar el camp electromagnètic[1]. Sota aquesta condició, $\Phi = 0$, l'hamiltonià (18) queda simplement:

$$H = \frac{1}{2m}\pi^2 = \frac{1}{2m}(p - e\,A)^2 \tag{20}$$

on p és el moment canònic conjugat.

Hamiltoniana Mecanoquàntica

Per a fer el pas a la mecànica quàntica, desenvolupem la segona potència que apareix en (20) en la forma:

$$(p - e\,A)^2 = p^2 + e^2 A^2 - e\,A\,p - e\,p\,A, \tag{21}$$

on tenim present que els dos termes del final, que són idèntics, no presenten el mateixos operdors degut a les propietats de no commutativitat dels operadors mecanoquàntics associats amb p i A.

Ara subtituïm p per $-i\,\hbar\,\nabla$ i tenim en compte que,

$$\hat{p}\hat{A}\Psi = -i\,\hbar\,\nabla A\Psi = -i\,\hbar\,\left[(\nabla A)\Psi + A(\nabla\Psi)\right] = \left[-i\,\hbar\,\nabla A + A\hat{p}\right]\Psi. \tag{22}$$

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

$$\hat{H} = \frac{\widehat{p^2}}{2m} - \frac{e}{m}A\hat{p} + \frac{e^2}{2m}A^2. \tag{23}$$

[1]Si $\rho = 0$, aleshores $\nabla E = 0$ i $\nabla(\nabla\Phi - \frac{\partial A}{\partial t}) = 0$, i.e., $\nabla^2\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\nabla A = 0$, com $\nabla A = 0$, aleshores, $\nabla^2\Phi = 0$, cosa que em permet triar χ tal que $\Phi' = \Phi + \chi$ sempre que $\nabla^2\chi = 0$. Trie doncs $\chi = -\Phi$ amb la qual cosa el potencial escalar final és $\Phi = 0$. Notem que aquesta tria no afecta a $E = \nabla\Phi - \frac{\partial A}{\partial t}$, atès que $\nabla^2\Phi = 0$, i.e., $\nabla\Phi = ct.$, i aquesta constant pot ser absorbida pel gauge del potencial vector A.

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 $A = (-1/2\, y\, B_0, 1/2\, x\, B_0, 0)$[2]. En efecte:

$$\nabla \wedge A = \left| \begin{array}{ccc} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -1/2\, y\, B_0 & 1/2\, x\, B_0 & 0 \end{array} \right] = B_0\, \vec{k} \tag{24}$$

Comprovem que, com era d'esperar,

$$\nabla A = \partial_x(-1/2\, y\, B_0) + \partial_y(1/2\, x\, B_0) + \partial_z(0) = 0. \tag{25}$$

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

$$\left\{ \begin{array}{c} A = (-1/2\, y\, B_0, 1/2\, x\, B_0, 0) \\ p = -i\hbar\nabla \end{array} \right\} \rightarrow A\hat{p} = -\frac{1}{2} i\hbar B_0 (x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = \frac{1}{2} B_0 \hat{L}_z. \tag{26}$$

Anàlogament,

$$A^2 = \frac{1}{4} B_0^2 (x^2 + y^2) = \frac{1}{4} B_0^2 \rho^2. \tag{27}$$

Des de les equacions (23),(26) i (27) podem escriure:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{8} m\omega_c^2\rho^2 + \frac{1}{2}\omega_c\hat{L}_z, \tag{28}$$

on $\omega_c = -\frac{eB}{m}$ és l'anomenada freqüència del ciclotró - vegeu la secció 6.1.1 de [4].

Si definim ara $\omega = \omega_c/2$ podem reescriure l'equació (28) en la forma:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2} m\omega^2\rho^2 + \omega\hat{L}_z. \tag{29}$$

[2] 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 $A \rightarrow A - \nabla(\frac{x\, y\, B_0}{2})$.

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 (29) en la forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{B^2}{8m}\rho^2 + \frac{B\hat{L}_z}{2m} \tag{30}$$

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

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:

$$\frac{1}{\psi(x,y)}\left[\frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{B^2}{8m}\rho^2 + \frac{B\hat{L}_z}{2m} - E\right]\psi(x,y) = \frac{1}{Z(z)}\left[-\frac{1}{2m}\hat{p}_z^2\right]Z(z) = \lambda \tag{31}$$

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:

$$\hat{H}_{HO}^{2D} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{B^2}{8m}(x^2 + y^2) \tag{32}$$

i

$$\hat{H}' = \frac{B\hat{L}_z}{2m}. \tag{33}$$

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:

$$\hat{H}_{HO}^{2D} = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hat{L}_z^2}{\rho^2}\right) + \frac{B^2}{8m}\rho^2. \tag{34}$$

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:

$$[\hat{H}_{HO}^{2D}, \hat{H}^{'}] = 0. \tag{35}$$

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:

$$E_{HO}^{2D} = (v^{'} + \frac{1}{2})\,\omega + (v^{"} + \frac{1}{2})\,\omega \tag{36}$$

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[3]:

$$E_{HO}^{2D} = (2n + |M| + 1)\,\omega, \tag{37}$$

on $n = 0, 1, 2, 3 \ldots$ i $M = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \ldots$

L'energia de l'altre hamiltonià és simplement,

$$E^{'} = \frac{B}{2m} M = \omega M, \tag{38}$$

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

$$E(n, M) = (2n + |M| + M + 1)\,\omega. \tag{39}$$

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

[3]Vegeu el problema proposat a l'apèndix corresponent al tema 1 de Química Quàntica Avançada.

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.

References

[1] R. Rosas,R. Riera, J.L.Marín and H. León, Am. J. Phys. 68 (2000) 835.

[2] H. Goldstein, Mecánica Clásica, Aguilar, Madrid 1977.

[3] J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Massachusetts 1994.

[4] J. Planelles, J. Climente i J. Díaz, *Espectroscòpia*, Col·lecció Papers, Publicacions de la Universitat Jaume I (Castelló), 2002.

Apèndix

Considerem el rotor elàstic bidimensional de massa i constant elàstica unitat, descrit per $\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\bigtriangledown^2 + \frac{1}{2}r^2$. Escriu-lo en coordenades cartesianes. Aleshores, separa variables. Fes tractament algebraic a cadascuna de les dues equacions que has obtingut. Reuneix els resultats i demostra que: $E(v_x, v_y) = v_x + v_y + 1$; $|v_x, v_y >= N_{v_x} N_{v_y} H_{v_x}(x) H_{v_y}(y) e^{-x^2/2} e^{-y^2/2}$.

Escriu aquest mateix operador en coordenades polars. Separa variables i troba les solucions de la part angular. Omiteix trobar les funcions confluents hipergeomètriques que constitueixen les solucions de la part radial.

La separació en polars evidencia que $\hat{L}_z$ és una constant de moviment. També ho pots veure en cartesianes si escrius $\hat{L}_z$ en termes dels creadors i aniquiladors b_x^+, b_x, b_y^+, b_y i, aleshores, comproves que $\left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}_z\right] = 0$. Comprova-ho!

Aquest resultat no implica, però, que $|v_x, v_y>$ siga funció pròpia d'$\hat{L}_z$. Comprova que $\hat{L}_z|v_x, v_y> \neq \lambda|v_x, v_y>$.

Ara bé, atés que $\left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}_z\right] = 0$, sempre pots trobar combinacions lineals, dins de la degeneració d'$\hat{\mathcal{H}}$, que siguen pròpies d'$\hat{L}_z$. Demostra que si $v_1 + v_2 = v_3 + v_4$, aleshores, $|v_1, v_2>$ està degenerat amb $|v_3, v_4>$. Demostra que $|v_x, v_y>$ presenta una degeneració $g = v_x + v_y + 1$.

Particularitza el cas $v_x + v_y = 1$. Hi han dos estats degenerats $\{|10>$ i $|01>\}$. Representa $\hat{L}_z$ en aquesta base. Diagonalitza la representació i troba les dues autofuncions simultànies d'$\hat{\mathcal{H}}$ i $\hat{L}_z$. Comprova que compleixen l'equació d'autovalors de l'energia, escrita aquesta en coordenades cartesianes. Reescriu les les dues autofuncions simultànies d'$\hat{\mathcal{H}}$ i $\hat{L}_z$ en coordenades polars i comprova que compleixen l'equació d'autovalors de l'energia, escrita ara en coordenades polars.