

Tudományos Diákköri Dolgozat

Kocsis Bence

A MÁGNESES KVANTUM ANTIDOT SAJÁTÁLLAPOTOK

Témavezető:

Cserti József

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Budapest, 2002. november 1.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Az antikör probléma	7
2.1. A Schrödinger egyenlet megoldása	9
2.1.1. A körön belüli megoldás	9
2.1.2. A körön kívüli megoldás	10
2.1.3. A megoldások összeillesztése	11
2.2. A WKB közelítés	13
2.2.1. Körön kívüli mozgás, pozitív körüljárás	16
2.2.2. Körön kívüli mozgás, negatív körüljárás	18
2.2.3. Zérus impulzusmomentum, $m = 0$	20
2.2.4. Mágneses peremállapotok $0 < m < 2s$	21
2.2.5. Nagy energiájú, $2s$ -nél nagyobb pozitív impulzusmo- mentumú állapot	26
2.2.6. Nagy energiájú negatív impulzusmomentumú állapot	26
2.3. Összefoglalás	30
3. Az általános anti-amőba	32
3.1. A vektorpotenciál	32
3.2. Mértéktranszformáció	33
3.3. Kvantálás	35
4. Összegzés, további tervek	41
5. Köszönetnyilvánítás	42
6. Appendix A: vektorpotenciál	43
7. Appendix B: Mértéktranszformáció	46
8. Irodalomjegyzék	49

Kivonat

A kvantum biliárd a 70¹-es évek óta élénk tanulmányi terület. A nanotechnológia fejlődésével mára már realitás a 2 dimenziós elektrongáz (2DEG) kísérleti megvalósítása, ami újabb lehetőségeket kínál a kvantummechanika ellenőrzésére. Egy ilyen jól számolható feladat az inhomogén mágneses térbe helyezett 2DEG, amit szupravezető vagy ferromágnes segítségével lehet kivitelezni.

A dolgozatban egy olyan rendszert tekintettem, amelyben a B tér egy korlátos csillagszerű tartományban zérus, azon kívül konstans értékű. Speciálisan a körre vonatkozó sajátértékprobléma (antikör) egzaktul megoldható. Ismertetem a kvantummechanikai és a WKB megoldást és ezek kapcsolatát. A szemiklasszikus közelítésben osztályozhatóak a pályák és a fázistér 6 tartománya különböztethető meg. A fenti esetre építve a differenciális formák segítségével sikerült az általános alakú antidotra is megoldási módszert konstruálni. Ez két mértéktranszformáción alapul, amivel a vektorpotenciál a belülről kör belsejében illetve a körülírt körön kívül az antikörnél kapottba megy át. A sajátállapotok az antikör bázisában numerikus gondok nélkül számíthatók. A kapott eredmények felhasználhatók a legújabb kísérleti eredmények ellenőrzéséhez.

1. Bevezetés

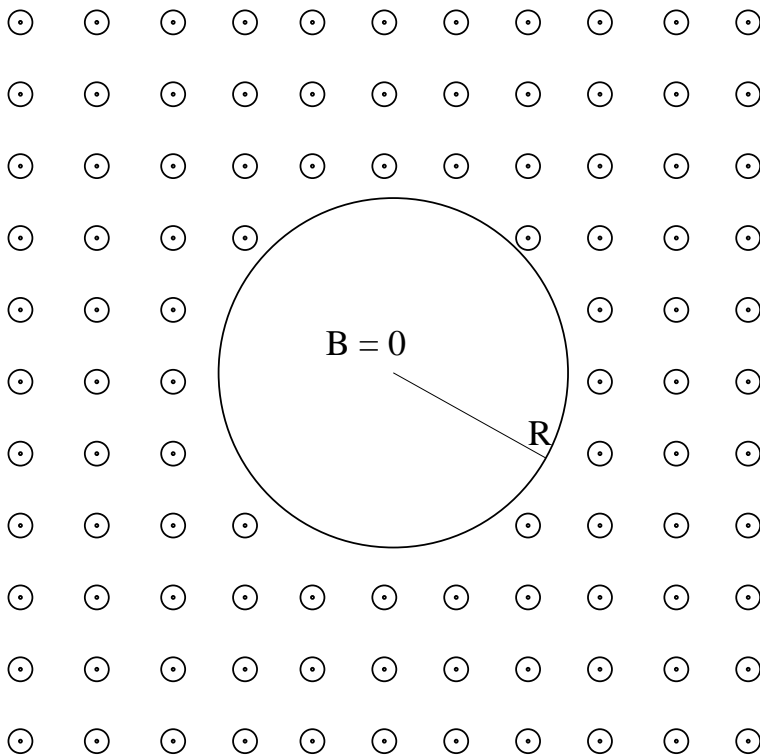
Az elmúlt évtizedek nanotechnológiai fejlődése lehetővé tette a két dimenziós elektrongáz (2DEG) kísérleti megvalósítását. A GaAs és GaAsAl félvezetők határán arra merőlegesen olyan effektív potenciál jön létre, amellyel a merőleges gerjesztések nagy energiás állapotoknak felelnek meg. A hőmérséklet ezért egy kritikus érték alá csökkentve az elektronok a határfelületre lesznek bebörtönözve.

Az elmúlt évek a 2DEG további bezárását tette lehetővé. Ezt a mezoszkópikus skálán beépített elektrosztatikus potenciál segítségével érték el, mint például a kvantum drótok, kvantum pöttyök vagy a kvantum gyűrűk. Ezen bezárt rendszerekben különös figyelmet tulajdonítottak az elektron transport viselkedés leírásának a kvantum Hall rezsimben, ahol az áramvezető felületi állapotok elsődleges szerepet játszanak a rezonáns alagúteffektus, az Aharonov-Bohm típusú oszcillációk, nemlokális magnetorezisztanciák, a Coulomb gát oszcillációk, stb. leírásában. A közelmúltban a térben inhomogén mágneses mezők alkalmazásával különböző változatos mágneses rendszereket javasoltak a 2DEG-re. Erre példa a szkennelő alakúteffektusos mikroszkóp litográfiai technikájára épülő mágneses kvantum pöttyök [1], a félvezetők által

réteges szerkezetben integrált ferromágneses anyagok, a mágneses szuperrácsok [2], a közönséges heterostruktúrákba beépített II-es típusú szupravezetők [3] és a molekulásugár epitaxiával növesztett nem sík felületű 2DEG rendszerek [4]. A különböző mágneses domének határa mentén létrejövő perem állapotok hatását a mágnetorezisztanciára kísérletben [5] igazolták.

Ezen rendszerek ugyan szoros analógiába állíthatók a megszokott elektrosztatikusan bezárt rendszerekkel, mégis elég változatos transzport viselkedést hoznak létre az elektron struktúrákat tekintve. Megmutatták, hogy a síkban lineárisan változó inhomogén mágneses térben az elektron áram csak a mező gradiensére merőlegesen jön létre [7]. Több csoport is vizsgálta a mágnesesen modulált 2DEG rendszerekben létrejövő meghatározott irányú kvantum transzportot [9] [10] [11] [12]. Ezen rendszert kísérletileg is realizálták és a megjósolt szemiklasszikus kommenzurabilitás effektust meg is figyelték [13]. Egy ehhez hasonló másik vizsgálatot is elvégeztek az összetett fermion elmélet segítségével [14], a térben inhomogén elektrosztatikus potenciál részleges kvantum Hall térben (pl. egy antidot rács) számolták ki az összetett fermion magnetotranszportot. Az összetett fermionok által érzékelt effektív mágneses tér függ az összetett fermionok sűrűségétől, ezért az antidot rács modulálja az effektív mágneses teret.

Ezen dolgozat a mágneses antidotok problémáját tárgyalja. Ezek olyan 2DEG rendszerek, ahol a mágneses tér egy korlátos összefüggő tartományon kívül van jelen, belül a mágneses tér zérus. (Lásd az 1. ábrát) A feladat inverz megfelelője a mágneses kvantum pötty (magnetic quantum dot) probléma, ahol a mágneses teret a korlátos zárt tartomány belsejében hozzák létre amit végtelen potenciálfal vagy valami egyéb helyfüggésű potenciál vesz körül. A dolgozatban tárgyalt rendszerben a B mágneses tér épp a tartomány komplementerében van jelen és pont azon belül tűnik el, ebből ered az antidot megnevezés. Azt a speciális esetet, amikor a mágneses teret nem tartalmazó tartomány egy kör antikörnek, amikor ellipszis antiellipszisnek nevezzük. Hogy kihangsúlyozzuk a speciális esettől való eltérést, olykor az antidot helyett "antiamőba" kifejezést használjuk. Az antiamőbára vonatkozó megkötés csak az, hogy a $B = 0$ tartomány legyen korlátos és csillagszerű, azaz "egyik pontjából nézve konvex". A klasszikus mechanikai elektron homogén mágneses térben a Lorentz erő hatására körpályán mozog, és az azt nem tartalmazó üres térben egyenesvonalú egyenletes mozgást végez. Az ellentétes irányú homogén mágneses tér esetén az elektron érdekes peremállapotai a "snake-orbit"-ok, amik a határ körül körívek mentén, "kígyóvanalban" haladó elektronpályáknak felelnek meg. Az antidot esetén a klasszikus elektronpálya váltakozva körívekből és egyenes szakaszokból épül fel. Nagy külső mágneses tér esetén a belső üres tartományból indítva az elektront, a mágneses tér hatására kis sugarú körön kanyarodik vissza, ezért



1. ábra. A mágneses antikör probléma

az antidot problémát a kvantum-billiárd egyfajta realizációjának is tekintik.

A közelmúltban az antikör elektronsajátállapotait többen vizsgálták [6]. Ebben a rendszerben a mágneses felületek határa mentén olyan áramhordozó perem állapotok létrejöttét fedezték fel, amely hasonlatos a mágneses minták szélén létrejövő közönséges peremállapotokhoz. A mágneses perem állapotokról azonban megmutatták, hogy meglehetősen eltérő tulajdonságokkal bírnak, mint a közönségesek. Egy figyelemre méltó megfigyelés, hogy ha egy kisméretű vezető közepén egy kvantum antidot található, akkor a mágnetovezetésre aperiodikus oszcilláció lesz jellemző a közismert Aharonov-Bohm típusú periodikus oszcilláció helyett. Vizsgálták továbbá a mágneses gyűrű elektronállapotait [16], ahol azt találták, hogy a korábbi esetektől eltérően a mágneses tér növelésével alapállapotú impulzusmomentum-átmenetek valósulhatnak meg.

A gyakran vizsgált fenti rendszerekben közös vonás, hogy magas szimmetriával rendelkező 2DEG konstrukciókat tekintenek, amelyben a sajátállapotok kiválóan szemléltethető szemiklasszikus módszerrel. Tudomásunk szerint átfogó kvantummechanikai számítás a nem szimmetrikus esetben már az ere-

deti kvantum pötty problémára is jóval kevesebb számban készült (stadion, véges mágneses ellipszis), hisz itt a kvantummechanikai tárgyalás nem redukálható egy-dimenziósra. Az ellipszis alakú kvantum dot esetében alkalmazott eljárás a Schrödinger egyenlet direkt megoldása volt a Bessel függvények bázisában. Az antiellipszis problémára való kiterjesztést ily módon nem tudták kivitelezni, hisz ott a sajátállapotok számításához rengeteg bázisfüggvényre lenne szükség. Kvantummechanikai számítás eddig kizárólag az antikörre [6] és a kvantum gyűrűre [16] készült.

Ezen dolgozatban az általános alakú kvantum antidot sajátértékprobléma megoldására javasolunk egy kivitelezhető eljárást. Ez – mint látni fogjuk – szorosan kapcsolódik az antikör megoldásához, ezért részletesen tárgyaljuk ezt a problémát és megalkotjuk az átfogó szemiklasszikus és kvantummechanikai leírást. Tudomásunk szerint a WKB számítás még erre a rendszerre nem készült, pedig ily módon könnyen megérthetjük az állapotok jellezőit és a fázistér szerkezetét. A kvantummechanikai tárgyalásban a szögfüggő megoldás az $e^{im\phi}$, ezt leválasztva a radiális egyenlet alapmegoldásait pedig a Bessel illetve a Kummer-függvények [18] segítségével lehet kifejezni [6]. Ez utóbbira vonatkozó, 2001-ben publikált [17] algoritmus használatával kvantitatív módon összehasonlíthatjuk az egzakt és a szemiklasszikus módszer eredményét. Az egyezés szinte tökéletes. Bemutatjuk a szemiklasszikus megoldásból kapott fázistérszerkezetet. Ezek alapján meg fogjuk állapítani, hogy az általános csillagszerű alakzatra vonatkozó megoldást milyen esetben várhatjuk jó függvénybázisnak. A dolgozat második részében az általános antidotra javasolunk egy megoldási módszert. Ehhez először megalkotjuk az azt létrehozó vektorpotenciált. Majd javasolunk két mértéktranszformációt, amivel csak az alakzat belülrít és körülírt köre által határolt gyűrűben fog eltérni az állapotegyenlet a kör állapotegyenletétől. Ezzel bebizonyítjuk a [16]-ban megfogalmazott sejtést, miszerint az energiaspektrum kritikusan függ a hiányzó fluxus kvantum számértékétől és sokkal kevésbé a mező geometriájától. Megmutatjuk, hogy alkalmazásképpen az antiellipszisre vonatkozó számítás lényeges, de ennek numerikus kivitelezésére még ezidáig nem volt időnk. Az antiellipszisre alkalmazva – a módszer numerikus realizációjának eredményességét egy nemzetközi folyóiratban szeretnénk hamarosan közzé tenni.

2. Az antikör probléma

Először az antikör probléma egzakt megoldását adjuk meg. Ehhez elsőként felírjuk a vektorpotenciált, ami az antikör mágneses terét hozza létre. A körön belüli illetve azon kívüli tartományokra más függvényalakot fogunk kapni, ezért a két esetben Schrödinger-egyenletet külön kezeljük. A kapott megoldásokból a határon való összeillesztésre vonatkozó feltétel segítségével kapjuk meg a lehetséges sajátértékeket és sajátfüggvényeket

Ismert vektorpotenciál esetén a nemkölcönható 2DEG-re vonatkozó Hamiltoni

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2M}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2M}(\mathbf{p}^2 + 2e\mathbf{A}\mathbf{p} + e[\mathbf{p}, \mathbf{A}] + e^2\mathbf{A}^2) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M}(\nabla^2 + \frac{2ie}{\hbar}\mathbf{A}\nabla + \frac{ie}{\hbar}\text{div}(\mathbf{A}) - \frac{e^2}{\hbar^2}\mathbf{A}^2) \end{aligned}$$

Az itt tekintett mágneses mező a síkra merőleges, egy R sugarú kör belsejében zérus, kívül konstans B értékű, azaz $B(r) = B_z(r) = B\theta(r - R)$, ahol $\theta(\cdot)$ a Heaviside egységugrásfüggvény. Belátjuk, hogy ezt szimmetrikus mértékben a következő divergenciamentes vektorpotenciál hoz létre

$$\mathbf{A}(r, \phi) = \frac{B}{2} \frac{r^2 - R^2}{r} \theta(r - R) \hat{\mathbf{e}}_\phi$$

hisz ennek rotációja

$$\begin{aligned} \text{rot}(\mathbf{A}(r, \phi)) &= (\partial_r(rA_\phi) - \partial_\phi(A_r)) \frac{\hat{\mathbf{e}}_z}{r} + \\ &(\partial_\phi(A_z) - \partial_z(rA_\phi)) \frac{\hat{\mathbf{e}}_r}{r} + (\partial_z(A_r) - \partial_r(A_z)) \hat{\mathbf{e}}_\phi \\ &= B\theta(r - R) \hat{\mathbf{e}}_z \end{aligned}$$

épp a kívánt mágneses teret adja.

Ennél szemléletesebb bizonyítás a Stokes törvény egyszerű alkalmazása. A feladat forgásszimmetriája miatt a vektorpotenciált polárkoordinátákban szögfüggetlennek keressük. Végezzünk el egy vonalintegrálást egy adott r sugarú körön.

$$\begin{aligned} \oint \mathbf{A} d\mathbf{s} &= \int \text{rot}(\mathbf{A}) d\mathbf{F} \\ \int_0^{2\pi} A_\phi r d\phi &= \int_0^r dr \int_0^{2\pi} r d\phi B(r) \\ 2\pi r A_\phi &= \pi(r^2 - R^2) B \theta(r - R) \\ A_\phi &= B \frac{r^2 - R^2}{2r} \theta(r - R) \end{aligned}$$

A megadott vektorpotenciál egyben divergenciamentes, ha az $A_r = 0$ választással élünk. A Hamiltoniba helyettesítve látható, hogy $H = \frac{1}{2M} (p_r^2 + (p_\phi + eA_\phi(r))^2)$ miatt az impulzusmomentum valóban meg fog maradni. A Hamilton operátor

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\nabla^2 + \frac{2ie}{\hbar} \frac{A_\phi \partial_\phi}{r} - \frac{e^2}{\hbar^2} A_\phi^2 \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\phi^2 + \frac{2ie}{\hbar} \frac{A_\phi \partial_\phi}{r} - \frac{e^2}{\hbar^2} A_\phi^2 \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial_\phi}{i} + \frac{e}{\hbar} r A_\phi \right)^2 \right] \end{aligned}$$

A Schrödinger-egyenlet az impulzusmomentummegmaradás miatt ϕ szerint szeparálható. A szögfüggés $e^{im\phi}$, ahol m egész. A Schrödinger egyenlet ebből

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \left(m + \frac{eB}{\hbar} \frac{r^2 - R^2}{2} \theta(r - R) \right)^2 \right] \psi(r) = E\psi(r)$$

A hosszúságegységet válasszuk $a = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ -nek, az energiaegységnek az $E_0 = \frac{\hbar^2}{2Ma^2} = \hbar \frac{eB}{2M} = \hbar \omega_C / 2$ (a ciklotronfrekvenciához tartozó energia fele) és legyen

$$s = \frac{1}{2} \frac{eB}{\hbar} R^2 = R^2 / 2 = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (1)$$

a körből hiányzó összes fluxus kvantum. ($\Phi_0 = h/e$) a fluxus kvantum.) Ez a paraméter, a "missing flux", a probléma egyetlen paraméterének választható, hisz a megadott egységekben a mágneses tér, körsugár, elemi töltés, elektron tömeg és a Planck állandónak csak eme kombinációja fordul elő. A későbbiekben tárgyalt általánosabb antiamőba esetében az amőba konkrét alakjától függetlenül ez lesz a nagy energiás ill. impulzusmomentumú állapotok egyetlen meghatározója. A Schrödinger-egyenlet tehát ebben a rendszerben

$$\left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \left(m + \left(\frac{r^2}{2} - s \right) \theta(r - R) \right)^2 + E \right] \psi(r) = 0$$

Figyelemre méltó, hogy $r > R = \sqrt{2s}$ esetén a Schrödinger egyenlet csupán annyiban különbözik az antidotot nem tartalmazó $R = 0$ -nak megfelelő homogén mágneses tér egyenletétől, hogy az effektív impulzusmomentum lecsökken $m^* = m - s$ az a körből hiányzó s fluxus értékével. A problémát ezzel átjátszottuk a mágneses kvantum dot problémára, amelyben

a kör belsejében van a konstans B mező. Ennek megoldása a Kummer-M és -U függvényekkel fejezhető ki a mágneses tartományban. Mivel a Kummer-M függvénynek a végtelenben, a Kummer-U-nak pedig a 0-ban van szingularitása ¹, ezért a mágneses kvantum dot peremfeltételeit a Kummer-M függvénnyel lehet kielégíteni. Ellenben az antidot esetén a mágneses tér a külső tartományban jelen van és belül zérus, ami a Kummer-U használatát fogja megkövetelni.

2.1. A Schrödinger egyenlet megoldása

Ebben az alfejezetben áttekintjük az antikörre vonatkozó Schrödinger-egyenlet általános megoldását. A szögfüggést a korábbiakban a forgásszimmetria következtében sikerült leválasztani. Itt már csak a sugárfüggő rész megoldását keressük. Ehhez külön kezeljük a körön belüli és a külső tartományt, majd a kapott általános megoldások szabad paramétereit a határra vonatkozó peremfeltételekkel fogjuk rögzíteni.

2.1.1. A körön belüli megoldás

A belső tartományban a vektorpotenciál eltűnik itt a 2DEG üres térnek megfelelő egyenletet kapjuk

$$\left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{m^2}{r^2} + E \right] \psi(r) = 0$$

Átszorozva r^2 -tel és áttérve a $\rho = \sqrt{E}r$ térváltozóra, a $\Psi(\rho) = \psi(r)$ függvényre a Bessel egyenletet kapjuk

$$[\rho^2 \partial_\rho^2 + \rho \partial_\rho + (\rho^2 - m^2)] \Psi(\rho) = 0$$

Az általános megoldása $J_m(\rho)$, $Y_m(\rho)$ Bessel és Neumann függvények lineáris kombinációja. Az eredeti hullámfüggvény általános megoldása így a $J_m(\sqrt{E}r)$, $Y_m(\sqrt{E}r)$ függvényekből keverhető ki. Mivel az egyenlet a belső tartományban érvényes, ezért olyan megoldást kell választanunk, ami az origóban nem szinguláris. A Bessel függvény megfelel ezen követelménynek. Az energia kvantáltsága a másik tartományban kapott megoldással való összeilleszthetőség feltételéből fog következni.

¹A Kummer $U(a,b,z)$ függvénynek $a > 0$ esetén csak a $z=0$ -ban, $a < 0$ -ra a végtelenben is szingularitása van. A hullámfüggvényben a Kummer függvény meg van szorozva egy $\exp(-r^2/4)$ -es faktorialis is, ami a Kummer-U esetén eltünteti a végtelenbeli szingularitást.

2.1.2. A körön kívüli megoldás

Most tekintsük a külső, mágneses teret is tartalmazó tartományt.

$$\left[\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \left(m^* + \frac{r^2}{2} \right)^2 + E \right] \psi(r) = 0$$

Elvégezve a négyzetre emelést.

$$\partial_r^2 \psi + \frac{1}{r} \partial_r \psi + \left(-\frac{m^{*2}}{r^2} + E - m^* - \frac{r^2}{4} \right) \psi = 0$$

Ha áttérünk az $x = r^2/2$ változóra és osztjuk az egyenletet $2x$ -szel

$$\partial_x^2 \psi + \frac{1}{x} \psi + \left(-\frac{1}{4} + \frac{E - m^*}{2x} - \frac{m^{*2}}{4x^2} \right) \psi = 0$$

A $w(x) = \sqrt{x} \psi(x)$ változóval ez nem más, mint

$$\partial_x^2 w + \left[-\frac{1}{4} + \frac{E - m^*}{2x} + \frac{\frac{1}{4} - \left(\frac{m^*}{2}\right)^2}{x^2} \right] w = 0$$

a Whittaker egyenlet, $\kappa = \frac{E - m^*}{2}$, $\mu = \pm \frac{|m^*|}{2}$ paraméterekkel [18]. Ennek a lineárisan független megoldásai a Kummer-M és -U függvényekkel fejezhető ki

$$w_1(x) = e^{-\frac{1}{2}x} x^{\frac{1}{2} + \mu} M\left(\frac{1}{2} + \mu - \kappa, 1 + 2\mu, x\right)$$

$$w_2(x) = e^{-\frac{1}{2}x} x^{\frac{1}{2} + \mu} U\left(\frac{1}{2} + \mu - \kappa, 1 + 2\mu, x\right)$$

A paraméterek behelyettesítésével az eredeti hullámfüggvényre az eredeti r helyváltozóval a következő megoldást kapjuk ²

$$\psi_1(r) = e^{-\frac{1}{4}r^2} r^{|m^*|} M\left(\frac{1 + |m^*| + m^* - E}{2}, 1 + |m^*|, \frac{r^2}{2}\right)$$

$$\psi_2(r) = e^{-\frac{1}{4}r^2} r^{|m^*|} U\left(\frac{1 + |m^*| + m^* - E}{2}, 1 + |m^*|, \frac{r^2}{2}\right)$$

A mágneses tér a mágneses kvantum antidot esetében a körön kívüli térrészben van jelen. A megoldások közül tehát a másodikat kell választani, hisz az a végtelenben lecseng. Az első megoldásban szereplő Kummer-M az $M(a, b, z) = \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(b)} e^z z^{a-b}$ aszimptotika szerint felrobban, ezért nem lehet alkalmas a megoldásra.

²Az egyenletekbe a μ behelyettesítésénél a + előjelet választottuk. A - előjellel a kifejezés Kummer transzformáltját kapjuk, ami egyenlő az itt megadott megoldással.[18]

2.1.3. A megoldások összeillesztése

Ezzel mindkét tartományban megkaptuk a Schrödinger egyenlet megoldását minden rögzített E -re: a belső tartományban a Bessel J , a kinti tartományban a Whittaker- W függvény volt az alkalmas választás. Lineáris differenciálegyenletről révén ezen függvények tetszőleges komplex konstanssal meg lehetnek szorozva. A határon azonban meg kell követelni a függvény és deriváltja folytonosságát.

$$\begin{aligned}\psi(r) &= \psi_1(r)\theta(R-r) + \psi_2(r)\theta(r-R) \\ \psi_1(R) &= \psi_2(R) \\ \left. \frac{d}{dr}\psi_1(r) \right|_R &= \left. \frac{d}{dr}\psi_2(r) \right|_R\end{aligned}\quad (2)$$

ahol $\psi_1(r) = A J_m(\sqrt{E}r)$, $\psi_2(r) = B e^{-\frac{1}{4}r^2} r^{|m^*|} U\left(\frac{1+|m^*|+m^*-E}{2}, 1+|m^*|, \frac{r^2}{2}\right)$
Ha képezzük a két feltétel hányadosát, akkor a tetszőleges A, B konstansok kiesnek és a megkötés az energiára fog vonatkozni.

$$\left. \frac{d}{dr} \ln \left[J_m(\sqrt{E}r) \right] \right|_{r=R} = \left. \frac{d}{dr} \ln \left[e^{-\frac{1}{4}r^2} r^{|m^*|} U\left(a, b, \frac{r^2}{2}\right) \right] \right|_{r=R}$$

azaz

$$\sqrt{E} \left. \frac{d}{dx} \ln J_m(x) \right|_{x=\sqrt{E}R} = -\frac{R}{2} + \frac{|m^*|}{R} + R \left. \frac{d}{dx} \ln U(a, b, x) \right|_{x=\frac{R^2}{2}}$$

A deriválást elkerülhetjük az [18] 13.4.25 azonosság felhasználásával

$$\begin{aligned}J'_m(x) &= J_{m-1}(x) - \frac{m}{x} J_m(x) \\ U'(a, b, x) &= U(a, b, x) - U(a, b+1, x)\end{aligned}$$

amivel

$$\sqrt{E} \frac{J_{m-1}(\sqrt{E}R)}{J_m(\sqrt{E}R)} - \frac{m}{r} = \frac{R}{2} + \frac{|m^*|}{R} - R \frac{U(a, b+1, s)}{U(a, b, s)}$$

Végül s -sel eliminiálva R -et, a kör sugarát:

$$\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{2s}} \frac{J_{m-1}(\sqrt{2sE})}{J_m(\sqrt{2sE})} + \frac{U(a(E), b+1, s)}{U(a(E), b, s)} - \left(\frac{1}{2} + \frac{|m^*| + m}{2s} \right) = 0$$

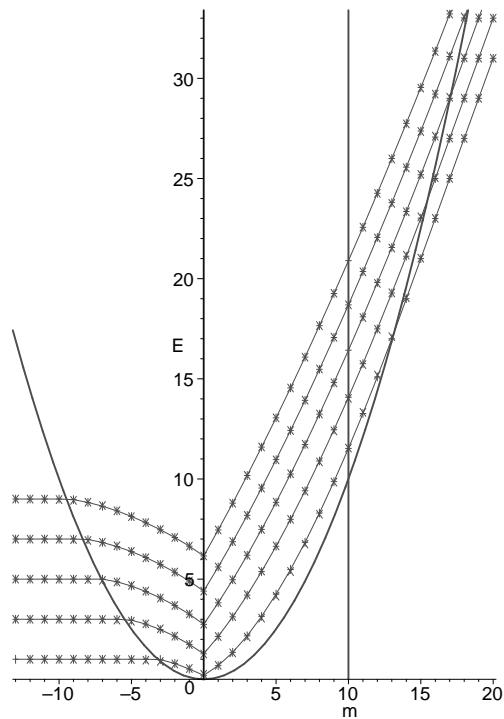
ahol explicit kiírtuk az a paraméter helyfüggését. Ezen egyenletnek keressük a zérushelyeit E és m függvényében.

Minden lehetséges egész m -hez megszámlálható sok energiamegoldást kaphatunk. Az egyetlen nehézséget U nehézkes numerikus implementációja okozza³. További gondot jelent, hogy a negatív a paramétertartományban a csökkenésével a függvényérték nagyon megnövekedhet. Nekünk ezek hányadosa fordul csak elő. A PARI-GP ingyenesen letölthető C programcsomag tartalmazza a legújabb Kummer- U algoritmust. Ez a rendszer matematikusok által elsősorban matematikusok számára lett kifejlesztve: többnyire a számelmélet, csoportelmélet, algebrai topológia és az elliptikus formák területén hasznos függvényeket tartalmazza. Nagy előnye a programnak, hogy a memóriakorláttól eltekintve tetszőleges pontossággal tud számolni, így az említett U/U osztás alul- vagy túlcsoportulás veszélye nélkül valósítható meg.

A gyökkereső algoritmust C++ nyelvben írtam meg. Négy különböző eljárást használtam: a szakaszfelező, a Newton-Raphson, a szakaszfelező technikával feljavított Newton-Raphson, és a szekáns módszert. Az algoritmusok 10^{-10} toleranciahatárhoz voltak állítva. Kezdeti feltételnek a programot alacsony energia próbaértékről indítottam, (pl. 0.5) majd automatikusan a következő szimulációk az előző megoldástól nagyobb (pl 0.1-el) értéktől indultak. A gondot az jelenti, hogy az egyenletünk osztásokat tartalmaz, ezért a Bessel függvény zérushelyei környékén figyelni kell az algoritmus helyes érzékenységének állítására. A szimuláció befejezése után remélhetjük, hogy nem "maradt ki" egy gyök sem. Változtatva a paramétereket, egymás utáni újraindítással a rutin többszörösen ellenőrizte alaposságát. A program egy Pentium 100-as PC-n volt futtatva, ami átlagosan 5 mp körül adott megoldást. A szimulálás kezdőértékének közelebbi megadása drasztikusan csökkentheti a számításhoz szükséges időt. A később tárgyalandó szemiklasszikus megoldás által jósolt szintekről indítva a gyökkeresés szintenként 0.1 mp-nél gyorsabban jutott eredményhez.

A 2. ábrán a lehetséges energia-impulzusmomentum értékeket ábrázoltuk. Az itt bemutatott egzakt megoldást x -el, a WKB közelítés értékeit $+$ -al jelöltük. Látható, az illeszkedés pontossága, a szemiklasszikus tárgyalásban kapott szintek szinte azonosak az egzakt eredménnyel. A WKB közelítés használata segít megérteni a kapott eredmények tényleges "fizikai" tartalmát. Mint ott látni fogjuk 6 tartomány különböztethető meg, amit egy parabola és két konstans impulzusmomentumú görbe különít el. Az $m^2/2s$ vonal a kör határán lévő effektív potenciál értéke, ettől kisebb energiájú pályák a kör

³Az $U(a,b,z)$ az origó kivételével egy végtelenszer differenciálható analitikus függvény, aminek a nullában $(b-1)$ -ed rendű pólusa van. Matematikai értelemben tehát egy kellemes függvény. A gondot az okozza, hogy a definíciója szerint Kummer- M és Γ függvények hányadosai összegeként állítható elő. Ez a gyakorlatban legtöbbször numerikusan nem kivitelezhető, gyakran teljesen más úton kapható numerikus közelítőeredmény. A Kummer függvények pontos gyakorlati előállítását általános esetben nagyon időigényes.[17]



2. ábra. Az energiasajátértékek impulzusmomentumfüggése $s=5$ esetén. Az egzakt kvantummechanikai megoldásból kapott értékeket X-el, a szemiklasszikus formula közelítőképlete által kapott pontokat + -al jelöltük. A különböző WKB tartományok határát vastagon szedett vonallal rajzoltuk: egy $m^2/2s$ parabolát, illetve az $m = 2s$ és az $m = 0$ -hoz rendelt függőleges egyeneseket.

területét elkerülő pozitív és negatív energiájú Landau-nívók, annál nagyobb energiájú pályák pedig azon kiterjedt nagyenergiájú állapotok, aminek legvalószínűbb értéke ugyan kívül van, de a belső tartományban sem elhanyagolható. Az $0 < m < 2s$ tartomány a mágneses peremállapotokhoz, az $m = 0$ a kör középpontján áthaladó klasszikus pályákhoz tartoznak. A + és x-el jelölt megoldások egyezése igazolja a fázistér ezen a felbontásának jogosságát. A hullámfüggvények tényleges képét majd a későbbiekben a konkrét esetek vizsgálatánál mutatjuk be.

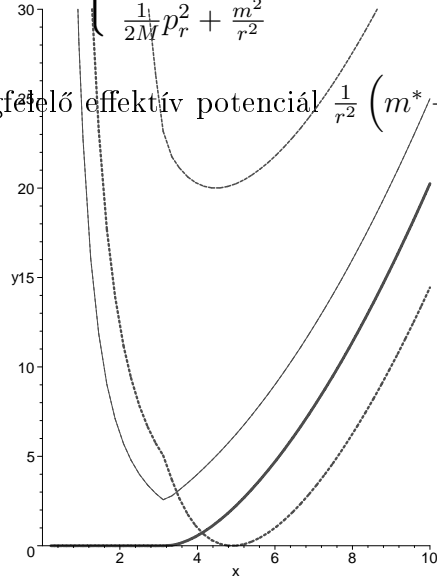
2.2. A WKB közelítés

A kör alakú antidot feladat hengersizmetrikus. Ez lehetővé tette a szög- és sugárfüggő részek szeparálását. A szögfüggő részre vonatkozó megoldás $e^{im\phi}$,

a sugárfüggést egy egydimenziós Schrödinger egyenletből egzaktul számíthatjuk. Mivel ez a feladat egydimenziós, lehetőség van a szemiklasszikus WKB közelítés alkalmazására is. A korábbiakban felírt Hamilton operátor

$$H = \begin{cases} \frac{1}{2M}p_r^2 + \frac{1}{r^2} \left(m^* + \frac{r^2}{2}\right)^2 & \text{ha } r \geq R \\ \frac{1}{2M}p_r^2 + \frac{m^2}{r^2} & \text{ha } r < R \end{cases}$$

Az ennek megfelelő effektív potenciál $\frac{1}{r^2} \left(m^* + \frac{r^2}{2}\right)^2$ a külső illetve m^2/r^2 a



3. ábra. Az effektív potenciál lehetséges alakjai. A potenciál szempontjából négy eset különböztethető meg, de ha a minimumhely a körön kívülre esik, akkor az állapot energiája függvényében további két eset jön be. A függőleges vonal a kör határát jelöli.

belső tartományban. Ismét elegendő csupán az s paramétert használni, hisz $m^* = m - s$, $s = R^2/2$ Rögzített m és s esetén potenciál folytonosan megy át a határon. (Ez nem meglepő hisz a vektorpotenciált éppen úgy vettük fel, hogy a határon zérus legyen és folytonos.) Az ábrán látható ennek lehetséges formái. Ennek megfelelően négy esetet különböztetünk meg, amit a számolás szempontjából érdemes külön kezelni. (Lásd a 3. ábrát) Lehetséges, hogy

- a potenciálnak a körön kívül pozitív minimuma van
- a potenciál a körön kívül felveszi a zérus értéket
- a potenciál a körön veszi fel a minimumát
- a potenciál a körön belül zérus, $m = 0$

Adott energia esetén klasszikusan gondolkodva az r_1 minimális és r_2 maximális sugarat adott energia esetén így kapjuk:

$$\frac{m^2}{r_1^2} = E = \frac{1}{r_2^2} \left(m^* + \frac{r_2^2}{2} \right)^2$$

Alkalmazzuk a Bohr-Sommerfeld kvantálást. A korábbiakban is használt egységrendszerben $p_r = \sqrt{E - V_{eff}(r)}$

$$\left(n + \frac{1}{2} \right) 2\pi = 2 \int_{r_1}^{r_2} p_r dr = 2 \int_{r_1}^{\sqrt{2s}} \sqrt{E - \frac{m^2}{r^2}} dr + 2 \int_{\sqrt{2s}}^{r_2} \sqrt{E - \frac{1}{r^2} \left(m^* + \frac{r^2}{2} \right)^2} dr \quad (3)$$

Ezen kifejezés csak akkor használható, ha az elektron mindkét tartományban előfordul. Ha a potenciál a körön kívül veszi fel a minimumát, akkor lehetséges, hogy az elektron csak a minimum környezetében mozog és mindvégig csak a kinti potenciált érzékeli. Az integrálást minden esetben analitikusan el tudjuk végezni. Integrálási változónak a $y = \sqrt{\frac{V(r)}{E}}$ -t fogjuk használni. A benti tartományban ez a helyettesítés mindig elvégezhető, hisz itt $V(r)$ szigorúan monoton függvénye a sugárnak. Kívül viszont a potenciálnak lehet egy minimuma, ilyenkor attól befelé illetve kifelé különböző lesz a helyettesítés formulája. A szélső érték tehát egy releváns mennyiség lesz, érdemes meghatározni.

$$0 = \frac{d}{dr} \left[\frac{1}{r^2} \left(m^* + \frac{r^2}{2} \right)^2 \right] = -\frac{r}{4} + \frac{m^{*2}}{r^3}$$

$$\frac{r^2}{2} = |m^*|$$

A potenciál minimumát a külső tartományban keressük, ezért a bal oldal nagyobb, mint s . Ebből látható, hogy a $|m^*| < s$, $0 \leq m \leq 2s$ esetén nem lesz megoldás, ergo a külső tartományban is monoton az integrandus, a potenciálminimum a körre fog esni. Ezek a pályák tehát a pozitív körüljárású mágneses perem állapotok pályái. Ellenkező esetben, ha $m > 2s$ vagy $m < 0$, akkor a potenciálnak kívül lesz minimuma. Ezekben az esetekben előfordulhat, hogy a részecske a minimum körül kis amplitúdóval rezeg mindig a körön kívül marad. Ezek tehát a nagy pozitív illetve a negatív impulzusmomentumú pályák, amikor a ciklotron sugár nagyobb a kör sugaránál. Erre vonatkozó érdekes kérdés, hogy ilyenkor a szemiklasszikus közelítésben az antidot nélküli Landau nívókat kell-e kapnunk. Érdekes továbbá, hogy a negatív perdületű esetben már rögtön a legkisebb perdület-abszolútértéknél

is lehet olyan energiaérték, ahol a körön kívüli részben kerülgeti az elektron az üres disket.

Mindezeknek megfelelően hat esetet fogunk megkülönböztetni. Ezeket a továbbiakban részletesen is megvizsgáljuk.

1. körön kívüli mozgás, pozitív körüljárás $m \geq 2s$, $E < \frac{m^2}{2s}$
2. körön kívüli mozgás, negatív körüljárás $m < 0$, $E < \frac{m^2}{2s}$
3. zérus impulzusmomentum, $m = 0$
4. mágneses peremállapotok $0 < m < 2s$
5. nagy energiájú pozitív impulzusmomentumú állapot $m \geq 2s$, $E > \frac{m^2}{2s}$
6. nagy energiájú negatív impulzusmomentumú állapot $m < 0$, $E > \frac{m^2}{2s}$

2.2.1. Körön kívüli mozgás, pozitív körüljárás

$m \geq 2s$, $E < \frac{m^2}{2s}$ Ilyenkor a (3) integrálás csak a második tagot tartalmazza. Áttérve a potenciálváltozóra $y = \frac{1}{\sqrt{Er}} \left| m^* + \frac{r^2}{2} \right|$ az abszolútérték elhagyható, és $\frac{r^2}{2} - \sqrt{E}yr + m^* = 0$. Az y minimuma éppen $\sqrt{\frac{2m^*}{E}}$, maximuma 1.

$$r = \begin{cases} \sqrt{E} \left(y + \sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}} \right) & \text{ha } r \geq \sqrt{2m^*} \\ \sqrt{E} \left(y - \sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}} \right) & \text{ha } r < \sqrt{2m^*} \end{cases} \quad (4)$$

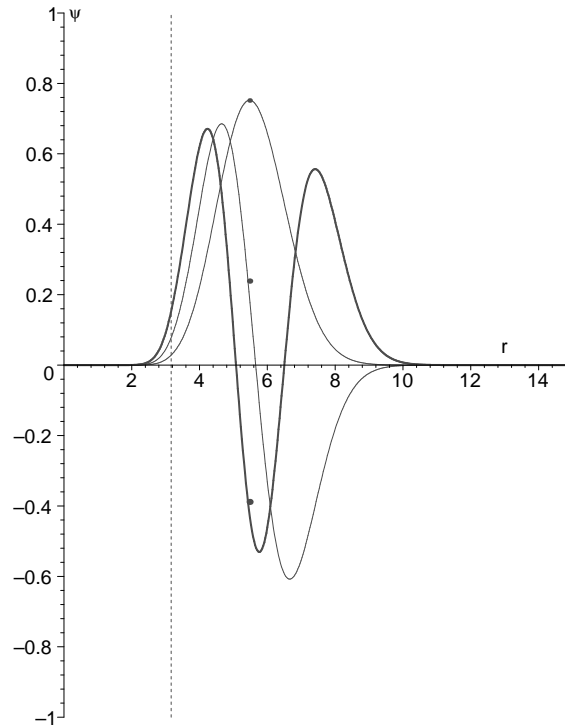
A nagyobbik gyök az ugyanazon energiához tartozó nagyobb sugárnak felel meg, a potenciál minimumától nagyobb r esetén tehát a helyettesítésben a +, kisebb r esetén a - előjelet kell használni. A (3) integrálás második tagja tehát

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} p_r dr &= E \int_1^{\sqrt{\frac{2m^*}{E}}} \sqrt{1-y^2} \left(1 - \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}} \right) dy + \\ & E \int_{\sqrt{\frac{2m^*}{E}}}^1 \sqrt{1-y^2} \left(1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}} \right) dy \\ &= E \int_{\sqrt{\frac{2m^*}{E}}}^1 \frac{\sqrt{1-y^2}y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}} dy = 2E \left(1 - \frac{2m^*}{E} \right) \frac{\pi}{4} \end{aligned}$$

Az integrálást a $z = \sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}$ helyettesítéssel tudtuk elvégezni. Vissza helyettesítve a Bohr-Sommerfeld kvantálás (3) formulájába azt kapjuk

$$E = 2n + 2m^* + 1, \quad \text{ahol} \quad E < \frac{m^2}{2s} \quad \text{és} \quad m^* > s \quad (5)$$

A kapott energiaszintek tehát a pozitív impulzusmomentumhoz tartozó



4. ábra. A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásai, a pozitív impulzusmomentumú Landau szintekhez tartozó esetben. Itt $s = 5$ és $m = 20$ esetén az első három energiasajátállapotot ábrázoltuk n szerint növekvő vastagságú vonaltípussal. A függőleges szaggatott vonal $R = \sqrt{2s}$ távolságban a kör határát jelzi. A görbéken megjelöltük a klasszikusan becsült megtalálási valószínűség átlagát.

Landau nívók. A részecske energiaszintjei a hiányzó fluxust érzékelik, de egyébként a végtelen homogén térnek megfelelően van kvantálva. A Schrödinger egyenlet egzakt megoldásával való egyezés az ottani számítás toleranciahatárán belül van! Megállapíthatjuk, hogy ezen a tartományon a WKB közelítés jó közelítése a kvantummechanikai problémának. A klasszikus érte-

lemben az elektron ilyenkor olyan körpályán kering a mágneses térben, aminek középpontja nem feltétlenül az antidot középpontjával esik egybe. A sugárfüggés ennek megfelelően az átlagérték körül oszcillál. A kvantummechanikai megtalálási valószínűség átlagát ezért a klasszikus analógiára az energiaminimum környékén várjuk. Ezt az egzakt megoldás ismeretében szemléltethetjük. A 4. ábrán $s = 5$ és $m = 20$ -hoz tartozó első pár normált hullámfüggvényt ábrázoltuk. Bejelöltük a kör $R = \sqrt{2s}$ határvonalát, ahol a függvények Besselből Whittaker függvénybe mennek át. A (4) alapján látható, hogy a maximális elérhető távolság $\sqrt{E} + \sqrt{E - 2m^*} = \sqrt{2n + 2m^* + 1} + \sqrt{2n + 1}$, a minimális pedig $\sqrt{E} - \sqrt{E - 2m^*} = \sqrt{2n + 2m^* + 1} - \sqrt{2n + 1}$. Az ábra $n = 0$ esetéhez például számszerűen a 4.57 és a 6.57 minimális és maximális sugarak tartoznak. Látható, hogy ezen tartományon kívül a hullámfüggvény valóban lecseng (alagúteffektus). Az eloszlás átlagát a felezőpont körül várjuk (5.57), ami láthatóan egy jó becslés. Az energia növekedtével az n . kvantumnak n csomópontja lesz, és a hullámfüggvény tartója illetve várható értéke növekszik, ahogy a klasszikus megfontolásokból sejtethető.

2.2.2. Körön kívüli mozgás, negatív körüljárás

$$m < 0, E < \frac{m^2}{2s}$$

Ilyenkor a (3) integrálás ismét csak a második tagot tartalmazza, de a potenciálváltozó minimuma nem $\sqrt{\frac{2m^*}{E}}$, – hisz ez most nem is lenne értelmes – hanem zérus. A helyettesítésben $y = \frac{1}{\sqrt{Er}} \left| m^* + \frac{r^2}{2} \right|$; az abszolútértékre ezúttal figyelni kell, hisz a kifejezés a 0 érték elérése után előjelet vált. Ennek megfelelően: $\frac{r^2}{2} \pm \sqrt{E}yr + m^* = 0$.

$$r = \begin{cases} \sqrt{E} \left(y + \sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}} \right) & \text{ha } r \geq \sqrt{2m^*} \\ \sqrt{E} \left(-y + \sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}} \right) & \text{ha } r < \sqrt{2m^*} \end{cases} \quad (6)$$

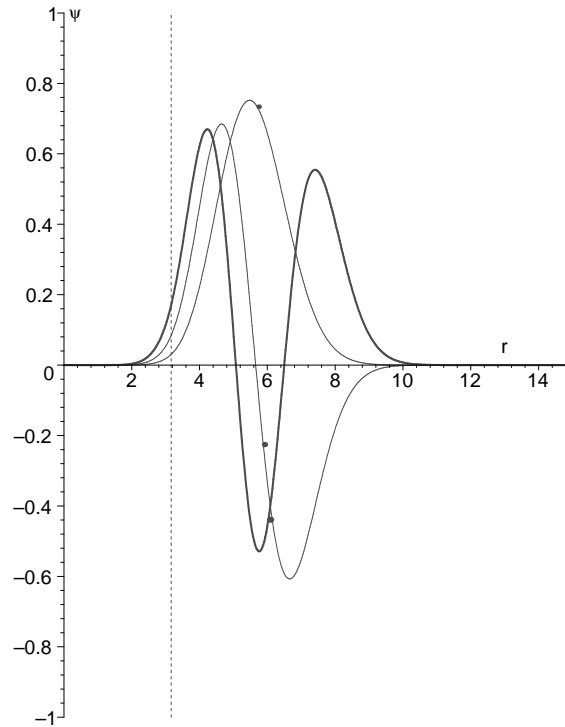
Ezzel a (3) integrál

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} p_r dr &= E \int_1^0 \sqrt{1 - y^2} \left(-1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}} \right) dy + \\ &E \int_0^1 \sqrt{1 - y^2} \left(1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}} \right) dy = 2E \int_0^1 \sqrt{1 - y^2} dy = \frac{\pi}{2} E \end{aligned}$$

Behelyettesítve az (3) formulába a következőt kapjuk

$$E = 2n + 1, \quad \text{ahol} \quad E < \frac{m^2}{2s} \quad \text{és} \quad m < 0 \quad (7)$$

Az ellenkező irányban nagy perdülettel keringő részecskékre tehát módosítás

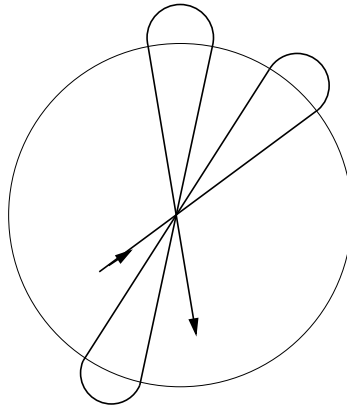


5. ábra. A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásai, ebben a negatív impulzusmomentumú Landau szinteknek megfelelő esetben. $s = 5$ és $m = -10$ esetén az első három energiasajátállapot. Ismét az $n = 0$ a legvékonyabb, $n = 2$ a legvastagabb vonal. A függőleges szaggatott vonal $R = \sqrt{2s}$ távolságban a kör határát jelzi. A görbéken megjelöltük a számolt klasszikus megtalálási valószínűség átlagát.

nélkül visszakaptuk a negatív impulzusmomentumú degenerált Landau szinteket. A Schrödinger egyenlet egzakt numerikus megoldása ebben a tartományban a 10^{-5} -es hibán belül az itt kapott érték. Az antidot tehát a gyakorlatban nagy negatív impulzusmomentumra nem szünteti meg a degenerációt, ilyenkor az elektronnak semmi tudomása nincsen a belülről hiányzó fluxusról! A megfelelő kvantummechanikai állapotfüggvények alapján ismét bemutatjuk a megtalálási valószínűség sugárfüggését néhány tipikus esetben.

(Lásd az 5. ábrát) Az elvárásnak megfelelően, – az alagúteffektustól eltekintve – a körön belüli tartományban minimális a valószínűség, az elektron nem tudja hol van a kör határa! A klasszikus sokaságátlag az előző pontnak megfelelően – ami ezúttal $\sqrt{-2m^*}$ – ismét jól megfelel a kvantummechanikai hullámfüggvényből kapható várható értékeknek.

2.2.3. Zérus impulzusmomentum, $m = 0$



6. ábra. Az elektronnak klasszikusan elképzelt pályája zérus impulzusmomentumkvantumszám esetén. Az elektron megtalálási valószínűsége az origóban maximális, ami megfelel a kvantummechanikai hullámfüggvénynek.

A (3) egyenlet belső integrálja egyszerűen $\sqrt{2sE}$, kívül a helyettesítés ismét

$$r = \sqrt{E} \left(y + \sqrt{y^2 + \frac{2s}{E}} \right)$$

Ezzel a fázistérfogat

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} p_r dr &= \sqrt{2sE} + E \int_0^1 \sqrt{1-y^2} \left(1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 + \frac{2s}{E}}} \right) dy \\ &= \sqrt{2sE} + E \frac{\pi}{4} + \frac{E+2s}{2} \arctan \sqrt{\frac{E}{2s}} - \frac{\sqrt{2sE}}{2} \end{aligned}$$

Az integrálást az előző két pontban említett helyettesítéssel végeztük el. Kissé heurisztikus módon, a (3). Bohr-Sommerfeld kvantálás eredeti alakját

használjuk, hisz a potenciáltól nem kell megkövetelni, hogy eltűnjön az origóban⁴

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi = \frac{\sqrt{2sE}}{2} + \frac{\pi}{4}E + \frac{E + 2s}{2} \arctan \sqrt{\frac{E}{2s}}$$

Ezen transzcendens egyenlet E-re vett megoldása adja az n . energia szintet. $2s$ -hez képest nagy energia esetén az arctan tag telítésbe megy, ekkor $E = (2n + 1) \left(1 - \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{s}{2n+1}}\right)$, az energiaszintek a degenerált Landau szintek alá szorúlnak. A megtalálási valószínűség maximuma a kvantummechanikai állapotfüggvény és a klasszikus kép alapján egyaránt a kör középpontjára esik. Ezek alapján felvetették [6], hogy ezek az állapotok megfeleltethetők az origón áthaladó periodikus klasszikus billiárdgolyóként elképzelt elektronpályáknak. Megjegyezzük, hogy a megtalálási valószínűség leírását tekintve ez nem teljesen konzisztens, hisz ez a klasszikus értelemben a kör belsejében konstans. Az átlagértéknek az energia növelésével egyre kijebb kell esni, az elektronpálya egyre jobban szétkenődik. Ezen utóbbi a kvantummechanikai eredménynek sem mond ellent. (Lásd a 7. ábrát.)

2.2.4. Mágneses peremállapotok $0 < m < 2s$

Ebben az esetben a potenciálnak a kör határán van minimuma. A (3) egyenletben az integrálhelyettesítés a potenciálváltozóra mindkét tartományban elvégezhető. Belül $r = \frac{|m|}{\sqrt{E}y}$ illetve kívül $r = \sqrt{E} \left(y + \sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}\right)$

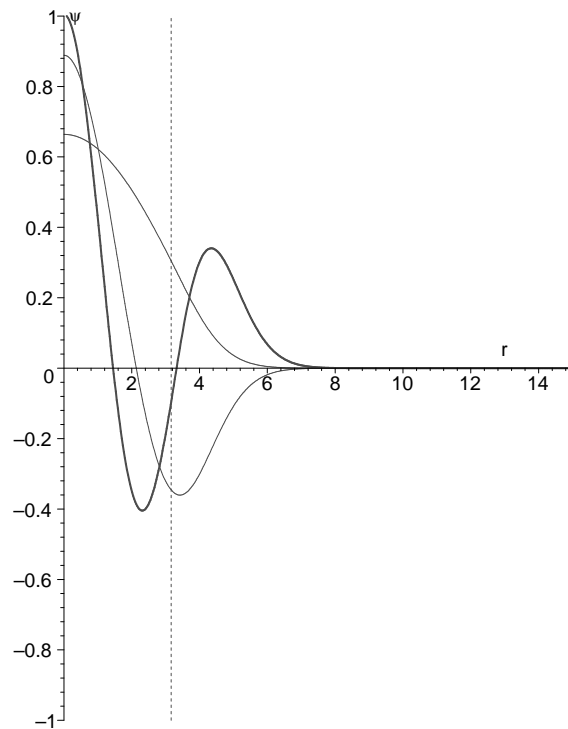
$$\int_{r_1}^{r_2} p_r dr = \sqrt{E} \int_1^{\frac{|m|}{2sE}} \sqrt{1-y^2} \frac{-|m|}{\sqrt{E}y^2} dy + E \int_{\frac{|m|}{2sE}}^1 \sqrt{1-y^2} \left(1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}}\right) dy$$

Az első integrált parciálisan, a másodikat a korábbiakban használt helyettesítéssel végezhetjük el. Végeredményben azt kapjuk, hogy

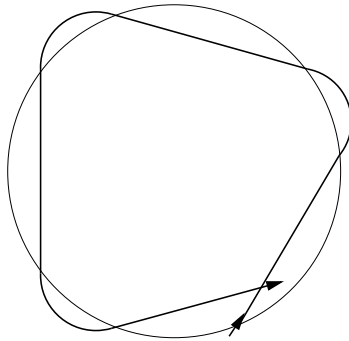
$$\begin{aligned} \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi &= \frac{|m|}{2} \sqrt{\frac{E}{E_{min}} - 1} + \frac{E - 2m}{2} \arccos \sqrt{\frac{E_{min}}{E}} \\ &+ \frac{E - 2m^*}{2} \arccos \sqrt{\frac{E_{min} - 2m^*}{E - 2m^*}} \end{aligned}$$

ahol csak a $0 < m < 2s$ feltételnek teljesülni. A kifejezés csak $E > E_{min} = \frac{m^2}{2s}$ esetén ad valós értéket, ekkor lesz az energia nagyobb, mint a potenciálmínimum, ami ezúttal a kör határára esik.

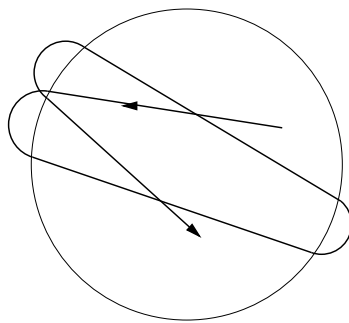
⁴Az egzakt megoldásban is láttuk, hogy a belső megoldás ebben az esetben a J_0 Bessel függvény, ami az origóban nem tűnik el.



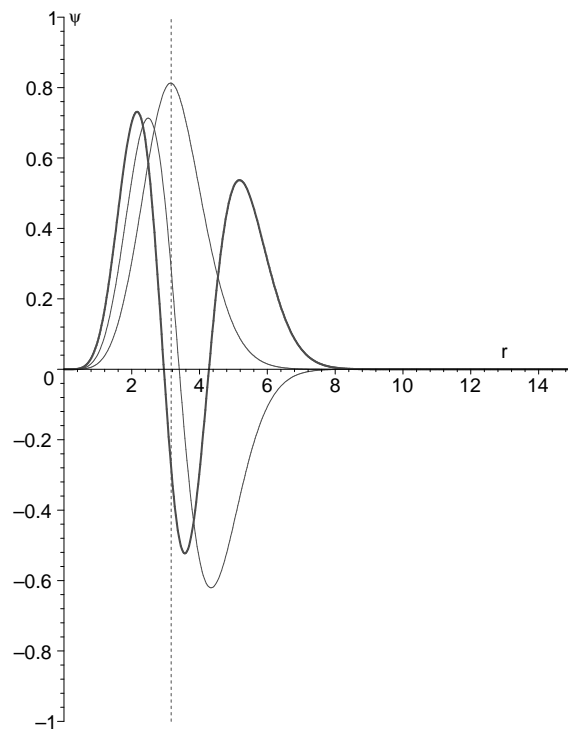
7. ábra. A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásai, a zérus impulzusmomentumú szinteknek megfelelő esetben. $s = 5$ esetén az első három energiaszintállapotot ábrázoltuk. A függőleges szaggatott vonal $R = \sqrt{2s}$ távolságban a kör határát jelzik. A számolt klasszikus megtalálási valószínűség átlaga az origóra esik.



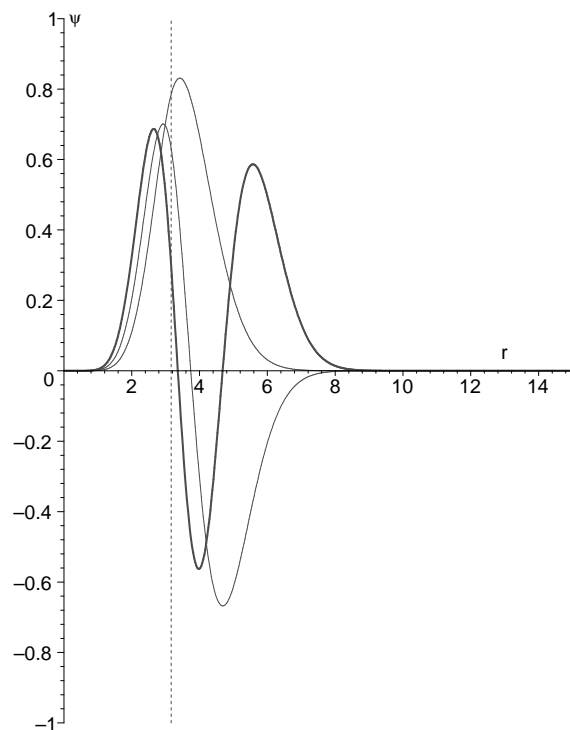
8. ábra. Az elektron klasszikusan elképzelt pályája $2s$ -nél kisebb pozitív m esetén. Az elektron a kör határa körül oszcillál.



9. ábra. Nagyobb energiájú mágneses peremállapotnak megfelelő klasszikus megfelelő. Az elektron a kör határa körül oszcillál, de most megtalálási valószínűsége nagyobb területen oszlik el.



10. ábra. A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásai, a mágneses peremállapotoknak megfelelő esetben. $s = 5$ és $m = 5$ esetén az első három energiasajátállapotot ábrázoltuk. A függőleges szaggatott vonal $R = \sqrt{2s}$ távolságban a kör határát jelzi. A klasszikus megtalálási valószínűség átlaga a határra esik.



11. ábra. A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásai, a mágneses peremállapotoknak megfelelő esetben. $s = 5$ és $m = 8$ esetén az első három energiasajátállapotot ábrázoltuk. A klasszikus megtalálási valószínűség átlaga a határ közelébe, attól kifelé esik.

Amint a bevezetőben említettük mágneses peremállapotok nem csak az antikörre, hanem általában bármilyen mágneses határfelület esetén létrejönnek. A megtalálási valószínűséget az antidot határológörbéje közelébe várjuk. A klasszikus megtalálási valószínűség maximumának nem kell pontosan a határolókörre esnie, hisz a potenciál a két irányban aszimmetrikus. Nagy energián például azt várjuk, hogy a kör belsejében a meredek potenciállal miatt hamarabb visszaérjen az elektron, ergo a megtalálási valószínűség egyre nagyobb energián egyre inkább szétkenődik, az átlaga a körtől kifelé egyre távolabb kell esnie. Ugyanígy az m impulzusmomentum növelésével kicsit kifelé tolódik, csökkentésével a körön befelé húzódik a várható érzék. Mindezt az egzakt kvantummechanikai megoldásokon a 10. és 11 ábrákon szemléltetjük.

2.2.5. Nagy energiájú, $2s$ -nél nagyobb pozitív impulzusmomentumú állapot

$$m \geq 2s, E > \frac{m^2}{2s} = E_{min}$$

A változócsere a körön kívüli részre az amit a 2.2.1. esetben használtunk, a belső integrált a 2.2.4 részben elvégeztük.

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} p_r dr &= \sqrt{E} \int_1^{\frac{|m|}{2sE}} \sqrt{1-y^2} \frac{-|m|}{\sqrt{E}y^2} dy + E \int_{\frac{|m|}{2sE}}^{\sqrt{\frac{2m^*}{E}}} \sqrt{1-y^2} \left(1 - \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}}\right) dy \\ &+ E \int_{\sqrt{\frac{2m^*}{E}}}^1 \sqrt{1-y^2} \left(1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}}\right) dy \end{aligned}$$

Ugyanolyan integrálok elvégzésére van szükség, mint az előző esetekben. Rögön csak a végeredményt közöljük:

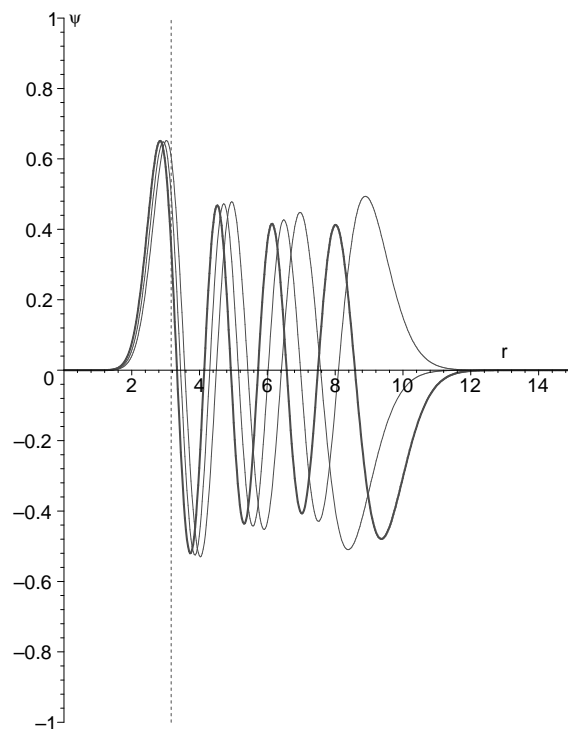
$$\begin{aligned} \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi &= \frac{\pi}{2}(E - 2m^*) + \frac{|m|}{2} \sqrt{\frac{E}{E_{min}} - 1} + \frac{E - 2m}{2} \arccos \sqrt{\frac{E_{min}}{E}} \\ &- \frac{E - 2m^*}{2} \arccos \sqrt{\frac{E_{min} - 2m^*}{E - 2m^*}} \end{aligned}$$

Ez a nagy energiájú esetben a 2.2.1. megfelelője. Az első tag megegyezik, a többi jelenti az eltérést az effektív impulzusmomentumhoz tartozó Landau-nívóktól. Látható, hogy $E = E_{min}$ esetén ezek a tagok mind eltűnnek, ennél kisebb energiákra pedig nincsenek is értelmezve. A tényleges megoldás ismét csak numerikus úton kapható meg. Az itt tárgyalt klasszikus képnek megfelelően a 2.2.1 képhez képest az eltérés látványos: a részecske sugárváltozójának várható értéke a körön kívülre esik, de a megtalálási valószínűség nem elhanyagolható az üres kör belsejében sem. (Lásd a 12. és a 4. ábrákat.)

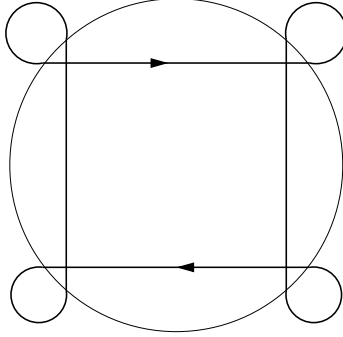
2.2.6. Nagy energiájú negatív impulzusmomentumú állapot

$$m < 0, E > \frac{m^2}{2s} = E_{min}$$

A változócsere a körön kívüli részre a 2.2.2 kis energiájú résszel azonos,



12. ábra. A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásai, a pozitív nagy impulzusmomentum esetén, nagy energián. $s = 5$ és $m = 15$ esetén az $n = 5, 6, 7$ kvantumszámokkal jellemzett energiasajátállapotokat ábrázoltuk. A függőleges szaggatott vonal $R = \sqrt{2s}$ távolságban a kör határát jelzik. A klasszikus megtalálási valószínűség átlaga a körön kívüli esik.



13. ábra. Az elektron klasszikusan elképzelt pályája negatív impulzusmomentum esetén. A [6] cikkben felvetették, hogy az alacsony kvantumszámokkal jellemzett sajátállapotoknak megfeleltethetők ehhez hasonló periodikus klasszikus biliárdpályák. A megfeleltetés a megtalálási valószínűség maximuma vagy átlagértéke alapján lehetséges.

az első integrált a 2.2.4. részből másolhatjuk.

$$\int_{r_1}^{r_2} p_r dr = \sqrt{E} \int_1^{\frac{|m|}{2sE}} \sqrt{1-y^2} \frac{-|m|}{\sqrt{E}y^2} dy + E \int_{\frac{|m|}{2sE}}^0 \sqrt{1-y^2} \left(-1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}} \right) dy$$

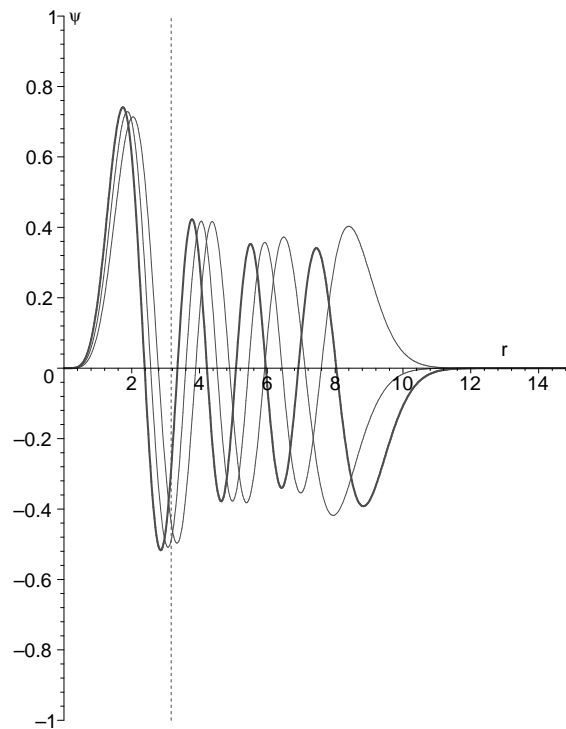
$$+ E \int_0^1 \sqrt{1-y^2} \left(1 + \frac{y}{\sqrt{y^2 - \frac{2m^*}{E}}} \right) dy$$

Az integrálok elvégzésének módját az olvasó az előző részekben megtalálja, itt csak az eredményt közöljük.

$$\left(n + \frac{1}{2} \right) \pi = \frac{\pi}{2} E + \frac{|m|}{2} \sqrt{\frac{E}{E_{min}} - 1} - \frac{E - 2m}{2} \arccos \sqrt{\frac{E_{min}}{E}}$$

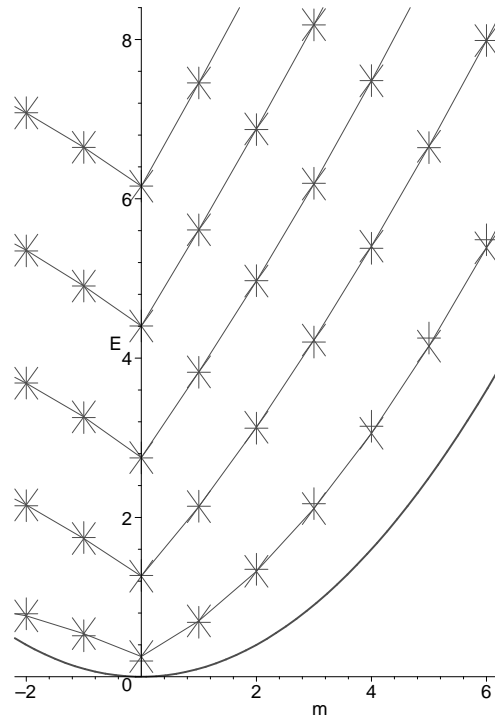
$$+ \frac{E - 2m^*}{2} \arccos \sqrt{\frac{E_{min} - 2m^*}{E - 2m^*}}$$

A végeredményt a 2.2.2 eredményével érdemes összehasonlítani. Ott csak a degenerált Landau-nívóknak megfelelő első tag volt jelen. Ezúttal a többi energiafüggő tag feloldja a degenerációt, az ábrán látható, ahogy az elektron nem elhanyagolható módon befolyik a kör területére is. (Lásd a 14. és az 5. ábrákat.) Nem csoda tehát, hogy a homogén mágneses tértől ilyen mértékben eltérő eredményt kapunk. A kifejezést csak a $E \geq E_{min}$ esetben szabad használni. $E = E_{min}$ esetén a módosító tagok eltűnnek, ahogy annak lennie kell.



14. ábra. A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásai, a negatív impulzusmomentum esetén, nagy energián. $s = 5$ és $m = -5$ esetén az $n = 5, 6, 7$ kvantumszámokkal jellemzett energiasajátállapotokat ábrázoltuk. A függőleges szaggatott vonal $R = \sqrt{2s}$ távolságban a kör határát jelzi. A klasszikus megtalálási valószínűség átlaga a körön kívülre esik.

2.3. Összefoglalás



15. ábra. Az energiasajátértékek impulzusmomentumfüggése $s=5$ esetén. Az egzakt kvantummechanikai megoldásból kapott értékeket $*$ -el, a szemiklasszikus formula közelítőképlete által kapott pontokat $+$ -al jelöltük. Látható, hogy még kis m és n esetén is nagyon jó a közelítés.

Megmutattuk, hogy a kvantummechanikai és a WKB módszer közti egyezés az $|m| > s$ tartományban illetve az $n \geq 1$ energián szinte tökéletes. A szemiklasszikus megoldás szintén transzcendens egyenletre vezetett, ami azonban csak –numerikus szempontból megbízhatóbb– arccos függvényeket tartalmazott. Továbbá itt biztosak lehetünk, hogy nem hagyunk ki egyetlen állapotot sem a célba vett tartományból, hisz minden energiaszinthez külön egyenlet adódott. A két tárgyalás közti pontos egyezés szerint meggyőződhattünk róla, hogy precíz matematikai analízis nélkül is megbízhatunk a klasszikus fizikai intuíciónkban miszerint a nagy impulzusmomentumú állapotok csak a körtől távol lesznek relevánsak. 6 féle állapotot különböztettünk meg. Az $0 > m$ vagy $m > 2s$ esetben, az $E < m^2/2s$ nagy impulzusmomentumú állapotok az m^* -nek megfelelő Landau szintek voltak. Ebben az impulzusmomentumtartományban a nagy energiájú nívók ugyan a Landau

nívóktól eltértek, de a megtalálási valószínűség a $\sqrt{2m^*}$ környékén volt jelentős. Az $m = 0$ szint az origón áthataladó periodikus pályákat jelentette, aminek hullámfüggvénye az origó környezetében maximális. A $0 < m < 2s$ állapotok a mágneses peremállapotok, ahol a hullámfüggvény a mágneses tartományok határa körül jelentős.

3. Az általános anti-amőba

Most tekintsük az általános antidot esetét, amikor egy tetszőleges kétdimenziós korlátos csillagszerű tartományban zérus, azon kívül \mathbf{B} merőleges mágneses tér van jelen. Ebben a rendszerben keressük a megengedett egyrészecskés energiaszinteket. Három lépésben járunk el. Először meg kell adnunk azt a vektorpotenciált, ami ezt a teret hozza létre, hisz a Schrödinger-egyenletben csak ez szerepel. Ezután olyan mértéktranszformációkat alkalmazunk, amivel a körre vonatkozó problémától csak egy gyűrűben tér el a vektorpotenciál. Ezek után az antidot bázisában megadjuk a Hamilton-operátor kifejtését, amely sajátértékproblémájának megoldásából kaphatók az energiasajátértékek.

Ebben a részben felírjuk a vektorpotenciált és a mértéktranszformációkat. Elemi úton, behelyettesítéssel győződünk meg róla, hogy a definiált transzformáció tényleg a megfelelő eredményhez vezet. A pontos levezetést a dolgozat végén levő Appendixben adjuk meg. Ehhez a differenciális formák használatára lesz szükség, amit a lényegre koncentrálnak itt elkerülünk.

3.1. A vektorpotenciál

Legyen a mágneses teret nem tartalmazó tartomány határa polárkoordinátákban paraméterezve $R(\phi)$. Ha az üres tartomány körlap, akkor a körszimmetriának megfelelő $\mathbf{A}(r, \phi) = C(r)\mathbf{e}_\phi$ szimmetrikus mértékben szokás keresni a vektorpotenciált. Azt találjuk, hogy az általános esetben

$$\mathbf{A}(r, \phi) = \frac{B}{2} \frac{r^2 - R(\phi)^2}{r} \theta(r - R(\phi)) \hat{\mathbf{e}}_\phi \quad (8)$$

vektorpotenciál rotációja

$$\text{rot}(\mathbf{A}(r, \phi)) = B\theta(r - R(\phi))$$

a kívánt mágneses teret adja. A képletben $|\hat{\mathbf{e}}_\phi| = 1$ normált bázisvektor, $\theta(x)$ a Heaviside egységugrásfüggvény.

A vektorpotenciál levezetése elemi módon lehetséges ha a potenciált a szimmetrikus mértékben keressük, amelyben a sugárirányú komponens tehát eltűnik. A mágneses mezőt integráljuk egy infinitezimális nyílásszögű körcik-

kre, majd alkalmazzuk a Stokes-tételt

$$\begin{aligned}\int B(r', \phi') dF &= \oint \mathbf{A}(r', \phi') d\mathbf{s} \\ \int_0^r \int_\phi^{\phi+d\phi} B\theta(r' - R(\phi')) r' d\phi' dr' &= \int_\phi^{\phi+d\phi} A_\phi r d\phi \\ B \frac{r^2 - R(\phi)^2}{2} \theta(r - R(\phi)) d\phi &= A_\phi r d\phi\end{aligned}$$

A körintegrálásnál kihasználtuk, hogy a sugárirányú részek íveleme merőleges a vektorpotenciálra, így a skalárszorzat zérus. Tehát

$$A_\phi = B \frac{r^2 - R(\phi)^2}{2r} \theta(r - R(\phi))$$

Látható, hogy a 2. pontban az antikörre kapott kifejezésre nagyon hasonló eredmény adódott. Az eltérés csak az, hogy most $R(\phi)$ tetszőleges folytonos periodikus függvény lehet.

3.2. Mértéktranszformáció

A vektorpotenciál (8) alakjához most megpróbálunk hozzáadni egy $\text{grad}(\chi)$ gradienst úgy, hogy azzal a külső tartományban kiküszöböljük a szögfüggést! Ezenfelül még azt is szeretnénk, ha ezáltal a szimmetrikus mértékben maradnánk. Az Appendix B-ben szemléletes lesz, hogy miért is oldható ez meg ebben az esetben. Az előző pontban kapott vektorpotenciált ezentúl jelöljük \mathbf{A}_0 -lal. A mértéktranszformáció generátorát keressük a következő alakban:

$$\chi(\phi) = \frac{B}{2} \int_0^\phi R(\phi')^2 d\phi' - R_0^2 \phi$$

Az R_0 konstans paraméter, amit úgy választunk meg, hogy a transzformációs függvény folytonos legyen a $\phi = 0, \phi = 2\pi$ határon.

$$\chi(2\pi) - \chi(0) = B \left(\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} R(\phi')^2 d\phi' - R_0^2 \pi \right) \equiv 0$$

Azt kaptuk, hogy $R_0^2 \pi$ -nek az amőba területével kell megegyezni. Képezzük a gradienst

$$\nabla \chi(\phi) = \partial_r \chi \hat{\mathbf{e}}_r + \partial_\phi \chi \frac{\hat{\mathbf{e}}_\phi}{r} = \frac{B}{2} \frac{R(\phi)^2 - R_0^2}{r} \hat{\mathbf{e}}_\phi$$

Ezzel

$$\mathbf{A}_1 := \mathbf{A}_0 + \nabla\chi = \begin{cases} \frac{B}{2} \frac{r^2 - R_0^2}{r} \hat{\mathbf{e}}_\phi & \text{ha } r \geq R(\phi) \\ \frac{B}{2} \frac{R(\phi)^2 - R_0^2}{r} \hat{\mathbf{e}}_\phi & \text{ha } r < R(\phi) \end{cases}$$

A belső tartományon az origóban r^{-1} szerint szingulárissá vált a vektorpotenciál. Ez rendkívül kellemetlen, hisz a Hamiltoni a vektorpotenciálnégyzetet is tartalmazza. A mátrixelemek elkészítéséhez ezt a síkra kell integrálni, amit csak az origóban zérus függvénnyel szorozva lehetne egyáltalán megtenni. A második lépésben ezt a szingularitást tüntetjük el. Olyan mértéktranszformációs függvényt választunk, ami a külső tartományban nem bántja a szögfüggetlen megoldást

$$\eta(r, \phi) := \begin{cases} 0 & \text{ha } r > R_{max} \\ -\chi(\phi)g(R_{max}, R_{min}, r) & \text{ha } R_{min} \leq r \leq R_{max} \\ -\chi(\phi) & \text{ha } r \leq R_{min} \end{cases}$$

ahol R_{min} az amőba belülírt körének, R_{max} a körülírt körének sugara⁵. $g(a, b, x)$ olyan x -ben folytonosan differenciálható függvény, ami rögzített a és b esetén $x = a$ -ra 0, $x = b$ -ra 1 értéket vesz fel, a derivált pedig ezekben a pontokban eltűnik. Ezzel $\eta(r, \phi)$ és $d\eta(r, \phi)$ folytonos függvény⁶. Ennek egy lehetséges konkrét explicit alakját az Appendix B fejezetben közöljük.

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_2 := \mathbf{A}_1 + \nabla\eta &= \begin{cases} B(r^2 - R_0^2)/2r \mathbf{e}_\phi & \text{ha } r \geq R_{max} \\ B(r^2 - R_0^2)/2r \mathbf{e}_\phi - \nabla[\chi g] & \text{ha } R(\phi) \leq r \leq R_{max} \\ (1 - g)\nabla\chi - \chi\nabla g & \text{ha } R_{min} \leq r \leq R(\phi) \\ 0 & \text{ha } r \leq R_{min} \end{cases} \\ &= \begin{cases} B(r^2 - R_0^2)/2r \mathbf{e}_\phi & \text{ha } r \geq R_{max} \\ B(r^2 - R_0^2)/2r \mathbf{e}_\phi - \nabla[\chi(\phi)g(r)] & \text{ha } R(\phi) \leq r \leq R_{max} \\ \nabla[\chi(\phi)h(r)] & \text{ha } R_{min} \leq r \leq R(\phi) \\ 0 & \text{ha } r \leq R_{min} \end{cases} \quad (9) \end{aligned}$$

ahol $h(r) = 1 - g(R_{max}, R_{min}, r) = g(R_{min}, R_{max}, r)$ jelölést használtuk. Az explicit alakhoz be lehet helyettesíteni a $\chi(\phi)$ és $g(r)$ függvények konkrét alakját, amivel a vektorpotenciál r és ϕ változókon kívül explicit csak az $R(\phi)$ függvénytől fog függeni. Látható, hogy az antidot vektorpotenciál a körülírt körön kívül ill. a belülírt körön belül pontosan az antikör vektorpotenciáljába megy át. A kapott megoldást a formák nyelvén az Appendix

⁵Vagy másképpen: $R_{min} = \min(R(\phi))$, $R_{max} = \max(R(\phi))$

⁶Található olyan g függvény is amivel $\eta(r, \phi)$ végtelenszer differenciálható, és mindegyik deriváltja 0-vá válik a határon, de a számíthatóhoz nem szükséges ennyire sima vektorpotenciált gyártani.

B-ben részletesebben értelmezzük. A különböző tartományokra vonatkozó vektorpotenciálfüggvényeket római indexekkel jelöljük: A_I , A_{II} , A_{III} és A_{IV} ahol pl. $A_I = 0$ a legbelső tartományhoz tartozó alak. (Lásd 16. ábra.) A gyűrűn belüli tartományban a belülrít körtől távolodva nullvektorból indulva növekszik az abszolútértéke és irányának -a körülírt kör felé közeledve- egyre kisebb a sugárirányú komponense.

3.3. Kvantálás

Az egy elektron Hamiltoni mágneses térben

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2M}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2M}(\mathbf{p}^2 + 2e\mathbf{A}\mathbf{p} + e[\mathbf{p}, \mathbf{A}] + e^2\mathbf{A}^2) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M}(\nabla^2 + \frac{2ie}{\hbar}\mathbf{A}\nabla + \frac{ie}{\hbar}\text{div}(\mathbf{A}) - \frac{e^2}{\hbar^2}\mathbf{A}^2) \end{aligned}$$

Esetünkben a négy tartományon különböző vektorpotenciál van jelen, ennek megfelelően a Hamilton függvény négy részre bontható.

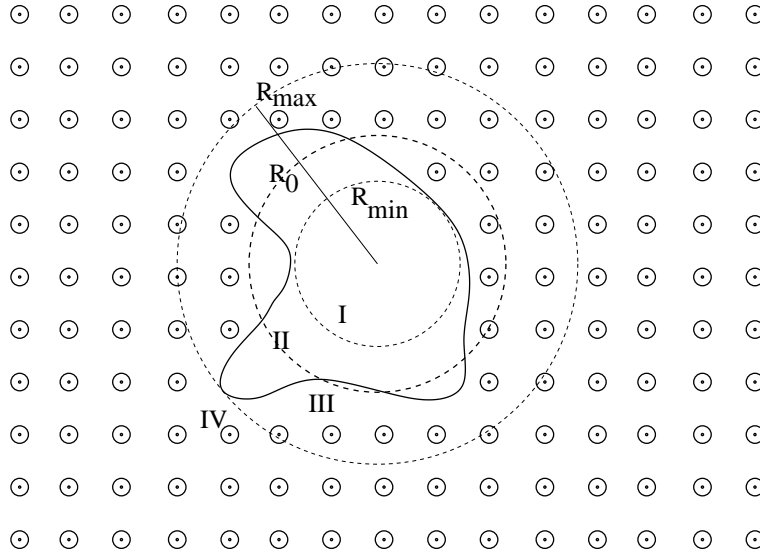
$$H = \kappa_{\{r < R_{min}\}}H_I + \kappa_{\{R_{min} < r < R(\phi)\}}H_{II} + \kappa_{\{R(\phi) < r < R_{max}\}}H_{III} + \kappa_{\{r > R_{max}\}}H_{IV}$$

ahol H_I rész a belül írt körön, a H_{II} ezen kívül de az antidot belsejében, a H_{III} az antidoton kívül de még a körül írt kör belsejében és végül H_{IV} a körülírt körön kívüli tartományban releváns. (Lásd a 16. ábrát)

Az \mathbf{A}_2 mértékben levő sajátfüggvény 9 alakjára vonatkozó Schrödinger-egyenlet megoldást az I és a IV tartományban ismerjük ((2) egyenlet), hisz ez épp az antikör külső és belső részére vonatkozó egyenlet.

$$\begin{aligned} \psi_I(r, \phi)_{E,m} &= c_1 J_m(\sqrt{E}r) e^{im\phi} \\ \psi_{IV}(r, \phi)_{E,m} &= c_2 W_{E,m}(r) e^{im\phi} \end{aligned}$$

ahol $W_{E,m}(r) = e^{-\frac{1}{4}r^2} r^{|m^*|} U\left(\frac{1+|m^*|+m^*-E}{2}, 1+|m^*|, \frac{r^2}{2}\right)$ a Kummer U függvényt használó alak rövid jelölése, az ún. Whittaker függvény $J_m(\cdot)$ az m . Bessel függvény. Az $m^* = m - s$ az effektív impulzuszómomentum, ahol s a korábbiakban használt az (1) hiányzó fluxus, az antiamóbát jellemző paraméter. A folytonosság miatt m egész. Az első tartományban, a belülrít kör belsejében a sugárfüggés Bessel-függvény. A gyűrűn belüli tartományon (II és III) a megoldás függ $R(\phi)$ -től, általános alakban nem adható meg. A negyedik tartományon –az R_{max} sugárú körön kívüli térrészben– a Hamiltoni az antikör mágneses tartományára lett visszavezetve, aminek sugárfüggését a $W_{E,m}(r)$ Whittaker függvény jellemezte. Mindazonáltal az energia-sajátértékek természetesen általában nem esnek egybe az antikör lehetséges



16. ábra. A mágneses antidot probléma

Külön kezeljük a négy tartományt: a belülírt körön belülit, azon kívül de az amőbában belül, az amőbában kívül de a körülírt körön belül, a körülírt körön kívül

értékeivel, ezért a gyakorlatban ezen tartományokban sem várhatunk az s paraméterű antikörrel azonos hullámfüggvényt.

A sajátértékek lehetséges értékeit az antikörnél a tartományok összeilleszthetőségének feltételéből kaptuk. Ehhez most a $\psi_{I E, m}$ megoldás H_{II} majd H_{III} szerinti folytatása⁷ az amőba határán a $\psi_{IV E, m}$ értéket kell adja, és a deriváltra is hasonló feltételt kell megkövetelni. Az antidot problémánál a II-es és III-as tartomány hiányzik, itt a belül- és körülírt kör maga az amőba. Ezen problémát az I-es és III-as megoldások illesztésével rögtön meg lehetett oldani (lásd 2.1.), az ezt teljesítő E_n sajátértékek ebből ismertek voltak. A kör alakú határvonal perturbálására azt várjuk, hogy ezen sajátértékek folytonosan fognak változni. Mivel az I-es és IV-es tartományban a sajátfüggvények alakilag nem változnak meg, a körre vonatkozó megoldásból kiinduló iterációval megkaphatóak a perturbált esetre vonatkozó sajátértékek.

A másik lehetőség – a gyakorlatban ebben az esetben egyszerűbben kivitelezhető – mátrixformalizmus. Az energiabázisban a Hamilton operátor diagonális, következésképpen tetszőleges teljes ortonormált rendszerben kiszámolva a Hamilton-mátrixot, majd ezt diagonalizálva megkapjuk ebben a

⁷A Hamilton operátorok ismeretében a hullámfüggvény a Schrödinger parciális differenciálegyenlet numerikus megoldásával továbbfejleszthető egy zárt görbén megadott értékéből kiindulva.

függvényrendszerben a sajátfüggvények kifejtését. Ennek a hátulütője az, hogy ezen mátrix általában végtelen. Olyan bázist kell választani, amelyben a sajátfüggvények kifejtése hamar konvergál. Szemiklasszikus érveléssel a 2.2. pontban megmutattuk, hogy a nem túl nagy impulzuszórájú pályák az origó kis környezetébe vannak zárva a mágneses tér által, ergo a közeli tartományok integráljárulékaik lesznek döntőek. A legkézenfekvőbb bázisfüggvényrendszer a megegyező területű antikör sajátfüggvényrendszere. A tetszőleges alakú antidot Hamilton függvénye eleve csak a belül- és a körülírt köre közti gyűrűben tér el egyáltalán az antikör H_0 -jától. A korábbi jelölésekkel:

$$H_0 = \kappa_{\{r < R_0\}} H_I + \kappa_{\{r > R_0\}} H_{IV}$$

$$H = \kappa_{\{r < R_{min}\}} H_I + \kappa_{\{R_{min} < r < R(\phi)\}} H_{II} + \kappa_{\{R(\phi) < r < R_{max}\}} H_{III} + \kappa_{\{r > R_{max}\}} H_{IV}$$

ahol κ_X az X halmaz karakterisztikus függvénye, ami H belsejében 1, azon kívül a 0 értéket adja. H -t a H_0 perturbációjaképpen állítjuk elő:

$$\begin{aligned} \Delta H = H - H_0 &= \kappa_{\{R_{min} < r < \min[R_0, R(\phi)]\}} (H_{II} - H_I) + \kappa_{\{R_0 < r < R(\phi)\}} (H_{II} - H_{IV}) \\ &\quad + \kappa_{\{R(\phi) < r < R_0\}} (H_{III} - H_I) + \kappa_{\{\max[R_0, R(\phi)] < r < R_{max}\}} (H_{III} - H_{IV}) \\ &= \kappa_{\{R_{min} < r < R(\phi)\}} (H_{II} - H_I) + \kappa_{\{R(\phi) < r < R_{max}\}} (H_{III} - H_I) \\ &\quad - \kappa_{\{R_0 < r < R_{max}\}} (H_{IV} - H_I) \end{aligned}$$

Az átalakítások egyszerű halmazelméleti azonosságok felhasználásával történt. A Hamilton operátor különböző tartományokra jellemző alakjainak különbsége szerepel. Konkrétan például az első ilyen

$$H_{II} - H_I = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{2ie}{\hbar} (\mathbf{A}_{II} - \mathbf{A}_I) \nabla + \frac{ie}{\hbar} \text{div}(\mathbf{A}_{II} - \mathbf{A}_I) - \frac{e^2}{\hbar^2} (\mathbf{A}_{II}^2 - \mathbf{A}_I^2) \right)$$

A többi különbség ugyanilyen alakú, a megfelelő római index behelyettesítésével kapható. A vektorpotenciálok konkrét alakjával ezeket explicit is kiszá-

molhatjuk.

$$\begin{aligned}
H_{II} - H_I &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left\{ \frac{2ie}{\hbar} \nabla(\chi h) \cdot \nabla + \frac{ie}{\hbar} \Delta[\chi h] - \frac{e^2}{\hbar^2} [\nabla(\chi h) \cdot \nabla(\chi h)] \right\} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2M} \left\{ \frac{2ie}{\hbar} \frac{dh}{dr} \chi \partial_r + \frac{2ie}{\hbar} \frac{h}{r^2} \frac{d\chi}{d\phi} \partial_\phi \right. \\
&\quad \left. + \frac{ie}{\hbar} \Delta[h\chi] - \frac{e^2}{\hbar^2} \left[\frac{\hbar^2}{r^2} \left(\frac{d\chi}{d\phi} \right)^2 + \chi^2 \left(\frac{dh}{dr} \right)^2 \right] \right\} \\
H_{III} - H_I &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left\{ \frac{2ie}{\hbar} \frac{dg}{dr} \chi \partial_r + \frac{2ie}{\hbar} \left[B \frac{r^2 - R_0^2}{2} - g \frac{d\chi}{d\phi} \right] \frac{\partial_\phi}{r^2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{ie}{\hbar} \Delta[g\chi] - \frac{e^2}{\hbar^2} \left[\frac{1}{r^2} \left(B \frac{r^2 - R_0^2}{2} - g \frac{d\chi}{d\phi} \right)^2 + \chi^2 \left(\frac{dg}{dr} \right)^2 \right] \right\} \\
H_{IV} - H_I &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{2ie}{\hbar} B \frac{r^2 - R_0^2}{2r^2} \partial_\phi - \frac{e^2}{\hbar^2} \left(B \frac{r^2 - R_0^2}{2r} \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

A korábbiak szerint az antikör sajátfüggvényrendszerét választjuk bázisnak. A szükséges mátrixelemeket szétbontjuk a H_0 és a ΔH összegére. H_0 az azonos területű antikör Hamiltonija.

$$\begin{aligned}
\langle i|H|j \rangle &= \langle i|H_0|j \rangle + \langle i|\Delta H|j \rangle = \\
&= E_j \delta_{ij} + \int_0^{2\pi} \int_{R_{min}}^{R(\phi)} \varphi_i^* [H_{II} - H_I] \varphi_j dr d\phi + \int_0^{2\pi} \int_{R(\phi)}^{R_{max}} \varphi_i^* [H_{III} - H_I] \varphi_j dr d\phi \\
&\quad + \int_0^{2\pi} \int_{R_0}^{R_{max}} \varphi_i^* [H_{IV} - H_I] \varphi_j dr d\phi \tag{10}
\end{aligned}$$

A bázisfüggvények a 2.1. fejezetben egzaktul meg lettek határozva. Egy $|i\rangle$ állapotot valójában két mennyiséggel, az m impulzuszórával és a n -el indexelt energiasajátértékkel lehet megadni⁸. A bázisfüggvényrendszer röviden $\varphi_{n,m} \equiv \varphi_{nm}$ módon jelöljük. A két index a polárváltozók szerint szeparált két dimenziós tér bázisát fixálja. Bármelyik rögzített m esetén $\varphi_{n,m}$, $n \in N$ kifeszíti a sugárirányú alteret, rögzített n és $m \in N$ esetén a szögfüggésnek megfelelő alteret kapjuk. Ez utóbbinak megfelelő Hilbert tér

⁸Az energiasajátérték jellemzésére n -re és m -re is szükség van, hisz általában nincs degeneráció.

kompakt, az $U(1)$ csoport reprezentációja. Az asszimmetrikus feladat tehát a Hamilton függvényében sérti a szimmetriát, de a kifejtésben szimmetrikus bázist használunk.

A megadott Hamiltoni hatását analitikusan meg lehet kapni, hisz ez a megadott függvények szorzásán kívül csak ϕ és r deriválást tartalmaz. Egy adott $\varphi_{n,m}$ antikör hullámfüggvényre a ϕ deriválás egyszerűen im -mel való szorzás, az r deriválást a 2.1.3. pontban már vizsgáltuk.

Az első integrált például a következő módon végezzük⁹

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_{R_{min}}^{R(\phi)} \varphi_{n,m}^* [H_{II} - H_I] \varphi_{n',m'} dr d\phi = \int_0^{2\pi} \int_{R_{min}}^{\min(R_0, R(\phi))} \varphi_{n,m}^* [H_{II} - H_I] \varphi_{n',m'} dr d\phi \\ & + \int_0^{2\pi} \theta(R(\phi) - R_0) \int_{R_0}^{R(\phi)} \varphi_{n,m}^* [H_{II} - H_I] \varphi_{n',m'} dr d\phi \end{aligned}$$

Ebben az alakban rögtön behelyettesíthetjük a (2) Bessel ill. Whittaker függvényt használó bázisfüggvényeket, hisz ezek éppen az $r < R_0$ és $r > R_0$ tartományokra vonatkoznak.

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_{R_{min}}^{\min(R_0, R(\phi))} A_{n,m} A_{n',m'} J_m(\sqrt{E_{n,m}r}) \left\{ -2i \frac{dh}{dr} \chi \sqrt{E_{n',m'}} J_{m'}(\sqrt{E_{n',m'}r}) \right. \\ & \left. + \left[2 \frac{h}{r^2} \frac{d\chi}{d\phi} m' - i\Delta(h\chi) + \frac{h^2}{r^2} \left(\frac{d\chi}{d\phi} \right)^2 + \chi^2 \left(\frac{dh}{dr} \right)^2 \right] J_{m'}(\sqrt{E_{n',m'}r}) \right\} dr d\phi \\ & + \int_0^{2\pi} \theta(R(\phi) - R_0) \int_{R_{min}}^{\min(R_0, R(\phi))} B_{n,m} B_{n',m'} W_{n,m}(r) \left\{ -2i \frac{dh}{dr} \chi^r W'_{n',m'}(r^2/2) \right. \\ & \left. + \left[2 \frac{h}{r^2} \frac{d\chi}{d\phi} m' - i\Delta(h\chi) + \frac{h^2}{r^2} \left(\frac{d\chi}{d\phi} \right)^2 + \chi^2 \left(\frac{dh}{dr} \right)^2 \right] W_{n',m'}(r^2/2) \right\} dr d\phi \end{aligned}$$

A $\chi = \chi(\phi)$, $g = g(r)$ és $h = h(r)$ függvények konkrét alakja az előző alfejezetben szerepelt.

A (10) mátrixelemek számításához szükséges második integrált hasonlóképpen meg lehet adni. Először felbontjuk a Besseles és Whittakeres tar-

⁹Az egyszerűség kedvéért innen ismét a 2. fejezetben definiált hossz és energiaegységekben dolgozunk. Ekkor nem jelenik meg explicit a \hbar , e és M értéke, csak az $s = R_0^2/2$ dimenziótlan hiányzó fluxus.

tományokra az integrált

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{R(\phi)}^{R_{max}} dr = \int_0^{2\pi} d\phi \theta(R_0 - R(\phi)) \int_{R(\phi)}^{R_0} dr + \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\max(R_0, R(\phi))}^{R_{max}} dr$$

Behelyettesítve explicite

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\phi \theta(R_0 - R(\phi)) \int_{R(\phi)}^{R_0} dr A_{n,m} A_{n',m'} J_m(\sqrt{E_{n,m}} r) \left\{ -2i \frac{dg}{dr} \chi \sqrt{E_{n',m'}} J_{m'}(\sqrt{E_{n',m'}} r) \right. \\ & \left. + \left[\left(\frac{r^2}{2} - s - g \frac{d\chi}{d\phi} \right) \frac{2m'}{r^2} - i\Delta(g\chi) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{r^2}{2} - s - g \frac{d\chi}{d\phi} \right)^2 + \chi^2 \left(\frac{dg}{dr} \right)^2 \right] J_{m'} \right\} \\ & + \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\max(R_0, R(\phi))}^{R_{max}} dr B_{n,m} B_{n',m'} W_{n,m}(r^2/2) \left\{ -2i \frac{dg}{dr} \chi r W_{n',m'}(r^2/2) \right. \\ & \left. + \left[\left(\frac{r^2}{2} - s - g \frac{d\chi}{d\phi} \right) \frac{2m'}{r^2} - i\Delta(g\chi) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{r^2}{2} - s - g \frac{d\chi}{d\phi} \right)^2 + \chi^2 \left(\frac{dg}{dr} \right)^2 \right] W_{n',m'} \right\} \end{aligned}$$

A $J_{m'}$ ill. $W_{n',m'}$ függvény ki nem írt argumentuma $\sqrt{E_{n',m'}} r$ ill. $r^2/2$

És végül a (10) mátrixelemek számításához szükséges harmadik integrál

$$\int_0^{2\pi} \int_{R_0}^{R_{max}} B_{n,m} B_{n',m'} W_{n,m}(r) W_{n',m'}(r) \left[\left(r^2 - \frac{2s}{r^2} \right) m' + \left(\frac{r}{2} - \frac{s}{r} \right)^2 \right] dr d\phi$$

A fentiekben a mátrixelemek számításához szükséges három integrált sikerült felírni. Összesen 5 integrál összegeként lehetett kifejezni, amelyek mind az $R_{min} < r < R_{max}$ gyűrű egy részhalmazára vonatkoztak. A 2.3. részben megmutattuk, hogy a nagy m vagy n -hez tartozó hullámfüggvények nagyrészt az R_0 sugárnál sokkal nagyobb távolságban lesznek nullától lényegesen különbözőek. (A nagyenergiás állapotok szétkenődnek, a nagy perdületű tartója kifelé tolódik.) A gyűrűre vonatkozó integrálok tehát csak a kis n és m esetén lesznek relevánsak. A diagonalizálandó mátrix nagy indexű komponensei elhanyagolhatóak lesznek $E_j \delta_{i,j}$ mellett. Ezen véges altértől eltekintve tehát az eredetivel közel azonos, gyakorlatilag diagonális Hamiltonmátrixot kapunk. Az i . nagy energiájú vagy impulzusmomentumú sajátérték a megfelelő E_i antikör-energia lesz, és a sajátfüggvény is a hozzárendelt antikör¹⁰ i . sajátfüggvényével lesz azonos.

¹⁰A tárgyalt girbe-gurba amőba alakú antidotból hiányzó fluxus s , akkor a hozzárendelt antikör olyan, hogy azonos fluxus hiányzik belőle. Másképpen fogalmazva a mágneses tértől mentes amőba területe egyenlő a kör területével.

4. Összegzés, további tervek

A dolgozatban megadtuk az antikör probléma egzakt és szemiklasszikus megoldását és az általános antidot esetére vonatkozó általánosítást. A hullámfüggvény belül a Bessel függvény, kívül a Whittaker függvény volt. A WKB megoldás energiaértékei a legkisebb kvantumszámú állapotoktól eltekintve tökéletesen közelítették a tényleges energiaértékeket. A szemiklasszikus tárgyalással megadtuk a hullámfüggvény maximumának közelítőértékét. Osztályoztuk a lehetséges pályákat. A fázistér 6 tartományra esett szét. A nagy impulzusmomentum abszolútértékű állapotok ($|m| > \sqrt{2sE}$ és $|m - s| > s$) a kört elkerülő, pozitív és negatív impulzusmomentumú Landau szinteknek megfelelő effektív impulzusmomentumú sajátfüggvények. A $0 < m < 2s$ állapotok (azaz $|m - s| < s$) a mágneses peremállapotok voltak, amik a kör határán található inhomogenitás következményei. Az $m = 0$ -s állapotok a kör középpontján áthaladó klasszikus pályáknak feleltek meg. Végül megkülönböztettük a nagy energiájú pozitív és negatív impulzusmomentumú állapotokat, amelyek a térben olyan szétterült állapotok, amelyek mind a szemiklasszikus viselkedés, mind az egzakt hullámfüggvény alapján átlagosan a körön kívül, de a kör belsejében sem elhanyagolható módon megtalálhatók.

Továbbá megnéztük a tetszőleges alakú antidot esetét. Az azonos s fluxusparaméterű körre vonatkozó bázisban megadtuk a Hamilton-mátrixot. Nagy indexekre a diagonális elemek túlsúlya révén megmutattuk, hogy a nagy impulzusmomentumú sajátállapotok azonosak a hozzárendelt antikör sajátállapotaival.

A mágneses gyűrű vizsgálatánál az ottani eset alapján megfogalmazták [16] a sejtést, hogy az energiaspektrum kritikusan függ a hiányzó fluxus kvantum számértékét és sokkal kevésbé a mező geometriájától. Az itt közölt megoldásból tisztán látható ennek oka: a kifejtés gyorsan konvergáló bázisa kizárólag s -től függ. A térrész geometriájától – ahol a mágneses tér eltér a B értéktől – a képletekben a belül- és körülírt kör R_{min} és R_{max} sugara a lényeges, ami meghatározza a perturbáció integrálási tartományát, illetve $\chi(\phi)$ -n keresztül az integrandus függ az $R(\phi)$ explicit alakjától. Egy recés határú s , R_{min} és R_{max} paraméterű antidot fizikai jellemzői csak harmadik korrekcióban térnek el az azonos paraméterű lekerekített antidottól. Az alkalmazások szempontjából tehát fontos az antiellipszis vizsgálata, amit a közeljövőben szeretnénk elvégezni.

Az antidot sajátértékproblémájának megoldása a 2DEG rendszerekre mérhető következményekkel is jár. Az E_n sajátértékek előállítását követően lehetőség van a $\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial B^2}$ mágneses szuszceptibilitás és a $M = -\frac{\partial F}{\partial B}$ mágneszettség elméleti úton történő kiszámítására. A kísérletben az antidot körül jelenlévő

mágneses teret változtatva ezen fizikai mennyiségek direkt módon mérhetőek, a dolgozatban közölt számításnak tehát fontos kísérleti relevanciája van.

5. Köszönetnyilvánítás

Mindenekelőtt témavezetőmnek, Cserti Józsefnek szeretném megköszönni a féléves együttműködésünk során tanúsított kitartó és lelkes segítségét. Köszönöm Polinák Péter segítségét a Kummer függvények programozásával kapcsolatban. Hálás vagyok Gáspár Merse Elődnek a klasszikus elektronpályákat bemutató ábrák elkészítéséért. Végül köszönöm Pollner Péternek, hogy felügyelte a Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék számítógépes rendszer hatékony működését és használatát lehetővé tette számomra.

6. Appendix A: vektorpotenciál

Ebben a részben bemutatjuk a vektorpotenciál levezetésének általános módját. Itt magasabb szintű matematikát használunk: a differenciális formákkal való leírást. Ezen a nyelven szemléletes a görbült terekben realizált elektromágneses elmélet. (Lásd pl. [19].) A dolgozatban tárgyalt probléma ugyan sík 2DEG rendszerre lett kitérve, mégis az áttekinthető tárgyalás az antiamőba által előírt görbevonaltú koordinátázás használatával lehetséges.

A kör esetében a forgásszimmetria miatt kézenfekvő volt a szimmetrikus mértéket használni, ahol a vektorpotenciál az \hat{e}_ϕ tangenciális irányba mutatott. Arra gyanakodhatunk, hogy az általános esetben is az amőba alakú antidot görbevonaltú koordinátázáshoz illeszkedő mértékben lesz egyszerű a vektorpotenciál. Legyen az amőba határvonala az $\vec{f}(\lambda)$ ¹¹ ívhosszparaméterezéssel megadva. Az amőba csillagszerű, tehát kell legyen egy csillagközpontnak hívott O belső pontja, "amiből nézve konvex"¹². Ezekután megadhatjuk a sík amőbaparaméterezését, ahol az O középpontú koordinátarendszerben $\vec{r} = \xi \vec{f}(\lambda)$. ξ az általánosított sugárváltozó, ami megadja, hogy hányszorosára kell nagyítani az amőbát, hogy a meghatározott pontot tartalmazza, és λ az általánosított szög, ami megadja, hogy a felnagyított amőba melyik pontjáról is van szó¹³. Ezzel definiáltuk a külső deriválással kapható $d\lambda$ és a $d\xi$ elsőrendű formákat. Ezeket a szintfelületekkel lehet szemléltetni. A $d\xi$ a $\xi = const$ vagyis az origó középpontból felnagyított amőbák serege. A $d\lambda$ -hoz a $\lambda = const$ sugárirányú vonalak serege tartozik, amelyek az ívhosszparaméterezésnek megfelelő sűrűséggel jönnek.¹⁴ $B(\xi, \lambda) = B\theta(\xi - 1)$, ahol $\theta(x)$ a Heaviside egységugrásfüggvény.

A körre vonatkozó megoldást ebben a geometriában egy-az-egyben reprodukálhatjuk, hogy megkapjuk az általános antidot teret létrehozó vektorpotenciált. A vektorpotenciál elsőrendű forma (kovariáns vektor) kétféle felírása $\mathbf{A} = A_x dx + A_y dy = A_\xi d\xi + A_\lambda d\lambda$.¹⁵ A síkra merőleges mágne-

¹¹Ebben a részben a vektorokat nyíllal, a formákat vastagon szedett betűkkel jelöljük. A vektor komponenseit felső, a formák komponenseit alsó indexszel jelöljük. A normált bázisban a vektorkomponens fölé kalapot rakunk.

¹² $\forall x$ belső pont O-val egy olyan szakaszt határoz meg, ami teljes egészében az amőbában kell legyen

¹³Az (r, ϕ) polárkoordinátákhoz tartozó (ξ, λ) , olyan, hogy $\xi = r/|\vec{R}(\phi)|$ és $\lambda = f^{-1}(\vec{R}(\phi))$, ahol az amőba határa polárkoordinátákban $(|\vec{R}(\phi)|, \phi)$, illetve az új rendszerben $(1, \lambda)$

¹⁴Az amőba úgy metszi a sugárirányú görbesereget, hogy a metszéspontok közötti ívhossz állandó.

¹⁵A formák lineáris teret alkotnak, amelyen értelmezve van az antiszimmetrikus tensorszorozás, a külső differenciálás és a dualitásművelet. A duális forma az antiszimmetrikus egységtenzor képe, $\mathbf{w}^* = \epsilon \mathbf{w}$. Két dimenzióban ez a tenzor kétindexes. A 0-forma egy

ses tér skalármennyiség (azaz 0-forma) $B = \mathbf{dA}^*$, a vektorpotenciál külső deriváltjának (egy 2-forma) duálisa[19]. Tehát

$$\mathbf{dA} = B(x, y)\mathbf{dx} \wedge \mathbf{dy} = (\partial_\xi A_\lambda - \partial_\lambda A_\xi) d\xi \wedge d\lambda$$

Továbbá a koordinátarendszerek közti átváltás $J(\xi, \lambda) = \frac{\partial(x, y)}{\partial(\xi, \lambda)}$ Jacobi determinánsa. Könnyen belátható, hogy az amőbához illeszkedő (ξ, λ) koordinátákra való áttérés Jacobi mátrixa $J(\xi, \lambda) = \xi j(\lambda) = \xi \sqrt{F(\lambda) - (\partial_\lambda F)^2/4}$ ahol $F(\lambda) = |\vec{f}(\lambda)|^2$. Ezzel pedig $\mathbf{dx} \wedge \mathbf{dy} = J(\xi, \lambda)d\xi \wedge d\lambda$.

A vektorpotenciál levezetése ezen a nyelven a körre alkalmazott eljárással azonos, az antiamőba alakja csak a koordinátázásban tesz különbséget. Integráljuk a vektorpotenciált a ξ -szeresre felnagyított amőbára¹⁶ és használjuk a Gauss-Stokes tételt

$$\begin{aligned} \int_H \mathbf{dA} &= \oint_{\partial H} \mathbf{A} \\ \int_0^L \int_0^\xi B\theta(\xi' - 1)J(\xi', \lambda')d\xi d\lambda &= \int_0^L A_\lambda d\lambda \\ B\theta(\xi - 1)\frac{\xi^2 - 1}{2} \int_0^L j(\lambda')d\lambda &= \int_0^L A_\lambda d\lambda \end{aligned}$$

ahol a bal oldalon behelyettesítettük a Jacobi függvény alakját és a ξ' szerinti integrálást elvégeztük. Ebből az alakból szépen látszik, hogy a vektorpotenciálra jó választás

$$A_\lambda = B\theta(\xi - 1)\frac{\xi^2 - 1}{2}j(\lambda')$$

Az A_ξ komponens tetszőlegesen választható, ami a mértékszabadságnak felel meg. Visszatranszformálva polárkoordinátákra, eltűnik a $j(\lambda)$ tag

$$\mathbf{A} = B\theta(\xi - 1)\frac{\xi^2 - 1}{2}j(\lambda')\mathbf{d\lambda} = B\theta(r - R(\phi))\frac{r^2 - R(\phi)^2}{2}\mathbf{d\phi} \quad (11)$$

Az \mathbf{A} formának ezen mértékben tehát kizárólag ϕ komponense van, tehát a szimmetrikus mértéket kaptuk vissza! A kovariáns A_ϕ komponens a körön

skalár, bázisa az 1. 1-formát (egyindexes mennyiség) a 0-forma külső deriváltjából kaphatunk, pl. \mathbf{dx} és \mathbf{dy} az x és y skalárfüggvényből kapott szokásos bázis 1-formák. 2-forma kétindexes, bázisa például a $\mathbf{dx} \wedge \mathbf{dy}$. Hasznos azonosság $\mathbf{ddf} = 0$ tetszőleges f formára.

¹⁶ $H = P\{(\xi', \lambda') \mid \xi' \in [0 \dots \xi], \lambda' \in [0 \dots L]\}$, ahol P a (ξ, λ) paraméterteréből a sokaságra képző paraméterezés függvény

kívül egyszerű kvadratikus sugárfüggést mutat. A kontravariáns $A^\phi = A_\phi/r^2$, vagy normált bázisban

$$\vec{\mathbf{A}} = \frac{A_\phi}{r} \hat{e}_\phi = B \frac{r^2 - R(\phi)^2}{2r} \theta(r - R(\phi)) \hat{e}_\phi \quad (12)$$

Véleményem szerint a formákkal történt számítás is nagyon szemléletes. Látható, hogy az amőbához igazított görbevonalú koordinátázásban a vektorpotenciálra – pontosan a 2. pontban kapott módon, – csak az amőbairányú komponensre kellett kiróni bármilyen feltételt. Továbbá a formák nyelvén borzasztó egyszerű például a rotáció elvégzése

$$d\mathbf{A} = d(A_\phi d\phi) = \partial_r A_\phi d\mathbf{r} \wedge d\phi = \frac{\partial_r A_\phi}{r} d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{y} \equiv B d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{y}$$

Az utolsó egyenlőség definíció szerint kell, hogy teljesüljön. A (11) egyenletből behelyettesítve a kovariáns komponensre vonatkozó eredményt, valóban az antidot mágneses terét kapjuk.

7. Appendix B: Mértéktranszformáció

A 3.2. fejezetben elvégzett mértéktranszformációval egyszerűbb alakra hoztuk a vektorpotenciált. Itt megismételjük a számítást a formák egyszerűbb algebrájával, ami egyúttal megvilágítja az eljárás lényegét.

A vektorpotenciál (11) alakjához most megpróbálunk hozzáadni egy $\mathbf{d}\chi$ gradienst úgy, hogy azzal a külső tartományban kiküszöböljük a szögfüggést! Ezenfelül még azt is szeretnénk, ha ezáltal a $\mathbf{d}\phi$ szimmetrikus mértékben maradnánk, tehát a vektorpotenciál egy sugárfüggetlen skalár külső deriváltjaként kell előálljon. Ez ebben az esetben megoldható, hisz a vektorpotenciál valóban csak $BR(\phi)\mathbf{d}\phi/2$ -n keresztül függ a szögtől, tehát nincsenek mind r -et és ϕ -t tartalmazó vegyes tagok. A szükséges mértéktranszformáció tehát csak a következő alakú lehet

$$\mathbf{d}\chi = B \frac{R(\phi)^2 - R_0^2}{2} \mathbf{d}\phi \quad (13)$$

Ezzel tetszőleges R_0 szögfüggetlen konstans esetén kiejtjük a (11) egyenletben szereplő szögfüggést a külső tartományban. Integrálva

$$\chi(\phi) = \frac{B}{2} \int_0^\phi R(\phi')^2 d\phi' - \frac{1}{2} BR_0^2 \phi \quad (14)$$

A folytonosságból a 3.2. pontban beláttuk, hogy $R_0^2\pi$ -nek az amőba területével kell megegyeznie. Ezzel

$$\mathbf{A}_1 := \mathbf{A}_0 + \mathbf{d}\chi = \begin{cases} B(r^2 - R_0^2)\mathbf{d}\phi/2 & \text{ha } r \geq R(\phi) \\ B(R(\phi)^2 - R_0^2)\mathbf{d}\phi/2 & \text{ha } r < R(\phi) \end{cases}$$

A normált bázisban $\hat{A}^\phi = A_\phi/r$. A belső tartományon az origóban elsőrendű pólust kaptunk, a második lépésben ezt kell megszüntetni.

Olyan mértéktranszformációs függvényt választunk, ami a külső tartományban nem bántja a szögfüggetlen megoldást

$$\eta(r, \phi) := \begin{cases} 0 & \text{ha } r > R_{max} \\ -\chi(\phi)g(R_{max}, R_{min}, r) & \text{ha } R_{min} \leq r \leq R_{max} \\ -\chi(\phi) & \text{ha } r \leq R_{min} \end{cases}$$

ahol R_{min} az amőba belülrít körének, R_{max} a körülírt körének sugara. $g(a, b, x)$ a 3.2 fejezetben is definiált függvény, olyan x -ben folytonosan differenciálható függvény, ami rögzített a és b esetén $x = a$ -ra 0, $x = b$ -ra 1 értéket vesz fel,

a derivált pedig ezekben a pontokban eltűnik. Ezzel $\eta(r, \phi)$ és $\mathbf{d}\eta(r, \phi)$ folytonos függvény. Konkrétan megadunk egy ilyen függvényt:

$$g(a, b, r) := \frac{(a-r)^2}{(b-a)^3}(3b-a-2r)$$

$$\mathbf{d}g(a, b, r) = \frac{-6(a-r)(r-b)}{(a-b)^3} \mathbf{d}r$$

Végezzük el ezzel a második mértéktranszformációt

$$\mathbf{A}_2 := \mathbf{A}_1 + \mathbf{d}\eta = \begin{cases} B(r^2 - R_0^2) \mathbf{d}\phi/2 & \text{ha } r \geq R_{max} \\ B(r^2 - R_0^2) \mathbf{d}\phi/2 - \mathbf{d}[\chi(\phi)g(r)] & \text{ha } R(\phi) \leq r \leq R_{max} \\ (1-g) \mathbf{d}\chi - \chi \mathbf{d}g & \text{ha } R_{min} \leq r \leq R(\phi) \\ 0 & \text{ha } r \leq R_{min} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} B(r^2 - R_0^2) \mathbf{d}\phi/2 & \text{ha } r \geq R_{max} \\ B(r^2 - R_0^2) \mathbf{d}\phi/2 - \mathbf{d}[\chi(\phi)g(r)] & \text{ha } R(\phi) \leq r \leq R_{max} \\ \mathbf{d}[\chi(\phi)h(r)] & \text{ha } R_{min} \leq r \leq R(\phi) \\ 0 & \text{ha } r \leq R_{min} \end{cases} \quad (15)$$

ahol $h(r) = 1 - g(R_{max}, R_{min}, r) = g(R_{min}, R_{max}, r)$. Az explicit alakhoz be lehet helyettesíteni a (14) formulát, amivel a vektorpotenciál r és ϕ változókön kívül explicit csak az $R(\phi)$ függvénytől függ. Látható, hogy az antidot körülírt körön kívül ill. a belülírt körön belül pontosan az antikör vektorpotenciált kapjuk vissza. A közbülső gyűrűben a vektorpotenciálnak az eredeti mértékben (11 képlet) $R(\phi)$ mentén törése volt, ez természetesen nem változott meg, hisz ez annak a következménye, hogy itt a mágneses térnek ugrása van. A fenti g választással az A_r vektorpotenciálkomponensnek törése van a gyűrű határain is, de ez elkerülhető, ha ott g második r deriváltját is zérusnak állítjuk be. Úgy ahogy egy vektort irányított nyíllal, úgy egy formát az irányára merőleges görbesereggel lehet szemléltetni. Amennyiben egy forma előáll egy skalárfüggvény külső deriváltjaként, a formát jellemző görbék zártak, nincs végpontjuk. Az I-es tartományban \mathbf{A} eltűnik (végtelen ritka görbesereg), a II-es tartományban zárt görbékkel jellemezhető: $\chi(\phi)h(r) = cn$, $n \in \mathbb{N}$ görbesereg, azaz $r(\phi) = h^{-1}(cn/\chi(\phi))$. Az amőba határan kívül nem áll elő a vektorpotenciál egyetlen deriváltként, ezért ott a meghatározó görbesereg olyan, hogy a görbéknek végpontjuk van, az origótól egyre távolabb haladva egyre több vonal "keletkezik". A III-as tartományban ezek a vonalak görbültek, (hiszen változik a forma iránya), de a IV-es térrészben tisztán sugárirányúak. A vonalak sűrűsége itt forgásszimmetrikus, kifelé $r^2 - R_0^2$ szerint növekszik. A grafikus interpretáció koordinátafüggetlen, így tisztán áttekinthető az adott mértékválasztás. A mértéktranszformáció során egy külső derivált formát adhatunk hozzá a vektorpotenciálhoz, azaz egy zárt

görcsereggel deformálhatjuk az eredeti görcsereget. Ezzel a képpel szemléletes, hogy az A_2 mértékben egy újabb mértéktranszformáció nem segíthet a vektorpotenciál további leegyszerűsítésében.

8. Irodalomjegyzék

- [1] M.A. McCord és D.D. Awschalom, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 2153 (1990).
- [2] M.L. Leadbeater, S.J. Allen, Jr., F. DeRosa, J.P. Harbison, T. Sands, R. Ramesh, L.T. Florez és V.G. Keramidás, *J. Appl. Phys.* **69**, 4689 (1991); K.M. Kirshnan, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 2365 (1992); H.A Cremona
- [3] S.J. Bending, K. von Klitzing és K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1060 (1990).
- [4] M.L. Leadbeater, C.L. Foden, T.M. Burke, J.H. Burroughes, M.P. Pepper, *J. Phys. Condens. Matter* **7** L307 (1995).
- [5] A. Nogaret, S.J. Bending és M. Henini, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2231 (2000)
- [6] L.Solimany és B.Kramer, *Solid State Commun.* **96**, 471 (1995); H.S. Sim, K.H. Ahn, K.J. Chang, G. Ihm, N. Kim, S.J. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1501 (1998); J. Reijniers, F. M. Peeters, A.Matulis, *Phys. Rev. B* **59**, 2817 (1999)
- [7] J.E.Müller, *Phys. Rev. Lett.* **68** 385 (1992).
- [8] M. Calvo, *Phys. Rev. B* **48** 2365 (1993); *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 3329 (1994); *Phys. Rev. B* **51** 2268 (1995).
- [9] F.M. Peeters és A. Matulis, *Phys. Rev. B* **48**, 15 166 (1993); *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1518 (1994); I.S. Ibrahim és F.M. Peeters, *Am. J. Phys.* **63**, 171 (1995); *Phys. Rev. B* **52**, 17 321 (1995); **56**, 7508 (1997); J. Reijniers, F.M. Peeters és A. Matulis, *Physica (Amsterdam)* **6E**, 759 (2000)
- [10] F.M. Peeters és Vasilopoulos, *Phys. Rev. B.* **47**, 1466 (1993); P. Vasilopoulos és F.M. Peeters, *Superlattices Microstruct.* **7**, 363 (1990).
- [11] D.P. Xue és G. Xiao, *Phys. Rev. B* **45**, 5986 (1992); X.G. Wu és S.E. Ulloa, *Solid State Commun.* **82**, 945 (1992)
- [12] B.Y. Gu *et al.*, *Phys. Rev. B* **56** 13 434 (1997); J.Reijniers és F.M. Peeters, *Phys. Rev. B* **63**, 165 317 2001
- [13] H.A. Carmona, A.K. Geim, A. Nogaret, P.C. Main, T.J. Foster, M. Henini, S.P. Beaumont és M.G. Blamire, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3009 (1995);

- P.D. Ye, D. Weiss, R.R. Gehardts, M. Seeger, K. von Klitzing, K. Eberl és H. Nickel, *ibid.*, **74** 3013 (1995); S. Isawa, S. Katsumoto, A. Endo és Y. Iyle, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 706 (1995); A. Nogaret *et al.*, Phys. Rev. B **55**, R16037 (1999)
- [14] J.K. Jain, Phys. Rev. Lett. **63**, 199 (1989).
- [15] W. Kang, H.L. Störmer, L.N. Pfeiffer, K.W. Baldwin és K.W. West, Phys. Rev. Lett. **71**, 3850 (1993); R. Fleischmann, T. Geisel, C. Holz-knecht és R. Ketzmerick, Europhys. Lett. **36** 167 (1996).
- [16] N. Kim, G. Ihm, H.S. Sim, K.J. Chang, Phys. Rev. B **60**, 12 8767 (1999)
- [17] K.E. Muller, Numer. Math. **10** (2001); N.M. Temme, Numer. Math. **41** 63-82 (1983)
- [18] M. Abramowitz és I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, pp. 505, (1964)
- [19] Misner, Thorne, Wheeler, Gravitation, 90-120, 4. Electromagnetism and Differential Forms (1970)