

ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

На прошлой лекции мы выяснили, причиной сверхтонкого расщепления уровней энергии водорода является магнитное поле, которое порождает магнитный момент протона. Сегодня мы подробнее обсудим особенности поведения электрона в магнитном поле.

ДИАМАГНЕТИЗМ СВОБОДНОГО БЕССПИНОВОГО ЭЛЕКТРОНА

Функция Гамильтона бесспинового электрона, как известно, равна

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2.$$

Начнем с простейшего случая, когда электрон находится в однородном магнитном поле \vec{H} . Направим ось z наших координат вдоль поля и выберем векторный потенциал в форме

$$\vec{A}(\vec{r}) = (A_x = -Hy, \quad A_y = A_z = 0).$$

Тогда гамильтониан примет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \frac{1}{2m} (p_y^2 + p_z^2).$$

Уравнения Гайзенберга в этом случае сводятся к системе

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{1}{m} \left(p_x + \frac{eH}{c} y \right), & \frac{dp_x}{dt} &= 0, \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{1}{m} p_y, & \frac{dp_y}{dt} &= -\omega \left(p_x + \frac{eH}{c} y \right), \\ \frac{dz}{dt} &= \frac{1}{m} p_z, & \frac{dp_z}{dt} &= 0. \end{aligned}$$

Нетрудно убедиться в том, что операторы

$$x_0 = x + \frac{c}{eH} p_y, \quad y_0 = \frac{c}{eH} p_x$$

интегралами движения. В классической механике эти величины имеют смысл координат центра окружности, по которой движется электрон, однако в квантовом случае дело несколько усложняется.

Определяя частоту

$$\omega = \frac{eH}{mc},$$

и замечая, что

$$\frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(y - y_0)^2 = \frac{1}{2m}\left(p_x + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \frac{1}{2m}p_y^2,$$

приведем гамильтониан к виду

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(y - y_0)^2 + \frac{1}{2m}p_z^2.$$

Поскольку слагаемые, зависящие от y , представляют собой гамильтониан гармонического осциллятора, то уровни энергии определяются формулой

$$E_{n,p_z} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2m}p_z^2 = \mu_B H\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2m}p_z^2.$$

Первое слагаемое в этой формуле определяет уровни энергии, связанные с движением в перпендикулярной магнитному полю плоскости. Их называют **уровнями Ландау**. Зависимость уровней энергии от напряженности поля приводит к чисто квантовому эффекту – **диамагнетизму электронов**. Появление этого эффекта легко понять из следующих соображений. Поскольку скорость в гамильтоновом формализме определяется как производная

$$\vec{v} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right),$$

то энергия электрона в магнитном поле, как и в случае свободного электрона определяется только его скоростью

$$E = \frac{1}{2}m\vec{v}^2.$$

Эта формула для энергии электрона справедлива и в квантовом случае. Почему же появляются уровни энергии, зависящие от напряженности поля? Дело в том, что в квантовом случае составляющие скорости, зависящие как от импульсов, так и от координат, не коммутируют друг с другом. Чтобы сделать формулы симметричнее, удобно определить векторный потенциал как

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{H} \times \vec{r}).$$

В этом случае

$$\vec{v}_\alpha = \frac{1}{m}\left(p_\alpha - \frac{e}{2c}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}H_\beta x_\gamma\right),$$

поэтому

$$[v_\alpha, v_\beta] = i\frac{e\hbar}{m^2c}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}H_\gamma,$$

т.е.

$$[v_x, v_y] = i \frac{e\hbar}{m^2 c} H_z, \quad [v_y, v_z] = i \frac{e\hbar}{m^2 c} H_x, \quad [v_z, v_x] = i \frac{e\hbar}{m^2 c} H_y.$$

Можно предположить, что любое орбитальное движение электронов приводит к появлению диамагнетизма. Чтобы выяснить, насколько правдоподобно это предположение, рассмотрим поведение атома водорода в магнитном поле.

АТОМ ВОДОРОДА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Если рассматривать эффекты с точностью до тонкой структуры, то гамильтониан атома равен

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e^2}{r} - \mathcal{H}_f - 2\mu_B \vec{s} \vec{H}, \quad \vec{H} = \text{rot} \vec{A}.$$

Если векторный потенциал удовлетворяет условию

$$\text{div} \vec{A} = 0,$$

то

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 - \frac{e}{mc} \vec{A} \vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2.$$

Пренебрегая квадратичным по полю слагаемым, запишем гамильтониан в форме

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1,$$

где \mathcal{H}_0 , как и прежде, оператор

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 - \frac{e^2}{r},$$

а

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{e}{mc} \vec{A} \vec{p} + \mathcal{H}_f + 2\mu_B \vec{s} \vec{H}.$$

Поправки к уровням энергии можно снова вычислить, используя теорему Фейнмана-Геельмана, однако следует внимательнее отнестись к выбору правильных векторов состояний в нулевом приближении.

Если поле можно считать однородным (т.е. если можно пренебречь его изменениями на расстояниях порядка радиуса атома), векторный потенциал можно выбрать в форме

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{r}.$$

В этом случае

$$-\frac{e}{mc} \vec{A} \vec{p} = \mu_B \vec{H} \vec{l}$$

оператор \mathcal{H}_1 превращается в

$$\mathcal{H}_1 = \mu_B \vec{H} \vec{l} + \mathcal{H}_f + 2\mu_B \vec{H} \vec{s} = \mu_B \vec{H} \vec{J} + \mathcal{H}_f + \mu_B \vec{H} \vec{s}.$$

Пока магнитного поля нет, то правильные векторы в приближении тонкой структуры – это векторы состояний с определенной в нерелятивистском приближении энергией (определенным главным квантовым числом n), определенным квадратом момента импульса (квантовым числом l), определенным квадратом полного момента импульса (квантовым числом j) и его проекцией на какую-либо ось (квантовое число m), причем эту ось можно выбрать произвольно. В случае ненулевого поля появляется выделенное направление. В этом случае гамильтониан уже не коммутирует с вектором полного момента количества движения:

$$[J_\alpha, \mathcal{H}_1] = i\mu_B (\vec{H} \times \vec{s})_\alpha.$$

Интегралами движения остаются лишь операторы \vec{l}^2 и $\vec{J}\vec{H}$. Если направить ось z вдоль поля, то правильные векторы нулевого приближения можно будет искать в форме

$$\Psi = \sum_j \Psi(n, l, j, m) c_j.$$

Вычисление среднего значения оператора \mathcal{H}_1 приводит к выражению

$$\langle \Psi | \mathcal{H}_1 | \Psi \rangle = \sum_{jj'} c_j^* W_{jj'} c_{j'},$$

поэтому выбор коэффициентов c^*, c сводится к поиску минимума полученной квадратичной формы при дополнительном условии

$$\sum_j |c_j|^2 = 1.$$

Можно снять ограничение на коэффициенты c^*, c , перейдя к форме

$$\Phi(c^*, c) = \sum_{jj'} c_j^* W_{jj'} c_{j'} - E \left(\sum_j |c_j|^2 - 1 \right).$$

Множитель Лагранжа E имеет смысл энергии. Условия минимума приводят к уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial c_j^*} &= \sum_{j'} W_{jj'} c_{j'} - E c_j = 0, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial c_j} &= \sum_{j'} c_{j'}^* W_{j'j} - E c_j^* = 0, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial E} = \sum_j |c_j|^2 - 1 = 0.$$

В силу равенств $W_{j'j} = (W_{jj'})^*$ вторая система уравнений следует из первой. Условие разрешимости первой системы определяется секулярным уравнением

$$\det(W_{jj'} - \delta_{jj'} E) = 0,$$

корни которого равны поправкам к уровням энергии.

Поскольку спин электрона равен $\frac{1}{2}$, то при заданном значении l число j принимает два значения, $j = l \pm \frac{1}{2}$, и вектор нулевого приближения сводится к выражению

$$\Psi = \Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m)c_+ + \Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m)c_-,$$

а секулярное уравнение – к квадратному уравнению для E . Матрица оператора \mathcal{H}_f диагональна в базисе $\Psi(n, l, j, m)$.

Чтобы выяснить как действует на эти векторы оператор $\mu_B H(l_3 + 2s_3)$, воспользуемся разложением $\Psi(n, l, j, m)$ по векторам базиса, состоящего из произведений $Y_{lm}(\hat{r})\chi_s(\sigma)$ – собственных векторов l_3 и s_3 . Поскольку

$$\Psi(l, l + \frac{1}{2}, m) = Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} + Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}},$$

$$\Psi(l, l - \frac{1}{2}, m) = Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} - Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}},$$

то

$$\Psi = \Psi(l, l + \frac{1}{2}, m)c_+ + \Psi(l, l - \frac{1}{2}, m)c_- =$$

$$Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} \left(c_+ \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} + c_- \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} \right) + Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}} \left(c_+ \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} - c_- \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} \right).$$

Таким образом

$$(l_3 + 2s_3)\Psi = Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} \left(m + \frac{1}{2} \right) \left(c_+ \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} + c_- \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} \right) +$$

$$Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}} \left(m - \frac{1}{2} \right) \left(c_+ \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} - c_- \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} \right).$$

Воспользовавшись формулами перехода от векторов $Y_{lm}\chi_s$ к $\Psi(ljm)$:

$$Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} = \Psi(l, l + \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} + \Psi(l, l - \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}},$$

$$Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}} = \Psi(l, l + \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} - \Psi(l, l - \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}},$$

найдем, что

$$\begin{aligned} \mu_B H(l_3 + 2s_3)\Psi &= \Psi(l, l + \frac{1}{2}, m) \frac{\mu_B H}{2\lambda} (c_+ 2m(l+1) + c_- \sqrt{\lambda^2 - m^2}) + \\ &\Psi(l, l - \frac{1}{2}, m) \frac{\mu_B H}{2\lambda} (c_+ \sqrt{\lambda^2 - m^2} + c_- 2ml). \end{aligned}$$

Уравнение

$$\mu_B H(l_3 + 2s_3)\Psi = \Psi E$$

сводится к системе

$$\begin{aligned} (\Delta E_+ - E + \frac{\mu_B}{\lambda} m(l+1))c_+ + \frac{\mu_B H}{2\lambda} \sqrt{\lambda^2 - m^2} c_- &= 0, \\ \frac{\mu_B H}{2\lambda} \sqrt{\lambda^2 - m^2} c_+ + (\Delta E_- - E + \frac{\mu_B}{\lambda} ml)c_- &= 0. \end{aligned}$$

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ БАЗИСА В ДВУХУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЕ

Полезно вывести общие формулы, решающие полученные нами уравнения. Система

$$\begin{aligned} a_{11}c_1 + a_{12}c_2 &= ac_1, \\ a_{21}c_1 + a_{22}c_2 &= ac_2. \end{aligned}$$

имеет нетривиальные решения только в случае обращения в нуль ее определителя

$$(a_{11} - a)(a_{22} - a) - a_{12}a_{21} = (a - \frac{a_{11} + a_{22}}{2})^2 + \frac{1}{4}(a_{11} - a_{22})^2 - a_{12}a_{21},$$

т.е. при a равных

$$a_{1,2} = \frac{1}{2}(a_{11} - a_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}a_{21}}.$$

В случае эрмитовой матрицы \hat{a} значения $a_{1,2}$ действительны. Если условие разрешимости выполнено, то решения можно найти из уравнений

$$\begin{aligned} (a_{11} - a_1)c^{(1)}_1 + a_{12}c^{(1)}_2 &= 0, \\ a_{21}c^{(1)}_1 + (a_{22} - a_2)c^{(1)}_2 &= 0. \end{aligned}$$

В случае эрмитовой матрицы \hat{a} удобно определить параметры α, β :

$$\frac{2a_{12}}{a_{11} - a_{22}} = e^{-i\beta} \operatorname{tg} \alpha, \quad \frac{2a_{21}}{a_{11} - a_{22}} = e^{i\beta} \operatorname{tg} \alpha.$$

Коэффициенты $c^{(i)}_k$,

$$\begin{aligned} c^{(1)}_1 &= e^{-i\frac{\beta}{2}} \cos \frac{\alpha}{2}, & c^{(1)}_2 &= e^{i\frac{\beta}{2}} \sin \frac{\alpha}{2}. \\ c^{(2)}_1 &= -e^{-i\frac{\beta}{2}} \sin \frac{\alpha}{2}, & c^{(2)}_2 &= e^{i\frac{\beta}{2}} \cos \frac{\alpha}{2}. \end{aligned}$$

обладают свойством ортогональности

$$\sum_{j=1}^2 c^{(i)}_j {}^* c^{(k)}_j = \delta_{ik}.$$

ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА НА ТОНКОЙ СТРУКТУРЕ

Рассмотренные в предыдущем разделе решения в нашем частном случае определяются значением параметров α, β , которые можно найти после следующих выкладок:

$$\begin{aligned} a_{11} - a_{22} &= \Delta E + \frac{\mu_B H m}{\lambda}, & \Delta E &= \Delta E_+ - \Delta E_-, \\ a_{12} &= a_{21} = \mu_B H \sqrt{\lambda^2 - m^2}. \end{aligned}$$

Очевидно, что $\beta = 0$, а значение α определяется формулой

$$tg \alpha = \xi \frac{\sqrt{\lambda^2 - m^2}}{\lambda + \xi m}, \quad \xi = \frac{\mu_B H}{\Delta E}.$$

Значения параметра ξ в дальнейшем будут выделять случаи **слабого**, ($\xi \ll 1$), и **сильного**, ($\xi \gg 1$) поля. Следует только помнить, что оба эти случая определяют слабое магнитное поле, напряженность которого мала по сравнению с напряженностью кулонова поля в атоме.

Правильные векторы нулевого приближения таковы:

$$\begin{aligned} \Psi_1(n, l, \alpha, m) &= \Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m) c^{(1)}_+ + \Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m) c^{(1)}_- = \\ &= \Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m) \cos \frac{\alpha}{2} + \Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m) \sin \frac{\alpha}{2}, \\ \Psi_2(n, l, \alpha, m) &= \Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m) c^{(2)}_+ + \Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m) c^{(2)}_- = \\ &= -\Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m) \sin \frac{\alpha}{2} + \Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m) \cos \frac{\alpha}{2}. \end{aligned}$$

Уровни энергии, равные

$$E_{1,2} = \langle E \rangle + \mu_B H m \pm \frac{\Delta E}{2} \sqrt{1 + 2 \frac{\mu_B H}{\Delta E} \frac{m}{\lambda} + \frac{\mu_B H^2}{\Delta E}},$$

вообще говоря, нелинейно зависят от напряженности поля. Линейность обнаруживается в двух случаях. Если

$$\xi = \frac{\mu_B H}{\Delta E} \ll 1,$$

(слабые поля), то

$$E_{1,2} = \langle E \rangle \pm \frac{1}{2} \Delta E \pm \mu_B H m \frac{2\lambda \pm 1}{2\lambda} + O\left(\frac{\mu_B H}{\Delta E}\right).$$

В противоположном случае, когда

$$\frac{1}{\xi} = \frac{\Delta E}{\mu_B H} \ll 1,$$

(сильные поля) уровни энергии определяются формулой

$$E_{1,2} = \langle E \rangle + \mu_B H \left(m \pm \frac{1}{2}\right) + O\left(\frac{\Delta E}{\mu_B H}\right).$$

Остановимся сначала на сильном поле. В этом случае можно считать, что

$$\operatorname{tg} \alpha = -\frac{\sqrt{\lambda^2 - m^2}}{m},$$

и поэтому

$$\cos \frac{\alpha}{2} = \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}}, \quad \sin \frac{\alpha}{2} = -\sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}}.$$

Правильные векторы нулевого приближения в этом случае равны

$$\Psi_1(n, l, \alpha, m) = \Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} - \Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}},$$

$$\Psi_2(n, l, \alpha, m) = \Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} + \Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m) \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}}.$$

Подставляя выражения

$$\Psi(n, l, l + \frac{1}{2}, m) = Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}} + Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}},$$

$$\Psi(n, l, l - \frac{1}{2}, m) = -Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda - m}{2\lambda}} + Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\lambda + m}{2\lambda}},$$

найдем, что при полученном значении параметра α

$$\Psi_1(n, l, \alpha, m) = Y_{l, m - \frac{1}{2}} \chi_{\frac{1}{2}}, \quad \Psi_2(n, l, \alpha, m) = Y_{l, m + \frac{1}{2}} \chi_{-\frac{1}{2}}$$

Эти векторы являются собственными векторами проекции магнитного момента на магнитное поле. Оператор магнитного момента электрона можно определить равенством

$$\vec{\mu} = \mu_B (\vec{l} + 2\vec{s}),$$

поэтому

$$\vec{\mu} \vec{H} = \mu_B H (l_3 + 2s_3).$$

Поскольку при заданном значении проекции полного момента, m , проекции момента импульса и спина равны $m_l = m \pm \frac{1}{2}$ и $m_s = \mp \frac{1}{2}$, то значения уровней энергии можно представить в форме

$$E_{1,2} = \mu_B H (m_l + 2m_s) + O\left(\frac{\Delta E}{\mu_B H}\right)$$

Таким образом, линейная зависимость уровней энергии от напряженности магнитного поля в сильных полях объясняется тем, что векторы нулевого приближения соответствуют состояниям с определенным магнитным моментом.

Но почему же в слабых полях, $\mu_B H \ll 1$, также наблюдается линейная зависимость от поля? Ведь стационарные состояния тонкой структуры не обладают определенным магнитным моментом. Причина заключается в чисто кинематических свойствах векторов: **среднее значение любого вектора в состоянии с определенным полным моментом количества движения – это вектор, направленный вдоль полного момента:**

$$[J_\alpha, A_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} A_\gamma \Rightarrow \langle r, j, m | A_\alpha | r, j, m \rangle = \langle j, m | J_\alpha | j, m \rangle A(r, j),$$

где

$$A(r, j) = \frac{\langle r, j, m | \vec{J} \vec{A} | r, j, m \rangle}{j(j+1)}.$$

Если энергия магнитного расщепления много меньше расщепления тонкой структуры, то правильными функциями нулевого приближения будут векторы с определенными значениями чисел n, l, j, m . Среднее значение энергии взаимодействия с магнитным полем в этом случае равно

$$\mu_B H \langle r, j, m | l_3 + 2s_3 | r, j, m \rangle = \frac{\mu_B H m}{j(j+1)} (\langle j, m | \vec{l} \vec{J} + 2\vec{s} \vec{J} | j, m \rangle).$$

Представляя скалярные произведения в форме

$$\vec{l} \vec{J} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 + \vec{l}^2 - \vec{s}^2), \quad \vec{s} \vec{J} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{l}^2 + \vec{s}^2),$$

найдем, что

$$\mu_B H \langle r, j, m | l_3 + 2s_3 | r, j, m \rangle = \frac{\mu_B H m}{2j(j+1)} (3j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}) = \mu_B H m \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}}.$$