

**EXAMEN DE FÍSICA ATÓMICA Y MOLECULAR
SEGUNDA SEMANA (MARTES 03 DE JUNIO 2014)**

JAVIER AZNAR

Problema 1. Cuando un electrón libre que se mueve en el plano $\{X, Y\}$ es sometido a un campo magnético estático cuya dirección coincide con el eje Z , los niveles energéticos que puede ocupar están cuantificados y se denominan *niveles de Landau*. Se trata de estudiar el problema estableciendo el hamiltoniano correspondiente, integrando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que resulta y determinando las funciones de onda y los niveles de energía con las técnicas matemáticas desarrolladas en el Apéndice II de los apuntes.

1. RESUMEN DEL PLANTEAMIENTO EN LA FASE PRESENCIAL DE LA
RESOLUCIÓN DEL EXAMEN

Durante las dos horas de la prueba presencial, se realizó una argumentación intuitiva de la forma del Hamiltoniano.

Dado que el campo magnético desvía la trayectoria del electrón, pero no modifica su energía, se razonó que la forma del Hamiltoniano debería ser similar a la de una partícula libre, es decir

$$(1.1) \quad \mathcal{H} = \frac{\vec{p}^*{}^2}{2m}$$

En la ecuación (1.1) se utiliza un momento que designamos como p^* para diferenciarlo del de un electrón libre. Este momento p^* consistirá en el momento lineal p más un factor que de cuenta de la influencia del campo magnético sobre el electrón.

$$(1.2) \quad p^* = p + q \rightarrow \mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\vec{p} + \vec{q})^2$$

Este término q veremos que es $e\vec{A}$, donde \vec{A} es el operador potencial vector, tal que su rotacional $\vec{B} = (0, 0, B)$.

Una vez obtenido el Hamiltoniano, planteamos la ecuación de Schrödinger

$$(1.3) \quad \mathcal{H}\psi = E\psi$$

$$(1.4) \quad \psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

Mediante esta separación pasaremos de una ecuación diferencial de tres variables a tres ecuaciones diferenciales de una sola variable, simplificando el problema.

1.1. Obtención del Hamiltoniano. Empezamos considerando la ecuación de movimiento del electrón en un campo magnético:

$$(1.5) \quad m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{v} \times \vec{B}$$

El campo magnético lo podemos expresar en función de un potencial vectorial a través de

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

El lagrangiano viene dado por

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 - e\vec{v} \cdot \vec{A}$$

de donde obtenemos el momento canónico

$$(1.6) \quad \vec{p} = m\vec{v} + e\vec{A}$$

La relación $\vec{p} = m\vec{v}$ es la definición del momento, pero no es una *ley física* que relacione la magnitud dinámica \vec{p} con la magnitud cinemática \vec{v} . La aparición del un término vectorial en el potencial en la relación entre el momento y la velocidad hace necesario distinguir entre diferentes tipos de momento, del mismo modo que es necesario distinguir entre diferentes tipos de energía.

En presencia de un potencial vectorial, la cantidad $m\vec{v}$ ya no puede considerarse como el momento total, sino que sólo da cuenta del *momento cinético*. La cantidad $e\vec{A}$ la llamamos *momento potencial* y la suma de los dos, $\vec{p}^* = \vec{p} + e\vec{A}$ es el *momento total*. La energía cinética depende del momento cinético y no del momento total.

A partir de la relación (1.6) obtenemos el Hamiltoniano como

$$\mathcal{H} = \vec{p} \cdot \vec{v} - \mathcal{L}$$

Usando

$$\vec{v} = \frac{1}{m} (\vec{p} + e\vec{A})$$

tenemos

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2$$

Un campo magnético uniforme es invariante respecto a traslaciones espaciales y respecto a rotaciones alrededor del eje definido por la dirección del campo. Dado que la descripción del campo magnético a partir del potencial vectorial no es única, tenemos libertad para seleccionar un potencial vector que den lugar al mismo campo magnético.

Uno de los posibles potenciales vectores es:

$$(1.7) \quad \vec{A} = (0, Bx, 0)$$

o de forma alternativa

$$(1.8) \quad \vec{A} = (-By, 0, 0)$$

que intercambia las direcciones x e y .

La descripción del campo magnético a partir de un potencial vectorial no es única, por lo que es necesario seleccionar un *gauge*. Los potenciales vectoriales de la forma (1.7) o (1.8) se denominan *gauge de Landau*. Una tercera posibilidad es el *gauge circular*

$$(1.9) \quad \vec{A} = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$$

Aunque las funciones obtenidas al utilizar uno u otro *gauge* difieran, todas las propiedades físicas observables son invariantes a los cambios de *gauge*.

Usaré el *gauge* de Landau ya que conduce a unas expresiones formales en la forma matemática más simple:

$$(1.10) \quad \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - i \frac{e\hbar B}{m} x \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2m} x^2$$

El segundo término relaciona el movimiento en las direcciones x e y , lo que tiene sentido si tenemos en cuenta que un electrón sometido a la influencia del campo magnético sigue una trayectoria circular.

El último término es un potencial magnético parabólico que recuerda al oscilador armónico.

Es útil reescribir el hamiltoniano (1.10) introduciendo la *frecuencia de Larmor* o la *frecuencia de ciclotrón*.

$$(1.11) \quad \omega_L = \frac{eB}{m}$$

Esta es la frecuencia angular con la que un electrón orbita un campo magnético en mecánica clásica.

Con esta notación, el hamiltoniano (1.10) toma la forma:

$$(1.12) \quad \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - i\hbar\omega_L \cdot x \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2}m\omega_L^2 \cdot x^2$$

A partir de aquí tenemos la ecuación de Schrodinger planteada y tenemos que empezar a solucionarla.

$$(1.13) \quad \mathcal{H}\psi = E\psi$$

1.2. Separación de variables. Tal y como se sugiere en el texto que acompaña el problema del examen, vamos a resolver la ecuación de Schrödinger en coordenadas cartesianas.

Suponemos que la solución la podemos separar de la siguiente manera

$$(1.14) \quad \psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$$

Explicitando la ecuación de Schrödinger (1.13),¹

$$(1.15) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - i\hbar\omega_L \cdot x \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{1}{2}m\omega_L^2 \cdot x^2 \psi = E\psi$$

Al introducir (1.14) en la ecuación (1.13), tenemos

$$(1.16) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(Y(y)Z(z) \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + X(x)Z(z) \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + X(x)Y(y) \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right) - i\hbar\omega_L X(x)Z(z) \cdot x \frac{\partial Y(y)}{\partial y} + \frac{1}{2}m\omega_L^2 \cdot x^2 X(x)Y(y)Z(z) = EX(x)Y(y)Z(z)$$

Hemos cambiado las derivadas parciales por derivadas ordinarias, ya que las funciones $X(x)$, $Y(y)$ y $Z(z)$ dependen sólo de una variable. Dividiendo toda la ecuación por $\psi = XYZ$, tenemos

$$(1.17) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} \right) - i\hbar\omega_L \cdot x \frac{1}{Y(y)} \frac{\partial Y(y)}{\partial y} + \frac{1}{2}m\omega_L^2 \cdot x^2 = E$$

Sabemos que $|\psi(x, y, z)|^2$ expresa la probabilidad de encontrar el electrón en la posición (x, y, z) del espacio. Suponemos que el espacio es homogéneo e isótropo y el campo \vec{B} es uniforme en todo el espacio. Por tanto, todos los puntos del espacio son equivalentes (bajo traslaciones y rotaciones alrededor del eje z). Si $|\psi|^2$ se anulara en algún punto, podríamos aplicar traslaciones y rotaciones a ψ desde cualquier otro punto del espacio, y obtendríamos como resultado que ψ también debería anularse. Es decir:

$$|\psi(r_0)|^2 = 0 \iff \psi = 0 \quad \forall \vec{r} \iff \nexists \text{ electrón}$$

¹ $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ en coordenadas cartesianas.

Pero si la probabilidad de encontrar el electrón en cualquier punto del espacio es nula, significa que no tenemos electrón. Así pues, $\psi \neq 0$ en ningún punto del espacio y podemos dividir la ecuación (1.16) para obtener (1.17) sin temor.

Ahora podemos mover todos los términos que sólo dependen de z a un lado de la ecuación

$$(1.18) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} \right) - i\hbar\omega_L \cdot x \frac{1}{Y(y)} \frac{dY(y)}{dy} + \frac{1}{2} m\omega_L^2 \cdot x^2 - E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2}$$

Dado que son variables independientes, la única manera de que se verifique esta igualdad en (1.18) es que cada uno de los miembros sea igual a una constante:

$$(1.19) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} = C$$

$$(1.20) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} \right) - i\hbar\omega_L \cdot x \frac{1}{Y(y)} \frac{dY(y)}{dy} + \frac{1}{2} m\omega_L^2 \cdot x^2 - E = C$$

La solución para la ecuación en z es una onda plana.

$$(1.21) \quad \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} - C \frac{2m}{\hbar^2} Z(z) = 0 \Rightarrow Z(z) = e^{ik_z z} \Rightarrow C = -\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Como el potencial vector que hemos elegido no depende de la componente y , escribimos como solución para la función en $Y(y)$ una onda plana:

$$(1.22) \quad Y(y) = e^{ik_y y}$$

Introduciendo esta función en la ecuación (1.20), tenemos

$$(1.23) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{X(x)} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2m} k_y^2 + \hbar\omega_L k_y \cdot x + \frac{1}{2} m\omega_L^2 \cdot x^2 - E + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = 0$$

Finalmente tenemos una ecuación diferencial de una sola variable para resolver el problema. Agrupando términos, la convertimos en:

$$(1.24) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \left[\frac{1}{2} m\omega_L^2 \left(x + \frac{\hbar k_y}{\omega_L m} \right)^2 - E + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right] X(x) = 0$$

1.3. Niveles energéticos. La ecuación (1.24) es la ecuación de Schrödinger para un oscilador armónico con frecuencia de oscilación ω_L y centrado en $x = \frac{\hbar k_y}{m\omega_L}$.

Los valores *efectivos* de la energía \mathcal{E} son los valores para el oscilador armónico,

$$(1.25) \quad \mathcal{E} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_L = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

por lo que los valores propios para la energía resultan:

$$(1.26) \quad E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_L + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

El primer término de la energía tiene valores discretos -cuantizados- y corresponde al movimiento del electrón en el plano $X - Y$, que describe trayectorias circulares y que es análogo a un oscilador armónico. El segundo término toma valores continuos y corresponde al movimiento del electrón en la dirección paralela al campo (si lo hay).

1.4. Resolución de la ecuación de Schrödinger. Vamos a transformar la ecuación (1.24) para convertirla en una ecuación hipergeométrica y aplicar las técnicas del Apéndice II para solucionarla.

Para simplificar la notación,

$$x_0 \equiv -\frac{\hbar k_y}{m\omega_L} \quad ; \quad \mathcal{E} \equiv E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Con lo que la ecuación del oscilador armónico queda

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \left[-\frac{m^2 \omega_L^2}{\hbar^2} (x - x_0)^2 + \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} \right] X(x) = 0$$

Y con un nuevo cambio:

$$\kappa \equiv \frac{m\omega_L}{\hbar} \quad ; \quad \xi \equiv \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}$$

queda finalmente:

$$(1.27) \quad X'' - \kappa^2 (x - x_0)^2 X + \xi X = 0$$

Denominamos $x_* \equiv x - x_0$ y a continuación suponemos que la solución en x puede escribirse de la forma

$$(1.28) \quad X(x) = \chi(x) e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2}$$

Con este cambio:

$$(1.29) \quad \begin{aligned} X' &= \chi' e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} - \kappa x_* \chi e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} \\ X'' &= \chi'' e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} - \kappa x_* \chi' e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} - \kappa \chi e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} - \\ &\quad - \kappa x_* \left(\chi' e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} - \kappa x_* \chi e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} \right) = \end{aligned}$$

$$(1.30) \quad = e^{-\frac{\kappa}{2} x_*^2} \left[\chi'' - 2\kappa x_* \chi' + (\kappa^2 x_*^2 - \kappa) \chi \right]$$

Introduciendo la segunda derivada de la solución en x , $X''(x)$ en (1.27), tenemos:

$$(1.31) \quad \begin{aligned} e^{-\frac{\kappa}{2}x_*^2} [\chi'' - 2\kappa x_* \chi' + \chi (\kappa^2 x_*^2 - \kappa - \kappa^2 x_*^2 + \xi)] &= 0 \\ e^{-\frac{\kappa}{2}x_*^2} [\chi'' - 2\kappa x_* \chi' + \chi (-\kappa + \xi)] &= 0 \end{aligned}$$

Como $e^{-\frac{\kappa}{2}x_*^2} \neq 0$ para cualquier valor de x_* , la ecuación (1.31) queda finalmente como

$$(1.32) \quad \chi'' - 2\kappa x_* \chi' + (\xi - \kappa) \chi = 0$$

La ecuación (1.32) tiene la forma de una ecuación hipergeométrica

$$(1.33) \quad \sigma f'' + \tau f' + \lambda f = 0$$

con

$$\begin{aligned} \sigma &= 1 \\ \tau &= -2\kappa x_* \\ \lambda &= \xi - \kappa \end{aligned}$$

Una vez obtenidos los polinomios concretos con los que hemos transformado la ecuación de Schrödinger en una ecuación hipergeométrica, el desarrollo de la resolución de esta ecuación en el Apéndice II proporciona la solución al problema.