Jan Myrheim, 7. mars 2002

P.C. Hemmer: Kvantemekanikk. Løsning oppgave 14.2

En partikkel med masse m og ladning q i et konstant magnetfelt med flukstetthet $\mathcal{B}$ har Hamilton-operatoren

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \ .$$

Her bruker vi såkalt sirkulær justering, der vektorpotensialet er

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\,(-\mathcal{B}y, \mathcal{B}x, 0) \ .$$

Det gir at $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$, og at

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \frac{q^2 \vec{A}^{\,2}}{2m} - \frac{q\vec{A} \cdot \vec{p}}{m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{q^2\mathcal{B}^2(x^2 + y^2)}{8m} - \frac{q\mathcal{B}(-yp_x + xp_y)}{2m} \ .$$

Vi gjenkjenner z-komponenten av dreieimpulsen, $L_z = xp_y - yp_x$. Siden z-komponenten av den kanoniske impulsen, $p_z = -\mathrm{i}\hbar\,\partial/\partial z$, kommuterer med H, kan den kvantiseres samtidig med H. Derfor antar vi at bølgefunksjonen er

$$\psi(x, y, z) = \chi(x, y)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_z z} \ ,$$

der $\hbar k_z$ er egenverdien for p_z, og at $\chi(x, y)$ er en egenfunksjon for den todimensjonale Hamilton-operatoren

$$H_{xy} = \frac{p_x^2 + p_x^2}{2m} + \frac{q^2\mathcal{B}^2(x^2 + y^2)}{8m} - \frac{q\mathcal{B}}{2m}\,L_z \ .$$

Her innfører vi syklotronfrekvensen

$$\omega_c = \frac{|q\mathcal{B}|}{m} \ ,$$

det gir at

$$H_{xy} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{8}\,m\omega_c^{\,2}(x^2 + y^2) \mp \frac{\omega_c}{2}\,L_z \ .$$

Om fortegnet i det siste leddet er $-$ eller $+$, avhenger av om $q\mathcal{B} > 0$ eller $q\mathcal{B} < 0$. Vi antar i fortsetningen at $q\mathcal{B} > 0$, det motsatte fortegnet er like enkelt å håndtere.

En rett fram metode for å behandle denne Hamilton-operatoren, er å kvantisere L_z, som kommuterer med hele H. Det gjør vi ved å innføre polarkoordinater ρ, φ slik at

$$x = \rho\cos\varphi \ , \qquad y = \rho\sin\varphi \ ,$$

og så bruke at

$$L_z = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi} \ .$$

Vi gjennomfører ikke den prosedyren her, fordi det finnes en enklere metode.

Stigeoperatorer

Definer stigeoperatorene

$$a_x = \alpha x + \mathrm{i}\beta p_x = \alpha x + \hbar\beta \,\frac{\partial}{\partial x}\;, \qquad a_x^\dagger = \alpha x - \mathrm{i}\beta p_x = \alpha x - \hbar\beta \,\frac{\partial}{\partial x}\;,$$

og

$$a_y = \alpha y + \mathrm{i}\beta p_y = \alpha y + \hbar\beta \,\frac{\partial}{\partial y}\;, \qquad a_y^\dagger = \alpha y - \mathrm{i}\beta p_y = \alpha y - \hbar\beta \,\frac{\partial}{\partial y}\;.$$

Her skal α og β være positive konstanter slik at

$$1 = [a_x, a_x^\dagger] = [\alpha x + \mathrm{i}\beta p_x, \alpha x - \mathrm{i}\beta p_x] = -2\mathrm{i}\alpha\beta[x, p_x] = 2\alpha\beta\hbar\;.$$

Dessuten skal operatoren

$$\begin{aligned} a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y &= \alpha^2(x^2+y^2) + \beta^2(p_x^2+p_y^2) + \mathrm{i}\alpha\beta([x,p_x]+[y,p_y]) \\ &= \alpha^2(x^2+y^2) + \beta^2(p_x^2+p_y^2) - 1 \end{aligned}$$

reprodusere Hamilton-operatoren H_{xy}. Vi må finne en konstant γ slik at

$$2\alpha\beta\hbar = 1\;, \qquad \gamma\alpha^2 = \frac{1}{8}\,m\omega_c^2\;, \qquad \gamma\beta^2 = \frac{1}{2m}\;.$$

Løsningen er

$$\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2}\;, \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega_c}{4\hbar}}\;, \qquad \beta = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega_c}}\;.$$

Vi får da at

$$H_{xy} = \frac{\hbar\omega_c}{2}\,(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) - \frac{\omega_c}{2}\,L_z\;.$$

Det viser seg at vi kan forenkle videre ved å innføre operatorene

$$a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_x \pm \mathrm{i}a_y)\;, \qquad a_\pm^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_x^\dagger \mp \mathrm{i}a_y^\dagger)\;.$$

Vi har at

$$\begin{aligned} a_+^\dagger a_+ &= \frac{1}{2}\,(a_x^\dagger - \mathrm{i}a_y^\dagger)(a_x + \mathrm{i}a_y) = \frac{1}{2}\,(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + \mathrm{i}(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x))\;, \\ a_-^\dagger a_- &= \frac{1}{2}\,(a_x^\dagger + \mathrm{i}a_y^\dagger)(a_x - \mathrm{i}a_y) = \frac{1}{2}\,(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y - \mathrm{i}(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x))\;. \end{aligned}$$

Her er

$$a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x = (\alpha x - \mathrm{i}\beta p_x)(\alpha y + \mathrm{i}\beta p_y) - (\alpha y - \mathrm{i}\beta p_y)(\alpha x + \mathrm{i}\beta p_x) = 2\mathrm{i}\alpha\beta(xp_y - y\beta p_x) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,L_z\;,$$

og følgelig

$$L_z = -\mathrm{i}\hbar(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x) = \hbar(a_-^\dagger a_- - a_+^\dagger a_+)\;.$$

Men det gir at

$$\begin{aligned} H_{xy} &= \frac{\hbar\omega_c}{2}\,(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) - \frac{\omega_c}{2}\,L_z \\ &= \frac{\hbar\omega_c}{2}\,(a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_- + 1 - (a_-^\dagger a_- - a_+^\dagger a_+)) \\ &= \hbar\omega_c\left(a_+^\dagger a_+ + \frac{1}{2}\right)\;. \end{aligned}$$

To dimensjoner redusert til en

Dette er et bemerkelsesverdig resultat: en partikkel i to dimensjoner i et magnetfelt som er konstant i rom og tid, har en Hamilton-operator som ser ut nøyaktig som Hamilton-operatoren for en *endimensjonal* harmonisk oscillator! Det kunne vi forresten ha sagt direkte, uten så mye mellomregning. Vi har nemlig at

$$H_{xy} = \frac{\pi_x^2 + \pi_y^2}{2m} \,,$$

der $\pi_x = p_x - qA_x$ og $\pi_y = p_y - qA_y$ er x- og y-komponentene av det som kalles den *kinematiske* impulsen $\vec{\pi} = \vec{p} - q\vec{A}$, i motsetning til den *kanoniske* impulsen $\vec{p}$. I klassisk mekanikk er $\vec{\pi} = m\vec{v}$, der $\vec{v}$ er hastigheten. I motsetning til komponentene av den kanoniske impulsen, kommuterer ikke de kinematiske impulskomponentene innbyrdes, vi har nemlig at

$$\begin{aligned}[\pi_x, \pi_y] &= [p_x - qA_x, p_y - qA_y] = -q([p_x, A_y] + [A_x, p_y]) \\ &= \mathrm{i}\hbar q \left(\left[\frac{\partial}{\partial x} \,, A_y \right] + \left[A_x \,, \frac{\partial}{\partial y} \right] \right) = \mathrm{i}\hbar q \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \mathrm{i}\hbar q \mathcal{B} \,.\end{aligned}$$

Merk at denne kommutatoren er gauge-invariant (justerinvariant)!

Vi ser at hvis vi f.eks. definerer $P = \pi_y$ og $X = \pi_x/(q\mathcal{B})$, så er X og P kanonisk konjugerte variable, dvs. at

$$[X, P] = \mathrm{i}\hbar \,,$$

og dessuten er

$$H_{xy} = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_c^2 X^2 \,,$$

med $\omega_c = |q\mathcal{B}|/m$. Dette er en endimensjonal harmonisk oscillator med vinkelfrekvens ω_c.

Selvfølgelig er systemet fremdeles todimensjonalt, så hvor blir det av den andre dimensjonen? Vel, den bidrar ikke til energien, men den bidrar til degenerasjonen av energinivåene.

Banedreieimpulsen er heltallig, ikke halvtallig

Representasjonen $L_z = \hbar(a_-^\dagger a_- - a_+^\dagger a_+)$ av z-komponenten av dreieimpulsen er i seg selv interessant, fordi den viser uten rom for tvil at en egenverdi til L_z må være et heltallig multiplum av $\hbar$. Altså at banedreieimpulsen $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ ikke kan være halvtallig.

Dette er et bedre argument enn det at L_z må ha heltallige egenverdier for at egenfunksjonene skal være entydige (se f.eks. læreboka s. 90, avsnitt 5.4.4). Husk at en bølgefunksjon ψ ikke er direkte observabel, de observable størrelsene er sannsynlighetstettheten $\rho = |\psi|^2$ og sannsynlighets-strømtettheten

$$\vec{j} = \frac{1}{m} \, \mathrm{Re}(\psi^* \, ((-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\vec{A})\psi)) \,.$$

Det er ρ og $\vec{j}$ som må være entydige funksjoner, ikke nødvendigvis ψ.

Energiegenfunksjonene

En eneste (todimensjonal) energiegenfunksjon, som vi kaller $\chi_0 = \chi_0(x,y)$, annihileres av begge operatorene a_x og a_y, og dermed av a_+ og a_-. Vi har at

$$\begin{aligned} a_x\chi_0 &= \left(\alpha x + \hbar\beta\,\frac{\partial}{\partial x}\right)\chi_0 = 0\ , \\ a_y\chi_0 &= \left(\alpha y + \hbar\beta\,\frac{\partial}{\partial y}\right)\chi_0 = 0\ . \end{aligned}$$

Løsningen er

$$\chi_0(x,y) = N_0\,\mathrm{e}^{-\lambda(x^2+y^2)}\ ,$$

med en normeringskonstant N_0 og med

$$\lambda = \frac{\alpha}{2\hbar\beta} = \frac{\alpha^2}{2\hbar\alpha\beta} = \alpha^2 = \frac{m\omega_c}{4\hbar}\ .$$

Et fullstendig sett av egentilstander for H_{xy} er da

$$\chi_{jk} = N_{jk}\,(a_+^\dagger)^j\,(a_-^\dagger)^k\,\chi_0\ ,$$

der N_{jk} er normeringskonstanter. Energiegenverdiene er $\hbar\omega_c(j+(1/2))$, uavhengige av k. Det vil si at alle tilstandene χ_{0k}, med $j=0$, tilhører den degenererte grunntilstanden, også kalt "laveste Landau-nivå", idet energinivåene kalles Landau-nivå.

Operatorene $a_\pm$ kan uttrykkes ved de komplekse koordinatene $u = x + \mathrm{i}y$ og $u^* = x + \mathrm{i}y$, og de tilsvarende derivasjonsoperatorene

$$\frac{\partial}{\partial u} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial y}\right)\ , \qquad \frac{\partial}{\partial u^*} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + \mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial y}\right)\ ,$$

de siste er definert slik at

$$\frac{\partial u}{\partial u} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial y}\right)(x+\mathrm{i}y) = 1\ , \qquad \frac{\partial u^*}{\partial u^*} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + \mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial y}\right)(x-\mathrm{i}y) = 1\ ,$$

og

$$\frac{\partial u^*}{\partial u} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial y}\right)(x-\mathrm{i}y) = 0\ , \qquad \frac{\partial u}{\partial u^*} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + \mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial y}\right)(x+\mathrm{i}y) = 0\ .$$

Vi har at

$$\begin{aligned} a_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_x + \mathrm{i}a_y) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha u + 2\hbar\beta\,\frac{\partial}{\partial u^*}\right) \\ a_+^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_x^\dagger - \mathrm{i}a_y^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha u^* - 2\hbar\beta\,\frac{\partial}{\partial u}\right) \\ a_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_x - \mathrm{i}a_y) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha u^* + 2\hbar\beta\,\frac{\partial}{\partial u}\right) \\ a_-^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a_x^\dagger + \mathrm{i}a_y^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha u - 2\hbar\beta\,\frac{\partial}{\partial u^*}\right) \end{aligned}$$

Videre kan vi skrive

$$\chi_0 = N_0\,\mathrm{e}^{-\lambda u^* u}\ .$$

Det gir følgende uttrykk for grunntilstandene:

$$\chi_{0k} = N_{0k}\,(a_-^\dagger)^k\,\chi_0 = N_k'\,u^k\,\mathrm{e}^{-\lambda u^* u}\ ,$$

der N_k' er litt andre normeringskonstanter enn N_{0k}.

En kan spørre etter hvor sannsynlighetstettheten

$$\rho = |\chi_{0k}|^2 = |N_k'|^2\,|u|^{2k}\,\mathrm{e}^{-2\lambda|u|^2}$$

er maksimal. Vi finner ut at det skjer for

$$x^2 + y^2 = |u|^2 = \frac{k}{2\lambda} = \frac{2k\hbar}{m\omega_c} = \frac{2k\hbar}{|q\mathcal{B}|}\ .$$

Vi kan også undersøke de *spesielle* eksiterte tilstandene

$$\chi_{j0} = N_{j0}\,(a_+^\dagger)^j\,\chi_0 = N_j'\,(u^*)^j\,\mathrm{e}^{-\lambda u^* u}\ .$$

Her er også sannsynlighetstettheten maksimal for

$$x^2 + y^2 = |u|^2 = \frac{k}{2\lambda} = \frac{2k\hbar}{m\omega_c} = \frac{2k\hbar}{|q\mathcal{B}|}\ .$$

Husk at energien er

$$E = \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c \approx k\hbar\omega_c\ .$$

Den radien der bølgefunksjonen er maksimal, er altså

$$|u|^2 = \frac{2k\hbar}{m\omega_c} \approx \frac{2E}{m\omega_c^2}\ .$$

Dette kan vi sammenligne med løsningene av den klassiske bevegelsesligningen

$$m\,\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2} = q\vec{v}\times\vec{\mathcal{B}}\ ,$$

eller for en sirkelbevegelse i planet, med sentrum i origo og radius r,

$$m\,\frac{v^2}{r} = qv\mathcal{B}\ .$$

Energien er

$$E = \frac{1}{2}\,mv^2 = \frac{1}{2m}\,(mv)^2 = \frac{1}{2m}\,(q\mathcal{B}r)^2 = \frac{1}{2}\,m\omega_c^2 r^2\ .$$

For de spesielle eksiterte kvantemekaniske tilstandene χ_{j0} har vi samme relasjon mellom energi og baneradius som det vi har for den klassiske bevegelsen. Disse spesielle tilstandene kan vi forstå slik at de tilsvarer klassiske baner med sentrum i origo.

Hvordan skal vi da forstå grunntilstandene χ_{0k}? Siden disse er grunntilstander, må de tilsvare klassisk at partikkelen ligger i ro, eller beveger seg rundt i en sirkelbane med minimal radius. Når den kvantemekaniske bølgefunksjonen har sitt maksimum på en sirkel med stor radius, må det tolkes slik at sentrum i den lille sirkelen ikke er skarpt lokalisert, men er lokalisert med like stor sannsynlighet hvor som helst rundt periferien av den store sirkelen.