Слабосвязанные электроны во внешнем магнитном поле

И. В. Мамсуров[1], Ф. Х. Чибирова[2a]

[1] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра теоретической физики. 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.* [2] *Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л. Я. Карпова (НИХФИ). 105064, Москва, ул. Воронцово Поле, д. 10.*
E-mail: [a] *chibir@cc.nifhi.ac.ru*

Исследовалось поведение электрона в сферически-симметричной потенциальной яме во внешнем магнитном поле. Получено трансцендентное уравнение для спектра энергии. Приближенно определена энергия низшего (связанного) состояния. Найдены волновая функция и ток вероятности электрона.

PACS: 03.65.Nk, 03.65.Ge.
Ключевые слова: магнитное поле, потенциальная яма, энергия связи, волновая функция.
Статья поступила 09.04.2007, подписана в печать 02.07.2008.

Введение

Квантовые нерелятивистские системы во внешних электромагнитных полях всегда представляли большой интерес, поскольку описывающие их модели применимы ко многим квантовомеханическим явлениям. Особенно это относится к связанным электронным состояниям. К примеру, хорошо известно, что квантовый эффект Холла связан с существованием в соответствующих образцах слабосвязанных электронных состояний. Нерелятивистские электроны во внешних магнитных полях также ответственны за такие макроскопические квантовые явления, как, например, сверхпроводимость [1]. Магнитные поля скорее всего оказывают существенное влияние на слабосвязанные электроны в сингулярных потенциалах дефектов в твердых телах [2], особенно в тонких пленках [3]. Влияние магнитных полей на слабосвязанные электронные состояния в двухмерных моделях изучалось в работе [4]. Сюда же можно отнести такие явления, как нарушение четности, эффект Ааронова–Бома [5] и др. В работе [6] исследовалось поведение электрона в постоянном однородном магнитном поле при наличии δ-образного притягивающего потенциала в модели трех пространственных измерений. Там же был получен нетривиальный результат для плотности тока вероятности слабосвязанного электронного состояния, который имеет сходство с «блиноподобными» экранирующими вихревыми токами в высокотемпературных сверхпроводниках.

В настоящей работе исследовался более общий случай поведения электрона во внешнем однородном магнитном поле в присутствии сферически-симметричной прямоугольной потенциальной ямы конечного радиуса. Расчеты проводились в предположении малости этого радиуса по сравнению с магнитной длиной $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$. В первом приближении по параметру малости $\xi = R^2/2a^2$ было получено трансцендентное уравнение для энергетического спектра электрона, а также приближенное значение для энергии связанного состояния. Также в нулевом приближении была получена волновая функция связанного состояния электрона и вычислено значение плотности тока вероятности, который, как и в [6], оказался имеющим ненулевую циркуляцию вокруг оси, ориентированной по магнитному полю, и сильно «сжатым» в перпендикулярной к нему плоскости.

Уравнение Паули

Рассмотрим электрон, находящийся в сферически-симметричной потенциальной яме вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leqslant R, \\ 0, & r > R, \end{cases}$$

в присутствии однородного магнитного поля H, направленного вдоль оси z. Векторный потенциал запишем в цилиндрических координатах ρ, ϕ, z, в симметричной калибровке:

$$A_\phi = \frac{H\rho}{2}, \quad A_\rho = A_z = 0.$$

Запишем уравнение Паули:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t, \boldsymbol{r}) = \hat{H}\psi(t, \boldsymbol{r}), \tag{1}$$

где гамильтониан в цилиндрических координатах имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial}{\rho\partial\rho}\left(\frac{\rho\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\rho^2\partial\phi^2}\right] - \frac{i\hbar\omega}{2}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{m\omega^2}{8}\rho^2 + U(\sqrt{\rho^2 + z^2}) + \mu\sigma_3 H, \tag{2}$$

где

$$\omega = \frac{|e|H}{mc}, \quad \mu = \frac{|e|\hbar}{2mc}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

m и e — масса и заряд электрона. Нас интересуют стационарные решения уравнения (1)

$$\psi(t, \boldsymbol{r}) = e^{-iEt/\hbar}\psi_E(\boldsymbol{r}),$$

где E — энергия электрона. При этом координатную часть волновой функции целесообразно искать в следующем виде [6]:

$$\psi_E(\boldsymbol{r}) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp_z \sum_{l=-\infty}^{+\infty}\sum_{n_\rho=0}^{\infty} C_{En_\rho lp_z}\psi_{n_\rho lp_z}(\boldsymbol{r}). \tag{3}$$

Здесь n_ρ — радиальное квантовое число, l — проекция орбитального момента на ось z, а p_z — проекция импульса на ось z. При этом волновые функции в правой части выражения (3) являются собственными функциями гамильтониана (2) в отсутствие сферически-симметричного потенциала [7]:

$$\psi_{n_\rho l p_z}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\frac{e^{ip_z z/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{e^{il\phi}}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{a}I_{n_\rho l}(\rho^2/2a^2)\begin{pmatrix}1+s\\1-s\end{pmatrix},$$

где $s=\pm 1$ — сохраняющееся квантовое число спина электрона, $a=\sqrt{\hbar/m\omega}$ — магнитная длина, а функции Лагерра

$$I_{n_\rho l}(x) = \frac{1}{\sqrt{(n_\rho+|l|)!n_\rho!}}e^{-x/2}x^{|l|/2}Q_{n_\rho}^{|l|}(x)$$

выражаются через одноименные обобщенные полиномы.

Умножая обе части (1) на $\psi_{N_\rho L P_z}$ (здесь соответствующие квантовые числа обозначены большими буквами), перенеся член, содержащий потенциал $U(\boldsymbol{r})$, вправо, а все остальные слагаемые влево и интегрируя по всем пространственным координатам, получим

$$C_{EN_\rho LP_z}\left(\hbar\omega\left(N_\rho+\frac{|L|+L+1+s}{2}\right)+\frac{P_z^2}{2m}-E\right)=$$
$$=\frac{U_0}{\pi}\int\limits_{-A}^{A}dp_z\sum_{n_\rho=0}^{N}C_{En_\rho Lp_z}\frac{1}{P_z-p_z}\frac{1}{a^2}\times$$
$$\times\int\limits_0^R\rho d\rho I_{n_\rho L}(\rho^2/2a^2)I_{N_\rho L}(\rho^2/2a^2)\sin\left(\frac{P_z-p_z}{\hbar}\sqrt{R^2-\rho^2}\right). \quad (4)$$

Отметим, что пределы интегрирования и суммирования здесь конечны. Наличие параметров обрезания A и N связано с тем, что при больших значениях соответствующих квантовых чисел волновые функции дают пренебрежимо малый вклад в сумму и интеграл, что в свою очередь вызвано быстрыми осцилляциями экспоненциальных множителей, фигурирующих в волновых функциях, и такими же осцилляциями полиномов Лагерра при $n_\rho\to\infty$:

$$Q_{n_\rho}^{|l|}(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{x/2}x^{-|l|/2-1/4}n_\rho^{|l|/2-1/4}\times$$
$$\times\cos[2\sqrt{n_\rho x}-(2|l|+1)\pi/4]+O(n_\rho^{|l|/2-3/4}).$$

Причем параметры обрезания A и N подчиняются следующим неравенствам: $AR<\hbar$, $\sqrt{N}R<a$. Учитывая малый радиус потенциальной ямы по сравнению с магнитной длиной $R^2/a^2\ll 1$, разложим произведение функций Лагерра в правой части (4) в ряд по параметру $\rho^2/2a^2$, сохранив в разложении слагаемые нулевого и первого порядка малости. Учитывая конечные пределы в интеграле по p_z, также положим $\sqrt{R^2-\rho^2}(P_z-p_z)/\hbar\ll 1$. Тогда, интегрируя по ρ и введя обозначение $U_0R^3=\lambda$, получим следующий результат:

$$C_{EN_\rho 0P_z}\left(\hbar\omega\left(N_\rho+\frac{1+s}{2}\right)+\frac{P_z^2}{2m}-E\right)=$$
$$=\frac{\lambda}{\pi\hbar a^2}\int\limits_{-A}^{A}dp_z\sum_{n_\rho=0}^{N}C_{En_\rho 0p_z}\left[\frac{1}{3}-\frac{2}{15}\xi(1+n_\rho+N_\rho)\right],$$
$$L=0,$$

$$C_{EN_\rho LP_z}\left(\hbar\omega\left(N_\rho+\frac{|L|+L+1+s}{2}\right)+\frac{P_z^2}{2m}-E\right)=$$
$$=\frac{\lambda}{\pi\hbar a^2}\int\limits_{-A}^{A}dp_z\sum_{n_\rho=0}^{N}C_{En_\rho Lp_z}\left[\frac{2}{15}\xi\sqrt{(n_\rho+1)(N_\rho+1)}\right],$$
$$L=\pm 1, \quad (5)$$

где $\xi=m\omega R^2/2\hbar$. При всех остальных значениях L правая часть (4) в первом приближении равна нулю. Это означает, что соответствующие коэффициенты $C_{En_\rho Lp_z}$ также равны нулю при $L\neq 0,\pm 1$.

Спектр энергии

Поскольку нас интересует низший энергетический уровень, рассмотрим только случай $L=0$. Коэффициенты $C_{En_\rho 0p_z}$ будем искать в следующем виде [6]:

$$C_{En_\rho 0p_z}=C_E\frac{1-\frac{2}{5}\xi(1/2+n_\rho)}{\hbar\omega\left(n_\rho+\frac{1+s}{2}\right)+\frac{p_z^2}{2m}-E}. \quad (6)$$

Подставляя (6) в (5) и отбрасывая слагаемые, пропорциональные ξ^2, получим соотношение для спектра энергии

$$1=\frac{\lambda}{3\pi\hbar a^2}\int\limits_{-A}^{A}dp_z\sum_{n_\rho=0}^{N}\frac{1-\frac{4}{5}\xi(1/2+n_\rho)}{\hbar\omega\left(n_\rho+\frac{1+s}{2}\right)+\frac{p_z^2}{2m}-E}.$$

Поскольку интеграл по p_z сходится, заменим в нем конечные пределы интегрирования на бесконечные. Тогда, проведя интегрирование, окончательно имеем [6]

$$1=\frac{\sqrt{2m}}{3\hbar a^2}\lambda\sum_{n_\rho=0}^{N}\frac{1-\frac{4}{5}\xi(1/2+n_\rho)}{\sqrt{\hbar\omega\left(n_\rho+\frac{1+s}{2}\right)-E}}. \quad (7)$$

Это уравнение можно решить графически (см. графическое решение аналогичного уравнения в работе [8]). При этом решения будут определяться точками пересечения горизонтальной прямой $3\hbar a^2\sqrt{\hbar\omega}/\sqrt{2m}\lambda$ с графиком функции

$$f(x)=\sum_{n_\rho=0}^{N}\frac{1-\frac{4}{5}\xi(1/2+n_\rho)}{\sqrt{n_\rho+\frac{1+s}{2}-x}},\ x=E/\hbar\omega.$$

При увеличении N график $f(x)$ смещается вверх, но одновременно поднимается вверх и горизонтальная прямая, поскольку λ, как видно из неравенств для параметров обрезания, уменьшается с увеличением N. Поэтому корни уравнения (7) весьма слабо зависят от значения параметра обрезания. График функции $f(x)$, как видно из приведенного выражения, при заданном N будет иметь вертикальные асимптоты при значениях аргумента, равных $n_\rho+(1+s)/2$, к которым график нашей функции будет приближаться слева. Если сферический потенциал рассматривается как малое возмущение ($\lambda\ll\hbar^2a/m$), горизонтальная прямая будет пересекать график немного левее указанных асимптот. Тогда спектр энергии можно представить в виде

$$E=E_{n_\rho s}=\hbar\omega\left(n_\rho+\frac{1+s}{2}\right)-\epsilon_{n_\rho s},\ 0<\epsilon_{n_\rho s}\ll\hbar\omega.$$

В частности, для низшего уровня, имея в виду, что он реализуется при $n_\rho = 0$, $s = -1$, получаем следующий результат:

$$E_{\min} = -\frac{2m\lambda^2}{9\hbar^2 a^4}\left(1 - \frac{2}{5}\xi\right).$$

Первое слагаемое в данном выражении совпадает с результатом, полученным в [6], если учесть, что наша константа λ равна одноименной константе, использованной в [6], умноженной на $3\hbar^2/8\pi m$.

Волновая функция и ток вероятности

Найдем также в нулевом приближении по ξ волновую функцию $\psi_E(\boldsymbol{r})$ для низшего энергетического уровня. В этом случае в разложении произведения функций Лагерра в (4) учтем лишь слагаемое, не содержащее ξ. Тогда правая часть (4) будет отлична от нуля только при $L = 0$. В выражении для коэффициентов $C_{En_\rho 0p_z}$ (6) надо отбросить слагаемое, пропорциональное ξ. Волновая функция в нулевом приближении по ξ будет задаваться выражением (3), в котором в сумме по l присутствует лишь слагаемое с $l = 0$:

$$\psi_{E,s=-1} = \frac{1}{2\pi a\sqrt{\hbar}} C_E \times \\ \times \sum_{n_\rho=0}^{N} \int_{-A}^{A} dp_z \, \frac{1}{\hbar\omega n_\rho + \frac{p_z^2}{2m} - E} e^{ip_z z/\hbar} I_{n_\rho 0}(\rho^2/2a^2).$$

Поскольку интеграл и сумма будут сходящимися, заменим в них конечные пределы на бесконечные. Коэффициент C_E можно найти из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_\rho=0}^{\infty} |C_{En_\rho l p_z}|^2 = 1.$$

Снова учтем, что нас интересует низшее (связанное) состояние, т. е. в выражении для спектра $E = E_{n_\rho s}$ надо положить $s = -1$ и $n_\rho = 0$. В итоге, используя обозначение

$$C = \left[\sum_{n_\rho=0}^{\infty} \frac{1}{(\hbar\omega n_\rho - E_{\min})^{3/2}}\right]^{-1/2},$$

окончательно получим

$$\psi_{E_{\min},s=-1} = C\left(\frac{\sqrt{m}}{\pi^3 a^2 \hbar |E_{\min}|\sqrt{2}}\right)^{1/2} \times \\ \times \exp\left(-\sqrt{2m|E_{\min}|}\frac{\theta(z)z}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{4\hbar}\right),$$

где $\theta(z) = 1\ (-1)$ при $z > 0\ (< 0)$.

Используя известное выражение для плотности тока вероятности

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) - \frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\psi^*\psi,$$

получим следующий результат:

$$j_\phi = -\frac{eHA^2\rho}{2\sqrt{2m}\pi^3 a^2 c\hbar |E_{\min}|}\exp\left(-2\sqrt{2m|E_{\min}|}\frac{\theta(z)z}{\hbar}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{m\omega\rho^2}{2\hbar}\right),$$

$$j_\rho = j_z = 0.$$

Выражения для волновой функции электрона в нулевом приближении и плотности тока вероятности в том же приближении, будучи решениями более общей задачи, подтверждают результат, полученный в [6] (см. формулу (27) указанной работы), где вычисления проводились для потенциала δ-образной формы, а векторный потенциал магнитного поля задавался в калибровке Ландау.

Заключение

Таким образом, установлено, что присутствие внешнего магнитного поля при наличии потенциальной ямы конечной глубины (так же, как и в случае δ-образного потенциала) вызывает появление своеобразного связанного энергетического состояния электрона, ток вероятности которого обладает отличной от нуля циркуляцией вдоль направления поля. Данный факт представляет значительный интерес для объяснения многих квантово-механических явлений, прежде всего таких, как высокотемпературная сверхпроводимость.

Авторы выражают благодарность проф. В. Р. Халилову за ценные замечания и полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке совместного исследовательского проекта Национального научного совета Тайваня (N 95WFD0400022) и РФФИ (ННС-а-89500.2006.2), программы «Инициатива по предотвращению распространения» Министерства энергетики США (DOE IPP) (контракт N 94138 с Брукхевенской национальной лабораторией), а также частично программы Президента России поддержки ведущих научных школ (грант НШ-3312.2008.2, И.В.М.).

Список литературы

1. *Wilczek F.* // Fractional and Anyon Superconductivity. Singapore, 1990.
2. *Chibirova F.Kh.* // Mod. Phys. Lett. 2005. **B19**, N 23. P. 1119.
3. *Чибирова Ф.Х.* // ФТТ. 2001. **43**, № 7. С. 1239.
4. *Chibirova F.Kh., Khalilov V.R.* // Mod. Phys. Lett. 2005. **A20**, N 9. P. 663.
5. *Aharonov Y., Bohm D.* // Phys. Rev. 1959. **115**. P. 485.
6. *Khalilov V.R., Chibirova F.Kh.* // Int. J. Mod. Phys. 2006. **A21**, N 15. P. 3171.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М., 1974.
8. *Khalilov V.R., Chibirova F.Kh.* // J. Phys. 2007. **A40**. P. 6469.

Weakly bound electrons in an external magnetic field

I. V. Mamsurov[1], **F. Kh. Chibirova**[2a]

[1] *Department of Theoretical Physics, Faculty of Physics, Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*
[2] *Karpov Institute of Physical Chemistry, Vorontsovo Pole, 10, Moscow 105064, Russia.*
E-mail: [a] *chibir@cc.nifhi.ac.ru.*

Electron behavior in a spherically symmetric potential well in the presence of an external magnetic field is studied. The transcendental equation for the energy spectrum is derived. The energy of the bound state is approximately calculated. The electron wave function and the probability current are found.

PACS: 03.65.Nk, 03.65.Ge.
Keywords: magnetic field, potential well, binding energy, wave function.
Received 9 April 2007.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 1(2009)

Сведения об авторах

1. Мамсуров Игорь Владиславович — к. ф.-м. н., научн. сотр.; тел.: 939-31-77.
2. Чибирова Фатима Христофоровна — к. ф.-м. н., ст. научн. сотр., зав. лабораторией; e-mail: chibir@cc.nifhi.ac.ru.