AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-texnika və riyaziyyat elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2021 №5

PACS: 05.30.-d, 03.65. –w, 72.15.Jf, 73.21.La

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА К КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

Р.Г.АГАЕВА

Институт физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г. Джавида, 131
rena.g.aghayeva@gmail.com

Получена: 07.05.2021
Принята к печати: 17.09.2021

РЕФЕРАТ
Методом эффективного гамильтониана (МЭГ) рассчитан термомагнитный ток для квантовой точки с параболическим ограничивающим потенциалом в квантующем магнитном поле. Расчет произведен в представлении когерентных состояний и для невырожденной статистики. Полученный результат подтверждает эффективность использования МЭГ для решения термомагнитных задач в квантующем магнитном поле.

Ключевые слова: статистическая сила, метод эффективного гамильтониана, квантовая точка.

Недиссипативный термомагнитный ток в поперечном квантующем магнитном поле вычислен многими авторами [1]. Однако во всех этих работах температуру не удавалось включить в гамильтониан. Принципиальная трудность заключалась в том, что температура связана не с динамической, а со статистической силой. А как вводить статистическую силу в гамильтониан было неизвестно. И потому отпадал прямой путь расчета, и использовались разные окольные пути.

Статистическая сила была впервые включена в гамильтониан в работе [2].

Предложенный метод включения (МЭГ-метод эффективного гамильтониана) основывался на предположении, что наличие температурного градиента в системе аналогично влиянию на неё некоторого внешнего электрического поля. В МЭГ при построении гамильтониана исходили из формального соответствия электростатического потенциала температуре и величины заряда электрона постоянной Больцмана.

Для доказательства эффективности МЭГ были произведены расчеты в различных системах: в объемных образцах [2], в квантовой проволоке [3] и в квантовой плёнке [4]. Во всех случаях результаты расчётов с помощью МЭГ совпадали с результатами, вычисленными методами, не включающими статистическую силу в гамильтониан.

Целью настоящей работы является доказательство эффективности применения МЭГ и к квантовой точке. Следует отметить, что все вычисления будут сделаны в представлении когерентных состояний и для случая невырожденной статистики.

В МЭГ термомагнитный ток в поперечном квантующем магнитном поле при наличии малого и однородного градиента температуры вычислен в [2]

$$j_y = -(ien/\hbar)Tr\left(\hat{\rho}_0\left[\hat{H}_0, y\right] + \hat{\rho}_0\left[\hat{V}, y\right] + \hat{\rho}_1\left[\hat{H}_0, y\right]\right), \tag{1}$$

здесь $(-e)$ - заряд электрона, квантующее магнитное поле направлено вдоль оси z, температура $T = T(x)$, j_y - ток вдоль оси y, n - плотность электронов проводимости, координата x изменяется

в интервале $-L_x/2 < x < L_x/2$,

$$\hat{V} = \delta\left(\xi - \frac{1}{\gamma}\right)\left(\frac{x}{L_x} + \frac{1}{2}\right) - \frac{\delta}{2L_x}\left(\hat{H}_0 x + x\hat{H}_0\right) - \frac{\delta}{2}\hat{H}_0, \tag{2}$$

где $T_0 = T\left(-\frac{L_x}{2}\right)$, ξ - химический потенциал электронов проводимости, $\gamma = \left(kT_0\right)^{-1}$, k - постоянная Больцмана, $\delta << 1$, $\hat{\rho}_0$ - равновесная матрица плотности и $\hat{\rho}_1$ - неравновесная добавка к матрице плотности

$$\hat{\rho}_0 = Z_0^{-1} Tr\, e^{-\hat{H}_0\gamma}, \quad Z_0 = Tr\, e^{-\hat{H}_0\gamma}, \tag{3}$$

$$\hat{\rho}_1 = -\hat{\rho}_0 \int_0^{\gamma} d\gamma' \exp(\hat{H}_0\gamma')\hat{V}\exp(-\hat{H}_0\gamma'). \tag{4}$$

Построим когерентные состояния для квантовой точки с параболическим ограничивающим потенциалом, находящейся в квантующем магнитном поле $H \parallel z$. Вектор-потенциал выбираем в виде $A = \left(-Hy/2,\ Hx/2,\ 0\right)$.

Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x - \frac{m\omega_c\hat{y}}{2}\right)^2 + \left(\hat{p}_y + \frac{m\omega_c\hat{x}}{2}\right)^2 + \hat{p}_z^2 + m^2\omega_0^2\left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2\right)\right], \tag{5}$$

где $\omega_c = eH/mc$ - циклотронная частота, ω_0 - характеризует параболический потенциал квантовой точки, m - масса электрона, e - абсолютное значение его заряда, c - скорость света в вакууме.

Следуя методу [2] построения когерентных состояний как собственных функций полной системы бозонных операторов уничтожения, являющихся интегралами движения квантовой системы, введем такие операторы для (5)

$$\hat{A}_\alpha^- = -i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[\frac{\hat{x} - i\hat{y}}{2} + \frac{\hat{p}_y + i\hat{p}_x}{m\omega}\right]\exp\left(i\omega_+ t\right), \tag{6}$$

$$\hat{A}_\beta^- = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[\frac{\hat{x} + i\hat{y}}{2} - \frac{\hat{p}_y - i\hat{p}_x}{m\omega}\right]\exp\left(i\omega_- t\right), \tag{7}$$

$$\hat{A}_\sigma^- = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\left[\hat{z} + \frac{i\hat{p}_z}{m\omega_0}\right]\exp\left(i\omega_0 t\right), \tag{8}$$

$$\omega_\pm = \frac{\omega \pm \omega_c}{2}, \quad \omega^2 = \omega_c^2 + 4\omega_0^2, \tag{9}$$

$$\left[\hat{A}_\alpha^\pm, \hat{A}_\beta^\pm\right] = \left[\hat{A}_\alpha^\pm, \hat{A}_\sigma^\pm\right] = \left[\hat{A}_\beta^\pm, \hat{A}_\sigma^\pm\right] = 0$$

Легко проверить, что гамильтониан (5) можно представить в виде

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_\alpha + \hat{H}_\beta + \hat{H}_\sigma, \tag{10}$$

$$\hat{H}_\alpha = \hbar\omega_+\left(\hat{A}_\alpha^+\hat{A}_\alpha^- + \frac{1}{2}\right),\ \hat{H}_\beta = \hbar\omega_-\left(\hat{A}_\beta^+\hat{A}_\beta^- + \frac{1}{2}\right), \tag{11}$$

$$\hat{H}_\sigma = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_z^2 + m^2\omega_0^2 z^2\right) = \hbar\omega_0\left(\hat{A}_\sigma^+\hat{A}_\sigma^- + \frac{1}{2}\right).$$

Решение волнового уравнения рассматриваемой задачи сводится к следующей волновой функции

$$\psi = |\alpha\rangle|\beta\rangle|\sigma\rangle, \tag{12}$$

где α, β и σ - произвольные комплексные числа, представляющие собой полный набор квантовых чисел данной задачи.

Нетрудно убедиться в том, что $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ и $|\sigma\rangle$ удовлетворяют всем необходимым требованиям, предъявляемым к когерентным состояниям, а именно (перечислим на примере $|\alpha\rangle$):

1. $|\alpha\rangle$ является собственной функцией бозонного оператора уничтожения и интеграла движения $\hat{A}_\alpha^-$:

$$\hat{A}_\alpha^-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle,\ \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_\alpha, \hat{A}_\alpha^\pm\right] = 0,\ \left[\hat{A}_\alpha^-, \hat{A}_\alpha^+\right] = 1. \tag{13}$$

2. $|\alpha\rangle$ удовлетворяет условию нормировки:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1. \tag{14}$$

Волновые функции $|\alpha\rangle$ образуют полную систему, но они не являются ортогональными.

3. $|\alpha\rangle$ могут быть получены из основного состояния $|0\rangle$, для которого $\hat{A}_\alpha|0\rangle = 0$.

Рассмотрим j_y, т.е. (1) где первое слагаемое равно нулю. В этом легко убедиться, производя циклическую перестановку под знаком следа, т.е. Tr. Таким образом:

$$Tr\hat{\rho}_0\left[\hat{H}_0, y\right] = 0 \tag{15}$$

Второе слагаемое в (1) содержит $\left[\hat{V}, y\right]$. Выразим y и x через $A_\alpha^\pm$, $A_\beta^\pm$ с помощью (6) и (7)

$$y = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(i\,e^{i\omega_- t}\hat{A}_\beta^+ - i\,e^{-i\omega_- t}\hat{A}_\beta^- - e^{-i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^- - e^{i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^+\right), \tag{16}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(e^{i\omega_- t}\hat{A}_\beta^+ + e^{-i\omega_- t}\hat{A}_\beta^- + ie^{-i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^- - ie^{i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^+\right). \tag{17}$$

Введем обозначения

$$\hat{a}_\beta = e^{i\omega_- t}\hat{A}_\beta^+ + e^{-i\omega_- t}\hat{A}_\beta^-,\ \hat{a}_\alpha = e^{-i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^- - e^{i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^+, \tag{18}$$

а также учтем (3.6) стр.189 [5]

$$\left[\hat{A}^+\hat{A}^-, \hat{A}^{+m}\right] = m\hat{A}^{+m},\ \left[\hat{A}^+\hat{A}^-, \hat{A}^{-m}\right] = -m\hat{A}^{-m}, \tag{19}$$

тогда получим

$$\left[\hat{H}_0, y\right] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hbar\omega_+\hat{a}_\alpha + i\hbar\omega_-\hat{a}_\beta\right). \tag{20}$$

С помощью (2) и (20) $\left[\hat{V}, y\right]$ легко преобразуется к виду

$$\left[\hat{V}, y\right] = -\frac{\delta}{2L_x}\left(\left[\hat{H}_0, y\right]x + x\left[\hat{H}_0, y\right]\right) - \frac{\delta}{2}\left[\hat{H}_0, y\right]. \tag{21}$$

В первом и втором слагаемых из (21) подставим (20) вместо $\left[\hat{H}_0, y\right]$ и выразим x через $\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta$, используя (17), (18)

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}_\beta + i\hat{a}_\alpha\right). \tag{22}$$

Тогда вместо (21) получим

$$\left[\hat{V}, y\right] = -\frac{\delta}{L_x}\frac{\hbar}{2m\omega}\left\{\hbar\left(\omega_+ - \omega_-\right)\hat{a}_\alpha\hat{a}_\beta + i\hbar\omega_+\hat{a}_\alpha^2 + i\hbar\omega_-\hat{a}_\beta^2\right\} - \frac{\delta}{2}\left[\hat{H}_0, y\right]. \tag{23}$$

Вычислим

$$Tr\hat{\rho}_0\left[\hat{V}, y\right] = -\frac{\delta\hbar^2}{2L_x m\omega}Tr\hat{\rho}_0\left(\omega_c\hat{a}_\alpha\hat{a}_\beta + i\omega_+\hat{a}_\alpha^2 + i\omega_-\hat{a}_\beta^2\right). \tag{24}$$

В (24) приняли во внимание (15) и (9). Подставим в (24) формулы (18), (3), (10) - (12).

Далее расчеты в данной работе будем вести по следующей схеме (25), состоящей из нижеприведенных пунктов 1.- 5.:

1. след оператора есть

$$Tr\hat{M} = \frac{1}{\pi}\int d^2\sigma\frac{1}{\pi}\int d^2\beta\frac{1}{\pi}d^2\alpha\left\langle\sigma\right|\left\langle\beta\right|\left\langle\alpha\right|\hat{M}\left|\alpha\right\rangle\left|\beta\right\rangle\left|\sigma\right\rangle,$$

2. упорядочим операторы $\hat{A}_i^\pm$,

3. имея в виду (27) (см. ниже), отбрасываем слагаемые с нечетным количеством $\hat{A}_i^\pm$,

4. переходим к собственным значениям операторов,

5. берем интегралы по α, β, σ с помощью тождества (3.83) из [5]

$$\langle i|\exp\left(x\hat{A}_i^+\hat{A}_i\right)|i\rangle = \exp\left(-C_i|i|^2\right), \tag{26}$$

где i может принимать одно из значений α, β или σ, и уравнения (13.17) [6]

$$\int d^2 i\, e^{-C_i|i|^2} i^{*m} i^l = \frac{\pi\, l!}{C_i^{l+1}}\delta_{ml}\ (\mathrm{Re}\, C_i > 0), \tag{27}$$

$$C_\alpha = 1 - e^{-\hbar\omega_+\gamma},\ C_\beta = 1 - e^{-\hbar\omega_-\gamma},\ C_\sigma = 1 - e^{-i\hbar\omega_0\gamma}. \tag{28}$$

В итоге получим (24) в следующем виде

$$Tr\,\hat{\rho}_0\left[\hat{V}, y\right] = -\frac{i\delta\hbar^2}{L_x m\omega}\left(\frac{\omega_-}{C_\beta} - \frac{\omega_+}{C_\alpha} + \frac{\omega_c}{2}\right). \tag{29}$$

Рассмотрим третье слагаемое из (1), т.е. $Tr\,\hat{\rho}_1\left[\hat{H}_0, y\right]$, где $\hat{\rho}_1$ дается выражением (4), а $\left[\hat{H}_0, y\right]$ формулой (20). Произведем циклическую перестановку под знаком Tr и используем функции (3.46) [5]

$$\exp(v\hat{A}^+\hat{A}^-)\,f(\hat{A}^-\hat{A}^+)\exp(-v\hat{A}^+\hat{A}^-) = f(\hat{A}^-e^{-v}, \hat{A}^+e^{v}).$$

Введем обозначения

$$\hat{a}_\alpha^{'} = e^{-i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^- e^{\hbar\omega_+\gamma'} - e^{i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^+ e^{-\hbar\omega_+\gamma'}$$
$$\hat{a}_\beta^{'} = e^{i\omega_- t}\hat{A}_\beta^+ e^{-\hbar\omega_-\gamma'} + e^{-i\omega_- t}\hat{A}_\beta^- e^{\hbar\omega_-\gamma'} \tag{30}$$

Учтем в $\hat{V}$ (2) и (30), тогда

$$Tr\hat{\rho}_1\left[\hat{H}_0, y\right] = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}Tr\hat{\rho}_0\int_0^\gamma d\gamma'\left\{\left(\xi - \frac{1}{\gamma}\right)\delta\left(\frac{x}{L_x} + \frac{1}{2}\right) - \frac{\delta}{2}\left(\hat{H}_0\frac{x}{L_x} + \frac{x}{L_x}\hat{H}_0\right) - \frac{\delta}{2}\hat{H}_0\right\}\left(\hbar\omega_+\hat{a}_\alpha^{'} + i\hbar\omega_-\hat{a}_\beta^{'}\right). \tag{31}$$

Произведем расчет первого слагаемого в (31), следуя схеме (25). Получим с учетом (17) и (30)

$$\int_0^\gamma d\gamma' Tr\hat{\rho}_0\left(\frac{x}{L_x} + \frac{1}{2}\right)\left(\hbar\omega_+ a_\alpha^{'} + i\hbar\omega_- a_\beta^{'}\right) = \int_0^\gamma d\gamma'\frac{\hbar J}{2L_x m\omega}, \tag{32}$$

где

$$J = \left\{\omega_-\left[\left(e^{\hbar\omega_-\gamma'} + e^{-\hbar\omega_-\gamma'}\right)C_\beta^{-1} - e^{\hbar\omega_-\gamma'}\right] - \omega_+\left[\left(e^{\hbar\omega_+\gamma'} + e^{-\hbar\omega_+\gamma'}\right)C_\alpha^{-1} - e^{\hbar\omega_+\gamma'}\right]\right\}.$$

Возьмем $\int_0^\gamma d\gamma'$ в (32). Нетрудно убедиться в том, что получим ноль. Четвертое слагаемое в (31) равно нулю в соответствии с пунктом 3. схемы (25): оно обращается в ноль при интегрировании по α, β.

Рассмотрим второе слагаемое в (31)

$$\frac{\delta}{2L_x}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\int_0^\gamma d\gamma' Tr\hat{\rho}_0\hat{H}_0 x(\hbar\omega_+ a_\alpha^{'} + i\hbar\omega_- a_\beta^{'}). \tag{33}$$

Подставим в (33) формулы (10), (11), (17), (30) и применим схему расчета (25). При этом возникают два выражения, которые упорядочим с помощью (13)

$$\hat{A}^+\hat{A}^- = \hat{A}^-\hat{A}^+ - 1,\quad \hat{A}^+\hat{A}^-\hat{A}^-\hat{A}^+ = \hat{A}^-\hat{A}^-\hat{A}^+\hat{A}^+ - 2\hat{A}^-\hat{A}^+.$$

Кроме того, одно из полученных в (33) слагаемых совпадает с (32), и потому равно нулю. В итоге (33) переходит в

$$\frac{i\delta\hbar^3}{4L_x m\omega}\int_0^\gamma d\gamma'(J_1 + J_2), \tag{34}$$

где с учётом (32) и (28)

$$J_1 = \omega_+ e^{-\hbar\omega_+\gamma}C_\alpha^{-1}J, \tag{35}$$

$$J_2 = -J_1(\omega_+ \leftrightarrow \omega_-,\ \alpha \leftrightarrow \beta). \tag{36}$$

Вычислим в (34) интеграл по γ', получим

$$\frac{i\delta\hbar^2}{4L_x m\omega}\left\{\omega_-\left(1 + e^{-\hbar\omega_-\gamma}\right)C_\beta^{-1} - \omega_+\left(1 + e^{-\hbar\omega_+\gamma}\right)C_\alpha^{-1}\right\}, \tag{37}$$

(37) есть результат расчета второго слагаемого из (31).

Подставляя в $x\hat{H}_0$ формулы (10), (11) и (17) и учитывая пункты 2. и 3. схемы (25), получим

$$x\hat{H}_0 = \hat{H}_0 x - \hat{D}, \tag{38}$$

где

$$\hat{D} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\hbar\omega_-\left(e^{-i\omega_- t}\hat{A}_\beta^- - e^{i\omega_- t}\hat{A}_\beta^+\right) + i\hbar\omega_+\left(e^{-i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^- + e^{i\omega_+ t}\hat{A}_\alpha^+\right)\right]. \tag{39}$$

Вычислим, следуя схеме (25) и учитывая (39) и (30), следующее выражение

$$\frac{\delta}{2L_x}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\int_0^\gamma d\gamma' Tr\hat{\rho}_0\hat{D}\left(\hbar\omega_+ a_\alpha^{'} + i\hbar\omega_- a_\beta^{'}\right) =$$
$$= \frac{i\delta\hbar^3}{4L_x m\omega}\int_0^\gamma d\gamma'\left\{\omega_-^2\left[\left(e^{-\hbar\omega_-\gamma'} - e^{\hbar\omega_-\gamma'}\right)C_\beta^{-1} + e^{\hbar\omega_-\gamma'}\right] - \omega_+^2\left[\left(e^{\hbar\omega_+\gamma'} - e^{-\hbar\omega_+\gamma'}\right)C_\alpha^{-1} + e^{\hbar\omega_+\gamma'}\right]\right\}. \tag{40}$$

Подставим в (40) выражения для C_α и C_β из (28) и возьмем интеграл по γ'. В итоге получим ноль. Тогда третье слагаемое из (31) сведется ко второму, т.е. к (37). Окончательно (см. (31)) $Tr\hat{\rho}_1\left[\hat{H}_0, y\right]$ будет равна удвоенному выражению, даваемому (31).

Учтем формулы (15), (29) и (37) в j_y (см. (1))

$$j_y = -\frac{ien}{\hbar}\left\{-\frac{i\delta\hbar^2}{L_x m\omega}\left(\frac{\omega_-}{C_\beta} - \frac{\omega_+}{C_\alpha} + \frac{\omega_c}{2}\right) + 2\frac{i\delta\hbar^2}{4L_x m\omega}\left(\frac{\omega_-}{C_\beta}\left(1 + e^{-\hbar\omega_-\gamma}\right) - \frac{\omega_+}{C_\alpha}\left(1 + e^{-\hbar\omega_+\gamma}\right)\right)\right\}.$$

После простых преобразований, подстановки из (28) выражений для C_α и C_β, а также замене $(\omega_+ - \omega_-)$ на ω_c согласно (9) получим

$$j_y = 0. \tag{41}$$

Результат (41) очевиден и физически обоснован для рассматриваемой системы: квантовой точки. Важность полученного результата в том, что он еще раз доказал эффективность МЭГ как метода, сделавшего возможным:

а) включение температуры (статистический силы) в гамильтониан;

б) и прямой путь расчета термомагнитного тока в квантующем магнитном поле.

1. Б.М.Аскеров. *Электронные явления переноса в полупроводниках. М., Наука,* (1985) 320.
2. R.G.Aghayeva. *Fluctuation of the thermomagnetic Current, J. Phys. C: Solid State,* **18** (1985) 5841-5848.
3. R.G.Aghayeva. *The new method of calculating the thermomagnetic current. Quantum wire, Fizika,* **XV №4** (2009) 3-5.
4. R.G.Aghayeva. *On the Inclusion of the Statistical Force in the Hamiltonian, Physics of the Solid State*, **56** (2014)1323-1326.
5. У.Люиселл. *Излучение и шумы в квантовой электронике. М., Наука,* (1972) 400.
6. Я.Перина. *Когерентность света, М., Мир,* (1974) 367.

EFFEKTİV HAMİLTONİAN METODUNUN KVANT NÖQTƏSİNƏ TƏTBİQİ

R.Q.AĞAYEVA

Effektiv Hamiltonian metodundan (EHM) istifadə edərək, kvantlayıcı maqnit sahəsində parabolik məhdudlaşdırma potensialı olan kvant nöqtəsi üçün termomaqnit cərəyanı hesablanıb. Hesablama koherent hallar təsvirində və cırlaşmamış statistika üçün aparılmışdır. Alınan nəticə kvantlayıcı maqnit sahəsindəki termomaqnit problemlərinin həlli üçün EHM istifadə səmərəliliyini təsdiqləyir.

APPLICATION OF THE EFFECTIVE HAMILTONIAN METHOD TO THE QUANTUM DOT

R.G.AGHAYEVA

A thermomagnetic current for a quantum dot with a parabolic confining potential in a quantizing magnetic field has been calculated by the effective Hamiltonian method (EHM). The calculation was performed in a representation of coherent states and for a non-degenerate statistic. The obtained result has confirmed the efficiency of using EHM for solving thermomagnetic problems in a quantizing magnetic field.