17. 对称规范解电子运动问题

我们首先重述一遍对称规范：$\vec{A}=(-\frac{1}{2}By,\frac{1}{2}Bx,0)$
那么自然代入哈密顿算符，把括号直接拆掉

$$
\begin{aligned}
H&=\frac{(p_x-\frac{eBy}{2})^2}{2\mu}+\frac{(p_y-\frac{eBx}{2c})^2}{2\mu}\\
&=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{eB}{2\mu c}L_z+\frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)
\end{aligned}
$$

其中我们把交叉项记作了角动量算符L_z，这一项的物理意义像$-\mu\cdot\vec{B}$磁矩。而第三项的物理意义是抗磁项。

直接求解这个方程也是不现实的，我们发现这里x,y的地位是对称的，这很难不让人想起极坐标，因此考虑极坐标下偏导表达式

$$
-\hbar^2\nabla^2=-\hbar^2(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho})-\frac{\hbar^2}{\rho^2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}
$$

然后新定义一个量,这个量是之前的ω_c的一半

$$
\omega_L=\frac{eB}{2\mu c}\equiv\frac{\omega_c}{2}
$$

那么现在我们就可以把哈密顿算符改到极坐标下

$$
H=\frac{p_\rho^2}{2\mu}+\frac{L_z^2}{2\mu\rho^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_L^2\rho^2+\omega_L L_z
$$

这里第一项对应拉普拉斯算符的括号内，第二项是拉普拉斯算符的括号外的项，这一项根据角动量算符的定义，又被改写了，这是令我们欣慰了，第三项对应之前距离平方项，第四项则是利用新定义的频率稍微改写了一下

现在哈密顿算符稍微好看了点，但是我们好像还是束手无策，但是没关系，我们注意到这个哈密顿跟角动量算符是对易的，选取$[L_z,H]=0$本征态。于是

$$
\Psi_E(\rho,\varphi)=R(\rho)e^{im\varphi}
$$

由于极坐标里求归一化时往往要用到像这样的$\int rf(r)dr$，因此方便起见，额外定义

$$\chi(\rho) \equiv \rho^{\frac{1}{2}} R(\rho)$$

于是代入Ψ到H里，作用掉φ相关的角动量算符，得到

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi'' + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}(m^2 - \frac{1}{4})\chi + \frac{1}{2}\mu\omega_L^2\rho^2\chi = (E - m\hbar\omega_L)\chi$$

即

$$\chi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E' - \frac{(m+\frac{1}{2})(m-\frac{1}{2})}{2\mu\rho^2} - \frac{1}{2}\mu\omega_L^2\rho^2)\chi = 0$$

其中$E' = E - m\hbar\omega_L$

理论上现在这就是一个一元二阶微分方程，我们直接级数展开是可以求解的，但是其实，在量子力学I里我们已经见过这个方程了，回忆一下三维谐振子

回忆三维谐振子

其面临的方程是

$$\chi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2)\chi = 0$$

其解为

$$\chi = r^{l+1} e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}} F(-n_r, l + \frac{3}{2}, \alpha^2 r^2)$$

其中F为合流超几何函数,能量本征值为$E = (2n_r + l + \frac{3}{2})\hbar\omega$

因此我们发现类比定义$l = |m| - \frac{1}{2}$可以类似求解

此时$E' = (2n_\rho + (|m| - \frac{1}{2}) + \frac{3}{2})\hbar\omega_L = (n_\rho + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + |m|\hbar\omega_L$

那么根据定义，原本的能量，跟其他规范下是形式一样的

$$E = E' + m\hbar\omega_L = (n_\rho + \frac{|m| + m}{2} + \frac{1}{2})\hbar\omega_c \equiv (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$$

以及解得的波函数

$$\chi(\rho) = \rho^{|m| + \frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha_L^2 \rho^2}{2}} F(-n_\rho, |m| + 1, \alpha_L^2 \rho^2)$$

其中特征长度平方倒数为$\alpha_L^2 = \frac{\mu\omega_L}{\hbar} = \frac{\mu\omega_c}{2\hbar} = \frac{eB}{2\hbar c}$

以及全部往回代得到总波函数定义

$$\Psi_E(\rho,\varphi) = e^{im\varphi}\rho^{|m|}e^{-\frac{\alpha_L^2\rho^2}{2}}F(-n_\rho,|m|+1,\alpha_L^2\rho^2)$$

至此，结束

作业四

1. 在对称规范下求简并度f

首先，我们给出要用到的重要定义。

$$\chi = \rho^{|m|+\frac{1}{2}}e^{-\frac{\alpha_L^2\rho^2}{2}}F\left(-n_\rho,|m|+1,\alpha_L^2\rho^2\right)$$

其中$\alpha_L^2 = \mu\omega_L/\hbar = eB/(2\hbar c) = eB\pi/(\hbar c)$

以及能量部分

$$E = E' + m\hbar\omega_L = (N+1)\hbar\omega_L = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

其中$N = 2n_\rho + |m| + m$，$n = n_\rho + \frac{|m|+m}{2}$

根据作业的提示思路，我们求导就行了，即求出最可几半径，然后考察该半径取最大值的时候的情况就行。这个应该好做一点。

首先，对于基态，量子数$n_\rho = 0$，$m = 0$，代入定义，合流超几何函数$F(0,1,\alpha_L^2\rho^2) = 1$，波函数简化为：

$$\chi(\rho) = \rho^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{\alpha_L^2\rho^2}{2}}.$$

于是根据定义有，概率密度：

$$dP = 2\pi\rho|\chi(\rho)|^2 d\rho = 2\pi\rho^2 e^{-\alpha_L^2\rho^2}d\rho.$$

前面的2π不管了，对后面的求导并令其为零：

$$\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2 e^{-\alpha_L^2\rho^2}\right) = 2\rho e^{-\alpha_L^2\rho^2} - 2\alpha_L^2\rho^3 e^{-\alpha_L^2\rho^2} = 0 \implies \rho_{\max} = \frac{1}{\alpha_L}.$$

根据提示，波函数能放在半径为R的圆盘内，需满足$\rho_{\max} < R$，即$\frac{1}{\alpha_L} < R$。考虑到α_L一般是以平方出现好一些，而这里各个量显然都是正的，于是两边平方得到

$$\frac{1}{\alpha_L^2} < R^2$$

代入α_L定义，得到

$$\frac{hc}{\pi eB} < R^2$$

移项并且代入面积定义，有

$$1 < \frac{\pi R^2 B}{hc/e} = \frac{AB}{hc/e}$$

右边正是我们的简并度定义，于是简并度得证

“有效面积”的角度

在教案中的思路，跟作业里的不太一样，作业的思路是，波函数存在一个平均面积，也就是有效面积的概念，那么圆盘的面积除以波函数平均面积，就是能容纳的波函数的数量。笔者认为，这个思路更自然，是所有人都会接受的，而作业里用最可几半径小于圆盘半径的思路证明不能容纳得下，这不一定是所有人都可以立即接受的。

但是现在问题来到，什么是平均半径？什么是平均面积

平均面积是，坐标算符作用两次于波函数的均值的开方，也就是均方位移开根号，$\sqrt{\langle\rho^2\rangle}$，对应的平均面积就是平均半径为圆心的圆，也就是$\pi\langle\rho^2\rangle$。这些的理解是，坐标算符作用两次于波函数，提取的就是一种面积量纲的东西，取平均，那么反映的就是一种对空间的占据情况，开方作为长度量纲，反映的就是波函数分布的的平均半径，画一个圆，就是$A_0 = \pi\langle\rho^2\rangle$，就是平均面积。

好吧其实这个定义可能也不是所有人都能接受的，但是笔者认为其实感觉还好。因为类比一下正态分布，均方根是离散程度，那么我们这里均方根也是离散程度，也是长度度量，就称为平均半径，笔者认为还是可以接受的。

给定的基态波函数（$m = 0$,$n_\rho = 0$）为：

$$\chi(\rho) = \rho^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha_L^2\rho^2}{2}}.$$

注意我们要首先计算归一化常数N，注意不需要再额外补ρ了，使得：

$$\int_0^\infty |\chi(\rho)|^2 \, d\rho = 1.$$

代入波函数：

$$\int_0^\infty \left(\rho^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha_L^2 \rho^2}{2}} \right)^2 \, d\rho = \int_0^\infty \rho e^{-\alpha_L^2 \rho^2} \, d\rho.$$

利用一个积分公式：

$$\int_0^\infty x e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a}, \quad (a > 0)$$

得到：

$$N^2 \cdot \frac{1}{2\alpha_L^2} = 1 \implies N = \sqrt{2}\alpha_L$$

那么现在归一化后的波函数为：

$$\chi(\rho) = \sqrt{2}\alpha_L \, \rho^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\alpha_L^2 \rho^2}{2}}$$

下面，根据定义，均方位移为，注意积分时候也不需要补ρ：

$$\langle \rho^2 \rangle = \int_0^\infty \rho^2 |\chi(\rho)|^2 \, d\rho$$

代入归一化波函数：

$$\langle \rho^2 \rangle = 2\alpha_L^2 \int_0^\infty \rho^3 e^{-\alpha_L^2 \rho^2} \, d\rho$$

利用积分公式：

$$\int_0^\infty x^3 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a^2}$$

得到：

$$\langle \rho^2 \rangle = 2\alpha_L^2 \cdot \frac{1}{2\alpha_L^4} = \frac{1}{\alpha_L^2}.$$

于是这样就出来了，有效面积是

$$A_0 = \pi \langle \rho^2 \rangle = \pi \cdot \frac{1}{\alpha_L^2} = \frac{\pi}{\alpha_L^2}.$$

我们的圆盘，假设系统总面积为A，则简并度就是圆盘里塞下多少个上面的有效面积：

$$f = \frac{A}{A_0} = \frac{A\alpha_L^2}{\pi}$$

代入α_L^2定义，就是

$$f = \frac{A}{A_0} = \frac{AB}{hc/e}$$

于是完毕！

2.$\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$规范下，假设盒子现在在y方向不是有限长度的，但是超过边界会导致势能大幅度上升，用微扰法解能量和中心y_0的变化

首先抄一下之前的结果，无微扰下，哈密顿量：

$$H_0 = \frac{1}{2m}\left((p_x + eBy)^2 + p_y^2\right).$$

波函数可写为$\psi(x, y) = e^{ik_x x}\phi(y)$，有关于$y$的谐振子方程：

$$H_0\phi(y) = \left[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(y - y_0)^2\right]\phi(y) = E_n\phi(y)$$

现在开始加入微扰，根据题目定义，在y方向边缘（$y \approx 0$或$y \approx L_y$），势能$V(y)$从零开始上升，并且假设$V(y) \approx V(y_0)$为常数，因此总哈密顿定义为：

$$H = H_0 + V(y)$$

根据微扰理论，一阶修正：

$$E_n^{(1)} = \langle n|V(y)|n\rangle \approx V(y_0)$$

其中$|n\rangle$是H_0的本征态（局域在y_0的高斯型波函数），由于其是归一化的，因此算出结果是很简单的
因此，总能量为：

$$E_{n,y_0} \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + V(y_0)$$

3. 计算边缘态电流

坏了，笔者没学过这块什么边缘电流的知识，真头一回听说。但是笔者还真见过Hellmann定理，这个也很好证明，并且之前读的论文里还有关于这个的在含时波函数里的错误解读，然后给出了正确做法(多原子体系非绝热动力学的近似理论方法. 化学进展. 2012. 1105-1119)，好在题目定义清晰，做起来应该是不难的。

由H的表达式：

$$H = \frac{1}{2m}\left((\hbar k_x + eBy)^2 + p_y^2\right) + V(y)$$

按照题目里的提示，对$\hbar k_x$求导：

$$\frac{\partial H}{\partial(\hbar k_x)} = \frac{1}{m}(\hbar k_x + eBy)$$

那么按照HF定理有

$$\frac{\partial E_n}{\partial(\hbar k_x)} = \langle n|\frac{1}{m}(\hbar k_x + eBy)|n\rangle.$$

考虑电流密度的定义，AI表示，电流密度算符定义为$\mathbf{J} = -e\mathbf{v}$，题目表示要对面积进行积分，那就把积分号填上：

$$I_x = -e\int \langle n|v_x|n\rangle dy$$

此外速度算符v_x本身就是$\frac{1}{m}(\hbar k_x + eBy)$
因此由 Hellmann 定理：

$$I_x = -e\frac{\partial E_n}{\partial(\hbar k_x)}$$

下面就是把能量的形式代入进去直接开始求导了，根据$E_n \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + V(y_0)$和$y_0 = -\frac{\hbar k_x}{eB}$，有：

$$\frac{\partial E_n}{\partial(\hbar k_x)} = \frac{\partial\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + V(y_0)}{\partial(\hbar k_x)} = \frac{\partial V(y_0)}{\partial y_0}\cdot\frac{\partial y_0}{\partial(\hbar k_x)} = -\frac{1}{eB}\frac{\partial V(y_0)}{\partial y_0}$$

因此就拿到了电流的表达式

$$I_x = \frac{e}{eB}\frac{\partial V(y_0)}{\partial y_0} = \frac{1}{B}\frac{\partial V(y_0)}{\partial y_0}$$

这就跟经典图像对的上，结束。