

Trabalho	
Título em Português:	Análise de um sistema de dois elétrons submetidos a um campo magnético uniforme
Título em Inglês:	Analysis of a two-electron system subjected to a uniform magnetic field
Autor:	Matheus Takayuki Matsubara
Instituição:	Universidade de São Paulo
Unidade:	Instituto de Física de São Carlos
Orientador:	Hai Guoqiang
Área de Pesquisa / SubÁrea:	Física da Matéria Condensada
Agência Financiadora:	FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

Análise de um sistema de dois elétrons submetidos a um campo magnético uniforme

Matheus Takayuki Matsubara

Hai Guo-Qiang

Universidade de São Paulo

maths.matsubara@gmail.com

Objetivos

Este trabalho tem como objetivo analisar o sistema de dois elétrons em 2D sob um campo magnético uniforme, utilizando coordenadas de centro de massa e relativa, e comparar estas energias obtidas por diagonalização com aquelas previstas pelos pseudopotenciais de Haldane no nível mais baixo de Landau (LLL).

Métodos e Procedimentos

Analisou-se no plano $(x,y) = (r, \varphi)$, com campo magnético uniforme $\mathbf{B} = B\hat{z}$, no gauge simétrico $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \frac{\mathbf{r}}{2} = \frac{B}{2} \left(\frac{-y}{2}, \frac{x}{2}, 0 \right)$. O hamiltoniano de um elétron de massa m_e e carga $-e$ é dado por:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(-i\nabla + \frac{1}{2}\hat{z} \times \mathbf{r} \right)^2 \quad (1)$$

Utilizou-se o sistema CGS e, como unidades, para comprimento magnético l_b e para a energia, $\hbar\omega_c$.

A equação de Schrödinger correspondente, em coordenadas polares (r, φ) é dada por:

$$\hat{H}(\mathbf{r})\psi_{nm}^s(r, \varphi) = E_{nm}^s \psi_{nm}^s(r, \varphi) \quad (2)$$

Sendo E_{nm}^s e ψ_{nm}^s , seus autovalores e autovetores, respectivamente. E, sua solução resulta nos chamados níveis de Landau,

$E_{nm}^s = E_L^{(n,m)}$, dados por:

$$E_L^{(n,m)} = n + \frac{m+|m|+1}{2} \quad (3)$$

Para $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Com a correspondente função de onda, dada por:

$$\psi_{nm}^s = \phi_m(\varphi) R_{nm}^s(r) \quad (4)$$

Utilizou-se, para a análise do sistema de dois elétrons, coordenadas do centro de massa e relativas:

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \text{ e } \mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{2} \quad (5)$$

Nessas coordenadas, o hamiltoniano se torna:

$$\hat{H}_p(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{H}_{cm}(\mathbf{R}) + \hat{H}_{rel}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

Sendo que $\hat{H}_{rel}$ é dado por:

$$\hat{H}_{rel}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(-i\nabla_{\mathbf{r}} + \frac{1}{2}\hat{z} \times \mathbf{r} \right)^2 + \frac{\gamma_b}{|\mathbf{r}|} \quad (7)$$

O hamiltoniano para o CM é semelhante a (1), sendo suas energias dadas por $E_{cm} = N + \frac{M+|M|+1}{2}$, $N=0,1,2,\dots$, $M=0,\pm 1,\pm 2,\dots$. Para o movimento relativo, é dada por:

$$\hat{H}_{rel}(\mathbf{r})\psi_{nm}^{rel}(r, \theta) = E_{nm}^{rel} \psi_{nm}^{rel}(r, \theta) \quad (8)$$

Sendo sua autofunção, dada por:

$$\psi_{nm}^{rel}(r, \theta) = \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2}} R_{nm}^{rel}(r) \quad (9)$$

Sendo $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, e sua função radial dada por:

$$R_{nm}^{rel}(r) = \sqrt{\frac{n!}{(n+|m|)!}} \left(\frac{r^2}{2} \right)^{\frac{|m|}{2}} \times h_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{2} \right) e^{-\frac{r^2}{4}} \quad (10)$$

Para $n = 0, 1, 2, \dots$. E, $h_n^{|m|}$, definida como:

$$h_n^{[m]}(x) = \sum_0^{n'} a_{nn'} \cdot \sqrt{\frac{n'! (n + |m|)!}{n! (n' + |m|)!}} L_{n'}^{[m]}(x) \quad (11)$$

Em que, $a_{nn'}$ foram calculados, conforme a seguinte equação linear:

$$\sum_0^{n'} (E_L(n, m) - E_{nm}^{rel}) \delta_{nn'} a_{nn'} + \gamma_b M_{nn'}^{[m]} a_{nn'} = 0 \quad (12)$$

Sendo que $M_{nn'}^{[m]} = \int R_{n'm}^S R_{nm}^S dr$.

Resultados

O sistema bidimensional de dois elétrons em um campo magnético uniforme usando coordenadas relativas e do CM convergiu ao se utilizar $n' = 15$. Com isso, plotou-se o gráfico da energia total do sistema em função de γ_b para $N=0$, $M \leq 0$, $n = 0, 1$ e 2 , e $m = -1, -2, -3, \dots, -9$, conforme a figura 1.

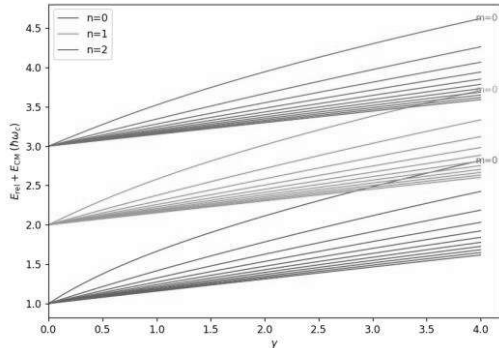


Figura 1. Gráfico das energias relativa e do CM em função de γ_b para $n=0, 1$ e 2 , e $m = 0, -1, \dots, -9$.

No LLL, calculamos os pseudopotenciais de Haldane, V_m , para $n'=0$ na equação (12), $N=0$, $M \leq 0$, e comparamos com o resultado obtido com a diagonalização para valores ímpares de m , $m = -1, -3, -5$ e -7 , conforme a figura 2.

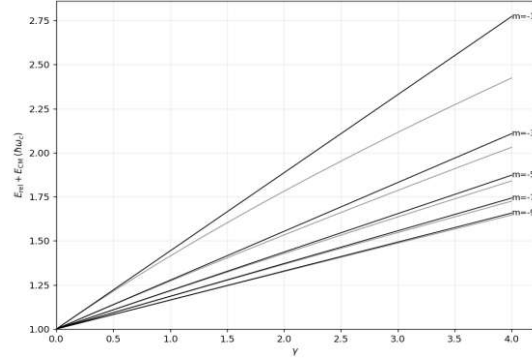


Figura 2. Em preto, as energias obtidas usando pseudopotenciais de Haldane e em azul, as energias utilizando coordenadas do CM e relativas, para o LLL.

Conclusões

A diagonalização convergiu para $n'=15$. A projeção no LLL via pseudopotenciais de Haldane reproduz as energias para γ_b pequenos e o sistema melhora com o aumento de $|m|$. Assim, a abordagem mostra-se adequada para a análise de sistemas eletrônicos 2D em campo magnético forte. Os autores declaram não haver conflito de interesses.

Agradecimentos (opcional)

Agradeço a FAPESP pela bolsa de iniciação científica, a qual possibilitou esta pesquisa.

Referências

- [1] R. B. Laughlin, "The Quantum Hall Effects" (New York: Springer, 1987); R. B. Laughlin, Phys. Rev. B 27, 3383 (1983).
- [2] G.-Q. Hai, "Sub-Landau levels in two-dimensional electron system in magnetic field", arXiv:2406.06212 (2024); G.-Q. Hai, unpublished (2021)

Analysis of a two-electron system subjected to a uniform magnetic field

Matheus Takayuki Matsubara

Hai Guo-Qiang

University of São Paulo

maths.matsubara@usp.br

Objectives

This work aims to analyze a two-electron system in 2D under a uniform magnetic field, using center-of-mass and relative coordinates, and to compare the energies obtained by diagonalization with those predicted by Haldane's pseudopotentials in the lowest Landau level (LLL).

Materials and Methods

We work on plane $(x, y) = (r, \varphi)$, with a uniform magnetic field $\mathbf{B} = B\hat{z}$, in symmetric gauge $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \frac{\mathbf{r}}{2} = \frac{B}{2} \left(\frac{-y}{2}, \frac{x}{2}, 0 \right)$. The hamiltonian of a single electron of mass m_e and charge $-e$ is:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(-i\nabla + \frac{1}{2}\hat{z} \times \mathbf{r} \right)^2 \quad (1)$$

We use the CGS system, the magnetic length l_b is the unit of length and the cyclotron energy $\hbar\omega_c$, is the unit of energy. The corresponding Schrödinger equation in polar coordinates (r, φ) is:

$$\hat{H}(\mathbf{r})\psi_{nm}^s(r, \varphi) = E_{nm}^s \psi_{nm}^s(r, \varphi) \quad (2)$$

Where E_{nm}^s and ψ_{nm}^s , are the eigenvalues and eigenfunctions, respectively. Its solution yields the Landau levels, $E_{nm}^s = E_L^{(n,m)}$ is:

$$E_L^{(n,m)} = n + \frac{m+|m|+1}{2} \quad (3)$$

for $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ and $n = 0, 1, 2, \dots$. With wavefunction:

$$\psi_{nm}^s = \phi_m(\varphi) R_{nm}^s(r) \quad (4)$$

For two electrons we use center-of-mass and relative coordinates:

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \quad \mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{2} \quad (5)$$

In these variables, the Hamiltonian becomes

$$\widehat{H}_p(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \widehat{H}_{cm}(\mathbf{R}) + \widehat{H}_{rel}(\mathbf{r}) \quad (6)$$

With:

$$\widehat{H}_{rel}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(-i\nabla_{\mathbf{r}} + \frac{1}{2}\hat{z} \times \mathbf{r} \right)^2 + \frac{\gamma_b}{|\mathbf{r}|} \quad (7)$$

The CM Hamiltonian is analogous to (1); its energies are $E_{cm} = N + \frac{M+|M|+1}{2}$, $N=0, 1, 2, \dots$, $M=0, \pm 1, \pm 2, \dots$. For the relative motion we solve

$$\widehat{H}_{rel}(\mathbf{r})\psi_{nm}^{rel}(r, \theta) = E_{nm}^{rel} \psi_{nm}^{rel}(r, \theta) \quad (8)$$

whose eigenfunction is:

$$\psi_{nm}^{rel}(r, \theta) = \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2}} R_{nm}^{rel}(r) \quad (9)$$

for $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, and the radial part:

$$R_{nm}^{rel}(r) = \sqrt{\frac{n!}{(n+|m|)!}} \left(\frac{r^2}{2}\right)^{\frac{|m|}{2}} \times h_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{2}\right) e^{-\frac{r^2}{4}} \quad (10)$$

For $n = 0, 1, 2, \dots$ And, $h_n^{|m|}$ is:

$$h_n^{|m|}(x) = \sum_0^{n'} a_{nn'} \cdot \sqrt{\frac{n'! (n+|m|)!}{n! (n'+|m|)!}} L_{n'}^{|m|}(x) \quad (11)$$

and the coefficients $a_{nn'}$ are obtained from the linear system:

$$\sum_0^{n'} (E_L(n, m) - E_{nm}^{rel}) \delta_{nn'} a_{nn'} + \gamma_b M_{nn'}^{|m|} a_{nn'} = 0 \quad (12)$$

where $M_{nn'}^{|m|} = \int R_{n'm}^s R_{nm}^s dr$.

Results

The 2D two-electron system in a uniform magnetic field, expressed in CM and relative coordinates, converged for $n' = 15$. We then plotted the total energy as a function of γ_b for $N=0$, $M \leq 0$, $n = 0, 1$ and 2 , and $m = -1, -2, -3, \dots, -9$, according to figure 1.

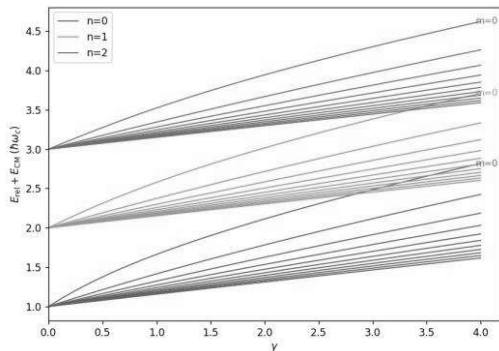


Figure 1. Relative and CM energies as a function of γ_b for $n=0, 1$ and 2 , and $m = 0, -1, \dots, -9$.

In the LLL we computed Haldane's pseudopotentials, V_m , for $n'=0$ in equation (12), $N=0$, $M \leq 0$, and compared them with the diagonalization for odd m , namely $m = -1, -3, -5, -7$, according to figure 2.

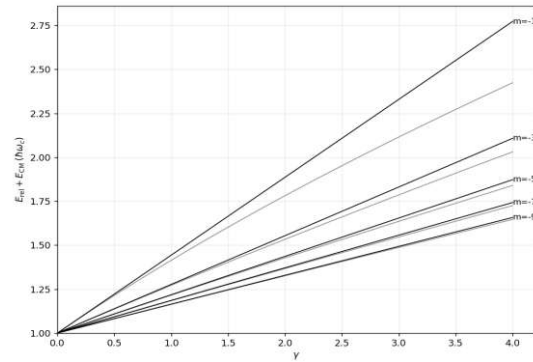


Figure 2. Black: energies obtained using Haldane pseudopotentials. Blue: energies using CM/relative coordinates in the LLL.

Conclusions

Diagonalization converged for $n' = 15$. Projection onto the LLL via Haldane pseudopotentials reproduces the energies for small γ_b , and the agreement improves as $|m|$ increases. Thus, the approach is suitable for analyzing 2D electronic systems in strong magnetic fields. The authors declare no conflict of interest.

Acknowledgments (optional)

We thank FAPESP for the undergraduate research scholarship that made this work possible.

References

- [1] R. B. Laughlin, "The Quantum Hall Effects" (New York: Springer, 1987); R. B. Laughlin, Phys. Rev. B 27, 3383 (1983).
- [2] G.-Q. Hai, "Sub-Landau levels in two-dimensional electron system in magnetic field", arXiv:2406.06212 (2024); G.-Q. Hai, unpublished (2021)