

## Tema 14b

# Hamiltonià en presència de camp magnètic: La papallona de Hofstadter

Josep Planelles

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

## 1 Partícula en un camp magnètic homogeni

Si una partícula es mou sota l'acció d'un potencial periòdic  $V(x) = V(x + a)$  i volem integrar l'equació d'autovalors associada  $\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi$ , amb  $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ , ens trobem que el domini de  $\Psi$  és infinit, i caldria doncs integrar aquest domini. Ara be, la simetria (translacional) del problema fa que l'hamiltonià commute amb el generador de translacions<sup>1</sup>  $\hat{T}_a = e^{-ia\hat{p}} = e^{-a\frac{d}{dx}}$ . La comprovació és immediata: com resulta que  $V(x) = V(x + a)$ , aleshores és immediat que  $[\hat{T}_a, V(x)] = 0$  ja que  $\hat{T}_a V(x)f(x) = V(x - a)f(x - a) = V(x)f(x - a) = V(x)\hat{T}_a f(x)$ . Anàlogament,  $[\frac{\hat{p}^2}{2m}, e^{-ia\hat{p}}] = 0$ , perquè  $\hat{p}^2$  commuta amb  $\hat{p}^n$  per a qualsevol  $n$ . Per tant, concloem que  $[\hat{T}_a, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ .

Com els operadors commuten, puc trobar un conjunt complet de funcions pròpies comunes. Les funcions de Bloch,  $\Psi_k(x) = u(x)e^{ikx}$  amb  $u(x) = u(x + a)$ , són pròpies de  $\hat{T}_a$ :  $\hat{T}_a \Psi_k(x) = \Psi_k(x - a) = u(x)e^{ikx}e^{-ika} = e^{-ika}\Psi_k(x)$ . Cal adonar-se que l'etiqueta  $k$  de les funcions de Bloch està definida en un interval finit de la recta real. És a dir,  $k$  és contínua però està acotada. Així, si  $k = k_1 = 0$  aleshores,  $\hat{T}_a \Psi_{k_1}(x) = \Psi_{k_1}$ , però si  $k = k_2 = 2\pi/a$ , de nou  $\hat{T}_a \Psi_{k_2}(x) = e^{-i\frac{2\pi}{a}a}\Psi_{k_2} = \Psi_{k_2}$ . Per tant,  $k_1$  i  $k_2$  són equivalents i etiqueten la mateixa representació del grup de translacions (i.e. etiqueten la mateixa simetria). És costum triar l'interval  $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ .

Les funcions de Bloch també són pròpies de  $\hat{\mathcal{H}}$ . En efecte, com que:  $\frac{d^2}{dx^2} [u(x)e^{ikx}] = \left(\frac{d^2u}{dx^2} + k^2u\right)e^{ikx}$ , tenim que:

$$\hat{\mathcal{H}}u(x)e^{ikx} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2u(x) + V(x)u(x)\right)e^{ikx} = Eu(x)e^{ikx} \quad (1)$$

sempre que  $u(x)$  siga tal que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + (V(x) + k^2)u(x) = Eu(x) \quad (2)$$

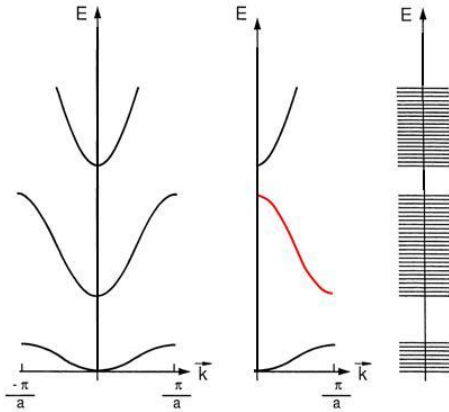


Figure 1: Bandes ( $E_n$  vs.  $k$ ) representades en la zona estesa, bandes representades en la zona reduïda i espectre energètic

on, recordem,  $u(x) = u(x + a)$ .

Veiem en aquesta equació l'aparició de bandes d'energia. Si fem  $k = 0$  (i.e., ens ubiquem al centre de la cel·la  $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ ) trobem una sèrie d'autovalors i autovectors  $\{E_{n,0}, u_{n,0}\}$ , solució de

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (3)$$

amb la condició frontera  $u(x) = u(x + a)$ .

Per a cada autovalor, s'obri una banda parabòlica  $E_n(k)$ , solució de l'equació 2, associada per tant a autofuncions que difereixen de  $u(x)$  en una fase (vegeu figura 1).

<sup>1</sup>És immediat comprovar que  $\hat{T}_a f(x) = f(x - a)$ . Es deixa aquesta comprovació com un exercici per al lector.

En el cas bidimensional, en que la periodicitat la marquen dos vectors  $\mathbf{a}$  i  $\mathbf{b}$ , tenim que  $[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = 0$  (les translacions commuten entre si) i, a més, commuten amb l'hamiltonià. Per aquest motiu, les solucions de l'hamiltonià 2D (ó 3D) són també funcions de Bloch i sempre puc intergrar el sistema en la cel·la unitat, aplicant condicions frontera periòdiques.

Considerem ara un gas homogeni 2D i que, en lloc d'aplicar un potencial periòdic espacial, apliquem un camp magnètic homogeni axial  $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ . La presència del camp axial, malgrat que a primera vista puga semblar que no trenca l'homogeneïtat de l'espai 2D, realment sí que ho fa (malgrat ser homogeni), atès que la presència de camp axial implica l'existència de forces en el plànol 2D en que es mouen les partícules carregades.

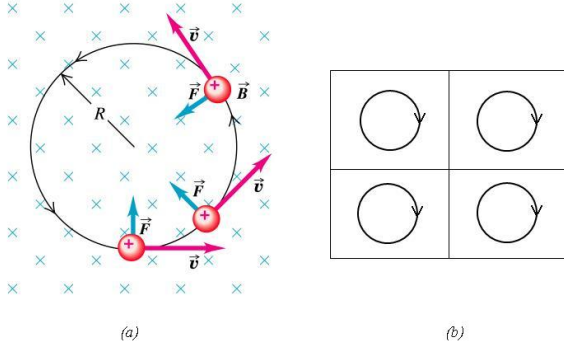


Figure 2: (a) Òrbita de la partícula carregada que és mou amb una velocitat  $v$  causada per un camp magnètic homogeni axial. (b) Òrbites en el plànol.

Vol dir açò que no podrè trobar autofuncions tipus Bloch?

Si tenim en compte que la força (anomenada de Lorentz) provoca que les partícules efectuen òrbites circulars (vegeu figura 2) podríem pensar que la *translació* del centre de les òrbites ens porta a configuracions equivalents. Dit d'una altra forma, si tenim un gas electrònic 2D, l'aplicació del camp magnètic axial homogeni genera òrbites al voltant de qualsevol punt de l'espai (veeu figura 2b).

A l'apartat següent introduïrem el concepte de magnetotranslació que permetrà definir amb precisió la simetria en presència de camp i la possibilitat que, en determinades circumstàncies, les autofuncions dels sistemes 2D penetrats per un camp magnètic axial homogeni siguen funcions tipus Bloch.

## 2 Magnetotranslacions

Ens limitarem, en tot allò que segueix, a l'anomenat *gauge* o contrast simètric per al potencial vector  $\mathbf{A}$ ,

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} = \frac{B}{2} (-y, x, 0), \quad (4)$$

encara que part dels resultats que trobarem són independents del *gauge* usat. Recordem que aquest potencial vector té la propietat que  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , cosa que és immediat de comprovar. Recordem també que, en presència de camp,  $\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + \mathbf{A})^2 + V(x)$ .

Comencem constatant que l'operador  $(\mathbf{p} + \mathbf{A})$  commuta amb  $(\mathbf{p} - \mathbf{A})$ :

$$[\mathbf{p} + \mathbf{A}, \mathbf{p} - \mathbf{A}] = [\mathbf{p}, \mathbf{p}] - [\mathbf{p}, \mathbf{A}] + [\mathbf{A}, \mathbf{p}] - [\mathbf{A}, \mathbf{A}] = -2[\mathbf{p}, \mathbf{A}] = -2(-i\hbar)\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (5)$$

Per tant, també  $[(\mathbf{p} + \mathbf{A})^2, \mathbf{p} - \mathbf{A}] = 0$ . En efecte, anomenant  $\Pi_{\pm} = \mathbf{p} \pm \mathbf{A}$ , tenim que  $[\Pi_+^2, \Pi_-] = \Pi_+ \Pi_+ \Pi_- - \Pi_- \Pi_+ \Pi_+ = 0$  perquè  $[\Pi_+, \Pi_-] = 0$ .

Anàlogament,  $[(\mathbf{p} + \mathbf{A})^2, \exp[-i\mathbf{r}_0 \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{A})]] = 0$ . En efecte,

$$[\Pi_+^2, \exp[-i\mathbf{r}_0 \cdot \Pi_-]] = \sum_n [\Pi_+^2, (-i)^n (\mathbf{r}_0 \cdot \Pi_-)^n] = 0 \quad (6)$$

perquè els operadors commuten component a component.

Aleshores, hem trobat que l'operador  $\hat{T}_m(\mathbf{r}_0) = \exp[-i\mathbf{r}_0 \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{A})]$  commuta amb l'operador energia cinètica  $\frac{1}{2m} (\mathbf{p} + \mathbf{A})^2$ . Anomenem aquest operador magnetotranslació. La magnetotranslació efectua una translació i afegeix una fase<sup>2</sup>:

$$\hat{T}_m(\mathbf{r}_0)f(\mathbf{r}) = \exp[-i\mathbf{r}_0 \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{A})]f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}} e^{-i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{p}} f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}} f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (7)$$

Com el sistema és 2D, hi ha dues direccions  $\mathbf{a}$  i  $\mathbf{b}$  per efectuar magnetotranslacions:  $\hat{T}_m(\mathbf{R}_1)$  i  $\hat{T}_m(\mathbf{R}_2)$  amb  $\mathbf{R}_1 = n_1 \mathbf{a}$  i  $\mathbf{R}_2 = n_2 \mathbf{b}$ . Tot seguit comprovarem la commutació  $[\hat{T}_m(\mathbf{R}_1), \hat{T}_m(\mathbf{R}_2)]$ .

<sup>2</sup>La commutació  $e^{-i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{p}} e^{i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}} = e^{i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}} e^{-i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{p}}$  deriva del fet que  $e^{i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} = e^{i\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})}$  perquè  $\mathbf{r}_0 = (a, b, 0)$  i  $\mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{B}{2} (-(y-b), x-a, 0)$ . Per tant,  $\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})$ .

### 3 Commutació de $T_m(n_1\mathbf{a})$ i $T_m(n_2\mathbf{b})$

Considerem una cel·la unitat arbitrària definida pels vectors  $\mathbf{a}$  i  $\mathbf{b}$ . Considerem l'acció de  $T_m(\mathbf{R}_1)$  sobre  $f(\mathbf{r})$ , on  $\mathbf{R}_1 = n_1\mathbf{a}$ :

$$T_m(\mathbf{R}_1)f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{R}_1\mathbf{A}(\mathbf{r})}f(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \quad (8)$$

L'acció posterior de  $T_m(\mathbf{R}_2)$  :

$$\begin{aligned} T_m(\mathbf{R}_2)T_m(\mathbf{R}_1)f(\mathbf{r}) &= T_m(\mathbf{R}_2)e^{i\mathbf{R}_1\mathbf{A}(\mathbf{r})}f(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \\ &= e^{i\mathbf{R}_2\mathbf{A}(\mathbf{r})}e^{i\mathbf{R}_1\mathbf{A}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_2)}f(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \end{aligned}$$

Tenim que  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{A}(x, y) = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ , per tant,  $\mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) = \frac{B}{2}(-(y - y_2), (x - x_2), 0) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \mathbf{A}(\mathbf{R}_2)$ .

$$\begin{aligned} T_m(\mathbf{R}_2)T_m(\mathbf{R}_1)f(\mathbf{r}) &= e^{i(\mathbf{R}_1+\mathbf{R}_2)\mathbf{A}(\mathbf{r})}e^{-i\mathbf{R}_1\mathbf{A}(\mathbf{R}_2)}f(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)) \\ &= e^{-i\mathbf{R}_1\mathbf{A}(\mathbf{R}_2)}T_m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)f(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Per això escrivim  $T_m(\mathbf{R}_2)T_m(\mathbf{R}_1) = e^{-i\mathbf{R}_1(\mathbf{A}(\mathbf{R}_2))}T_m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)$ .

Anàlogament,  $T_m(\mathbf{R}_1)T_m(\mathbf{R}_2) = e^{-i\mathbf{R}_2(\mathbf{A}(\mathbf{R}_1))}T_m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)$  i per tant,

$$[T_m(\mathbf{R}_2), T_m(\mathbf{R}_1)] = \left[ e^{-i\mathbf{R}_1\mathbf{A}(\mathbf{R}_2)} - e^{-i\mathbf{R}_2\mathbf{A}(\mathbf{R}_1)} \right] T_m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) = k T_m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2). \quad (9)$$

Si escrivim  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ , aleshores  $\mathbf{R}_i\mathbf{A}(\mathbf{R}_j) = \frac{1}{2}\mathbf{R}_i(\mathbf{B} \times \mathbf{R}_j) = \frac{1}{2}\mathbf{B}(\mathbf{R}_j \times \mathbf{R}_i)$  i, per tant,

$$k = e^{-\frac{i\mathbf{B}}{2}(\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_1)} - e^{\frac{i\mathbf{B}}{2}(\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_1)} = 2i \sin \left[ \frac{\mathbf{B}}{2}(\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_1) \right] = 2i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right). \quad (10)$$

Si el flux  $\phi$  a través del rectangle  $\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_1$  val  $\frac{\phi}{2} = q\pi$ ,  $q \in \mathbb{Z}$ , els operadors  $T_m(\mathbf{R}_1)$  i  $T_m(\mathbf{R}_2)$  commuten. El flux en el rectangle  $\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_1$  és múltiple del flux en la cel·la unitat  $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ :  $\phi = p\phi_c$ . Aleshores la condició resulta  $\phi_c = 2\pi\frac{q}{p}$ . La correspondència del grup de magnetotranslacions amb el grup de translacions és *un a un* si el camp és tal que el flux en la cel·la unitat arbitràriament elegida és racional.

Més concretament, la translació definida pels menors vectors en cada direcció implica  $\mathbf{R}_1 = \mathbf{a}$  i  $\mathbf{R}_2 = \mathbf{b}$ . La commutació dels operadors  $T_m(\mathbf{a})$  i  $T_m(\mathbf{b})$  és possible si el flux  $\phi$  a través del rectangle  $\mathbf{b} \times \mathbf{a}$  val  $\frac{\phi}{2} = q\pi$ ,  $q \in \mathbb{Z}$ . El valor més petit possible per a  $q$  és la unitat, en conseqüència, els operadors commuten si el flux a través del rectangle  $\mathbf{b} \times \mathbf{a}$  és múltiple de  $2\pi$  (un fluxó). Per tant, la cel·la unitat que defineix les magnetotranslacions és aquella per la que passa un fluxó. Si trie aquesta cel·la (o una múltiple d'aquesta) per a integrar l'equació d'autovalors del sistema 2D sotmés a un camp magnètic axial, trobem que les magnetotranslacions que defineixen les condicions frontera se comporten com les translacions i puc, per tant, integrar el sistema en aquesta cel·la, obtenint funcions tipus Bloch en aplicar les corresponents condicions frontera magnetoperiòdiques.

Finalment, fem notar que la grandària de la cel·la unitat ve determinada per la intensitat del camp i que un canvi d'intensitat fa canviar la grandària d'aquesta<sup>3</sup>.

### 4 Significat físic de la magnetotranslació

Podem biseccionar el operador de magnetotranslació en dos factors:  $T(\mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{R}\mathbf{p}}$  i  $M(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{R}\mathbf{A}(\mathbf{r})}$ . Considerem l'acció de cada part sobre la funció d'ona. Començem pel més conegut de la translació. Sabem que  $e^{-iap_x}\Psi(x) = \Psi(x - a)$ . Calculem el valor expectació de l'operador posició abans i després d'aplicar aquest operador de translació i comparem:

- Abans:  $\langle x \rangle = \langle \Psi(x) | x | \Psi(x) \rangle$
- Després:  $\langle e^{-iap_x}\Psi(x) | x | e^{-iap_x}\Psi(x) \rangle = \langle \Psi(x - a) | x | \Psi(x - a) \rangle = \langle \Psi(x) | (x + a) | \Psi(x) \rangle = \langle x \rangle + a$ .

<sup>3</sup>Si superposem una periodicitat espacial i una magnètica, caldrà definir la cel·la unitat com aquella mínim comú múltiple de la cel·la unitat espacial i la cel·la unitat magnètica, d'altra forma no podríem tindre flux enter per la cel·la d'integració a la vegada que aquesta presentés simetria periòdica espacial. Tornarem sobre aquest punt en seccions posteriors.

Podem generalitzar fàcilment a tres coordenades fent ús de  $T(\mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{R}\mathbf{p}}$ .

Ara abordem l'altre operador  $M(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{R}\mathbf{A}(\mathbf{r})}$ . Fem el cas particular  $M(a) = e^{iax}$ .

- Abans:  $\langle p \rangle = \langle \Psi(x) | -i \frac{d}{dx} | \Psi(x) \rangle$
- Després:

$$\begin{aligned}
 \langle e^{iax} \Psi(x) | (-i \frac{d}{dx}) | e^{iax} \Psi(x) \rangle &= \int e^{-iax} \Psi(x)^* (-i \frac{d}{dx}) e^{iax} \Psi(x) dx \\
 &= \int e^{-iax} \Psi(x)^* e^{iax} (-i \frac{d\Psi(x)}{dx}) dx + \int e^{-iax} \Psi(x)^* (-i \frac{d e^{iax}}{dx}) \Psi(x) dx \\
 &= \int \Psi(x)^* (-i \frac{d}{dx}) \Psi(x) dx + \int \Psi(x)^* a \Psi(x) dx \\
 &= \langle p \rangle + a
 \end{aligned}$$

En el cas bidimensional en que  $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$  tenim  $M(a, b) = e^{i\frac{B}{2}(-ay+bx)}$ . Aleshores comprovem que  $\langle p_x \rangle \rightarrow \langle p_x \rangle + b\frac{B}{2} = \langle p_x \rangle - A_x(a, b)$  mentre que  $\langle p_y \rangle \rightarrow \langle p_y \rangle - a\frac{B}{2} = \langle p_y \rangle - A_y(a, b)$ , i.e.,  $\langle \mathbf{p} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{p} \rangle - \mathbf{A}(\mathbf{R})$ .

A la vista de la figura 3 sembla que en contrarestar les forces de Lorentz provocarem variacions de moment en el sentit d'augment de  $p_x$  i disminució de  $p_y$ , just allò que s'ha obtingut.

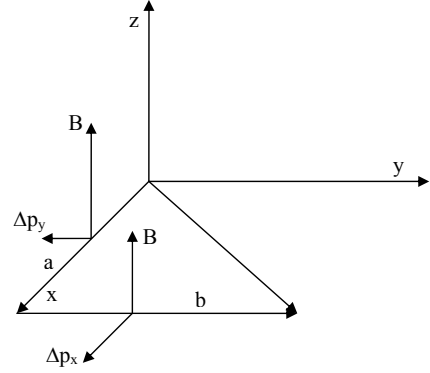


Figure 3: Variació de moment que acompanya la magnetotranslació.

Podem obtenir una visió purament clàssica de la magnetotranslació imaginat una xarxa 2D sotmesa a un camp magnètic axial uniform i un electró de carrega  $e = -1$  ubicat en un punt  $\mathbf{r}$  de la xarxa amb un moment cinemàtic  $\pi_0$  que el volem traslladar a un punt equivalent  $\mathbf{r} + \mathbf{R}$  sense variar el seu moment cinemàtic (vegeu figura 4).

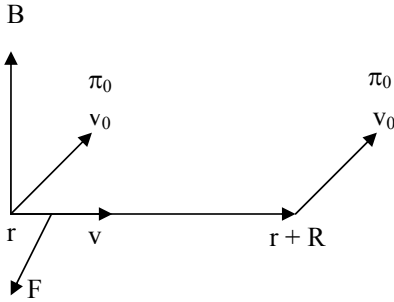


Figure 4: Visió clàssica de la magnetotranslació

Per poder fer-ho caldrà proporcionar una velocitat  $\mathbf{v}$  en la direcció  $\mathbf{R}$ . Caldrà, a més a més, vèncer la força de Lorentz  $e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$  provocada pel camp com resposta a  $\mathbf{v}$  oposant-li una força en sentit contrari  $\mathbf{F} = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = -e(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B})$ , cosa que equival imprimir un impuls  $\mathbf{F}dt = -e(d\mathbf{r} \times \mathbf{B})$  mentre dura el recorregut  $\mathbf{R}$ . Aquest impuls farà variar el moment amb una quantitat  $\Delta \mathbf{p} = -e(\mathbf{R} \times \mathbf{B})$ . Si el camp magnètic axial uniforme el representem amb el gauge simètric,  $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(\mathbf{r} \times \mathbf{B})$ , i substituïm la càrrega  $e$  pel seu valor, aquesta variació de moment pot ser expressada en la forma  $\Delta \mathbf{p} = -2\mathbf{A}(\mathbf{R})$ . Aleshores tenim una situació inicial  $(\mathbf{r}, \pi_0)$  i una final  $(\mathbf{r} + \mathbf{R}, \pi_0)$ . En el punt  $\mathbf{r}$  tenim que,

$$\pi_0 = \mathbf{p} + \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (11)$$

mentre que en  $\mathbf{r} + \mathbf{R}$  caldrà sumar  $\Delta \mathbf{p}$  al moment, de manera que

$$\pi_0 = \mathbf{p}' + \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) - 2\mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (12)$$

Si fem ús del gauge simètric,  $\mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}(\mathbf{R})$ , aleshores

$$\pi_0 = \mathbf{p}' + \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (13)$$

desde les equacions (11) i (13) concloem que  $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \mathbf{A}(\mathbf{R})$ .

## 5 Sistema periòdic en presència d'un camp magnètic axial uniform

Ens trobem en el cas d'una doble periodicitat, aquella que ve marcada per la cel·la de la xarxa espacial i la de la cel·la magnètica. Si la periodicitat espacial i magnètica coincideixen (i.e., si per la cel·la unitat espacial penetra un o més fluxons  $\phi_0$ ) no hi ha cap trencadura de simetria i resollem el problema de la xarxa espacial en presència de camp de la mateixa manera que en absència, excepte la fase en les condicions frontera. Si no és el cas (cosa que podem aconseguir canviant el camp  $B$ ) ens trobem en una doble periodicitat:

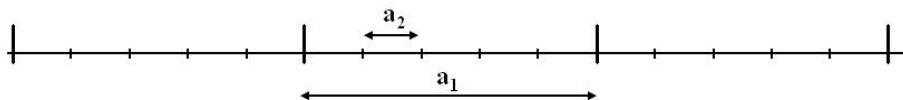


Figure 5: Doble periodicitat

Per a aproximar-nos a aquest problema, considerem un exemple 1D en que l'hamiltonià és  $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_1(x) + V_2(x)$ , on  $V_1(x + a_1) = V_1(x)$  i  $V_2(x + a_2) = V_2(x)$  (vegeu figura 5). De la figura tenim que  $a_2 < a_1$ . Per tant, mentre que  $V_2(x + a_2) = V_2(x)$ ,  $V_1(x + a_2) \neq V_1(x)$ . Per tant, si anomenem  $V = V_1 + V_2$  tenim que  $V(x + a_2) \neq V(x)$ . Tanmateix,  $V(x + a_1) = V(x)$ . És a dir, la periodicitat ve determinada per la cel·la unitat més gran. Tanmateix, si  $a_1/a_2$  no és un nombre racional, el sistema perd completament la simetria translacional en ser impossible trobar una cel·la definida per un vector  $\mathbf{a}$  de longitud el mínim comú múltiple de les longituds de  $\mathbf{a}_1$  i  $\mathbf{a}_2$ . Cel·la que, repetida, genera el sistema.

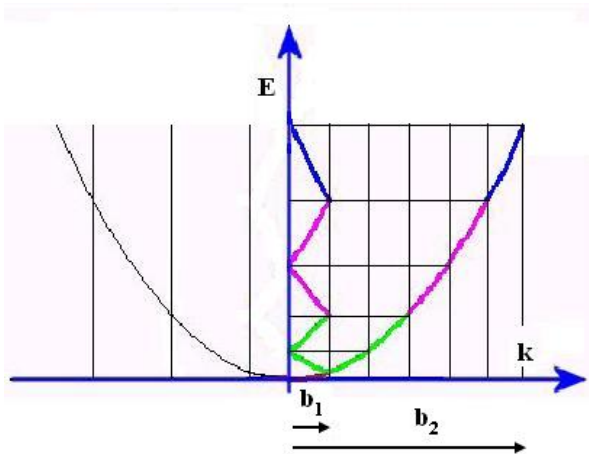


Figure 6: Banda estesa i doblada

Imaginem que la cel·la gran  $\mathbf{a}_1$  és la cel·la magnètica associada amb una intensitat  $B$  de camp i que  $\mathbf{a}_2$  és la cel·la espacial. Imaginem que desconnectem el camp (fem  $B = 0$ ) però mantenim  $\mathbf{a}_1$  com cel·la d'integració. La cel·la de la xarxa recíproca ( $\mathbf{b}_1$ ) serà molt menor que  $\mathbf{b}_2$ , corresponent a  $\mathbf{a}_2$ , que representa la simetria en absència de camp. Aleshores, es produeix el fenomen del *doblat* de la banda: en obligar a representar entre 0 i  $\mathbf{b}_1$  la banda que havia d'arribar a  $\mathbf{b}_2$ , aquesta apareix com superposició de bandes entre les que no hi ha gap (vegeu figura 6).

Si ara apliquem el camp i  $\mathbf{b}_1$  passa a ser l'autèntica cel·la unitat de la xarxa recíproca, en els extrems  $k = 0$  i  $k = \mathbf{b}_1$  es donen les condicions de difracció (inici i final de banda). Per tant, l'acció del camp sobre la banda en absència d'aquest és obrir minigaps en les fronteres, i.e., convertir la banda en una col·lecció de minibandes pròximes, amb la particularitat que si el camp és tal que  $a_1/a_2 \notin \mathbb{Q}$  se trenca totalment la simetria periòdica, deixa d'haver bandes i el problema deixa de ser resoluble aplicant condicions frontera magnetoperiòdiques en una regió finita de l'espai, de manera que no podem trobar solucions tipus Bloch.

Com el valor del camp  $B$  determina la periodicitat, i petites variacions de  $B$  poden produir canvis grans en la congruència de cel·les espacial i magnètica, la representació de la banda vs.  $B$  sembla caòtica (més precisament, sembla fractal), com mostrem en la secció següent.

## 6 La papallona de Hofstadter

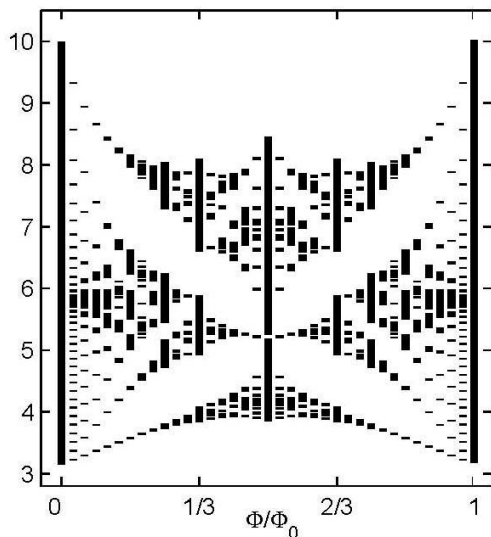


Figure 7: La papallona de Hofstadter

En la figura mostrem l'espectre energètic d'una xarxa bidimensional quadrada travessada per un camp magnètic axial vs. el valor del flux que la travessa, en un interval de fluxos entre zero i un fluxó  $\phi_0$  ( $\phi \in [0, 2\pi]$ ).

Com podem veure, per a  $\phi = \phi_0/2$  la banda inicial contínua obri un gap generant dues bandes. Per a  $\phi = \phi_0/3$  la banda dona lloc a tres bandes. Per a  $\phi = \phi_0/32$ , la banda original s'obri en multitud de minibandes. Per a  $\phi = \phi_0$  tornem a tenir una única banda, perquè les cel·les espacial i magnètica coincideixen. Per a  $\phi = (2/3)\phi_0$  tornem a trobar tres bandes com a  $\phi = \phi_0/3$ , etc. El fet que la forma de l'espectre vs. el flux  $\phi$  sembla una papallona fa que aquest s'anomeni *papallona de Hofstadter*, en honor a D. R. Hofstadter que fou el primer en publicar aquesta autoreplicació a partir de càlculs model tipus tight binding (D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B 14(1976) 2239).