Лекция 4
Движение электрона во внешнем электромагнитном поле

Теперь рассмотрим вопрос о движении электрона в электромагнитном поле. Заметим, что последовательная квантовомеханическая теория такого движения получается только на основе релятивистского рассмотрения. Сейчас мы обсудим приближенную модель, которая следует из релятивистской теории в нижайших порядках разложения по $\frac{v}{c}$. С этой целью мы сначала выведем гамильтониан для классической частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле, а затем обобщим его на квантовый случай и добавим взаимодействие спина с магнитным полем.

1 Нерелятивистский классический гамильтониан для частицы во внешнем электромагнитном поле

Сначала напомним как в теории поля вводился гамильтониан взаимодействия заряженной частицы со внешним электромагнитным полем[1]. Считается, что действие состоит из суммы действия S_1 свободной частицы и действия S_2 для электромагнитного поля. В специальной теории относительности действие S_1 есть

$$S_1 = -Mc\int_a^b ds, \tag{1}$$

где интеграл берется вдоль мировой линии, а ds интервал

$$ds = cdt\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}, \tag{2}$$

(v — скорость частицы). В свою очередь действие S_2 можно записать через 4-вектор A_μ электромагнитного поля заданного в точках мировой линии

$$S_2 = -\frac{Q}{c}\int_a^b A_\mu dx^\mu, \tag{3}$$

где Q — заряд частицы.

Перепишем следующим образом полное действие

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_2}^{t_1}\left(-Mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} - Q\varphi + \frac{Q}{c}\vec{A}\,\frac{d\vec{x}}{dt}\right)dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2}\left(-Mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} - Q\varphi + \frac{Q}{c}\vec{A}\vec{v}\right)dt, \end{aligned} \tag{4}$$

где $A_\mu = (\varphi, \vec{A})$. Отсюда находим функцию Лагранжа

$$L = -Mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} - Q\varphi + \frac{Q}{c}\vec{A}\vec{v}. \tag{5}$$

[1] Л.Д. Ландау и И.М. Лифшиц, Теоретическая физика, т.II. Теория поля. М.:Наука, 1967.

Рассматривая нерелятивистскую задачу разложим корень в (5) в ряд по степеням $\frac{v}{c}$ и отбросим несущественный постоянный член $-Mc^2$:

$$L \approx \frac{Mv^2}{2} - Q\varphi + \frac{Q}{c}\vec{A}\vec{v}. \tag{6}$$

Тогда обобщенный импульс определится как

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = M\vec{v} + \frac{Q}{c}\vec{A} \tag{7}$$

и гамильтониан, согласно общим правилам, запишется

$$H = \vec{p}\,\vec{v} - L = \frac{Mv^2}{2} + Q\varphi = \frac{1}{2M}\left(\vec{p} - \frac{Q}{c}\vec{A}\right)^2 + Q\varphi. \tag{8}$$

Если частица находится во внешнем потенциале $V(\vec{x})$, то к этому гамильтониану нужно добавить этот потенциал.

2 Уравнение Паули

Перейдем к рассмотрению квантового гамильтониана для нерелятивистского электрона во внешнем магнитном поле. Тогда $\varphi = 0$, $Q = q$ — заряд электрона, а импульс $\vec{p}$ следует рассматривать как дифференциальный оператор $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \vec{x}}$. Кроме того необходимо добавить энергию взаимодействия спинового магнитного момента с магнитным полем. Как мы уже знаем из курса атомной физики опыт показывает, что это взаимодействие есть

$$\delta H = -\frac{q}{Mc}\hat{\vec{s}}\vec{B}, \tag{9}$$

где $\hat{\vec{s}}$ — оператор спина электрона, а $\vec{B}$ — магнитное поле.

В результате получаем следующий гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 + U(\vec{r}) - \frac{q}{Mc}\hat{\vec{s}}\vec{B}. \tag{10}$$

Оператор спина электрона записывается через матрицы Паули (см. Лекцию 2). Поэтому гамильтониан (10) представляет собой матрицу 2×2, элементы которой являются дифференциальными операторами: первые два слагаемые в этом выражении следует рассматривать как единичную 2×2 матрицу умноженную на соответствующие выражения, а третее слагаемое — в общем случае как недиагональную матрицу. В свою очередь волновую функцию следует рассматривать как спинор

$$\Psi(\vec{x},t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{x},t) \\ \Psi_2(\vec{x},t) \end{pmatrix} \tag{11}$$

элементы которого являются функциями координаты и времени.

Волновая функция $\Psi(\vec{x},t)$ находятся как решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (10)

$$i\hbar\frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 + U(\vec{r}) + \mu_{\text{Б}}\hat{\vec{\sigma}}\vec{B}\right]\Psi(\vec{x},t), \tag{12}$$

где $\mu_Б = \frac{q_0 \hbar}{2Mc}$ — магнетон Бора ($q_0 = -q$ — элементарный заряд). Это уравнение называется *уравнением Паули.*

Условие нормировки для этой волновой функции, согласно правилам предыдущей лекции, есть

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3 x \Psi^{\dagger}(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) = \int d^3 x \left[|\Psi_1(\vec{x}, t)|^2 + |\Psi_2(\vec{x}, t)|^2 \right] = 1. \tag{13}$$

Подставляя в уравнение Паули спинор (11) и используя явный вид матриц Паули получаем систему из двух связанных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi_1(\vec{x},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) + \mu_Б B_3 \right] \Psi_1(\vec{x}, t) + \mu_Б \left(B_1 - i B_2 \right) \Psi_2(\vec{x}, t), \\ \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_2(\vec{x},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) - \mu_Б B_3 \right] \Psi_2(\vec{x}, t) + \mu_Б \left(B_1 + i B_2 \right) \Psi_1(\vec{x}, t) \end{cases} \tag{14}$$

В том случае, когда поле $\vec{B}$ направлено вдоль z–оси

$$\vec{B} = (0, 0, B) \tag{15}$$

эта система распадается на два независимых уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) + \mu_Б B \right] \Psi_1(\vec{x}, t) \tag{16}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) - \mu_Б B \right] \Psi_2(\vec{x}, t) \tag{17}$$

и имеет два независимых решения

$$\Psi_+(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{x}, t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_-(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_2(\vec{x}, t) \end{pmatrix} \tag{18}$$

Используя явный вид матриц Паули легко убедиться, что эти волновые функции являются собственными функциями опрератора проекции спина электрона на z–ось с собственными значениями $+\frac{\hbar}{2}$ и $-\frac{\hbar}{2}$. Таким образом каждое из этих уравнений описывает электрон с соответствующей проекцией спина на ось z.

Найдем скорость квантовой частицы в магнитном поле. Ввиду того, что мы работаем в представлении Шредингера, оператор скорости частицы можно получить на основнии формулы (3.48)

$$\begin{aligned} \vec{v} &= \dot{\vec{x}} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{\vec{x}} \right] = \frac{i}{2\hbar M} \left[\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2, \vec{x} \right] = \\ &= \frac{i}{2\hbar M} \left\{ \left[\hat{\vec{p}}^{\,2}, \vec{x} \right] - \frac{q}{c} \left[\left(\hat{\vec{p}} \vec{A} \right), \vec{x} \right] - \frac{q}{c} \left[\left(\vec{A} \hat{\vec{p}} \right), \vec{x} \right] \right\} = \frac{1}{M} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c} \vec{A} \right). \end{aligned} \tag{19}$$

Вычислим теперь коммутотор скоростей

$$[v_i, v_j] = \frac{q}{M^2 c} \left([\hat{p}_j, A_i] - [\hat{p}_i, A_j] \right). \tag{20}$$

В частности, для однородности поля вектор–потенциал можно выбрать в виде

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{x} \tag{21}$$

и (20) сведется к

$$[v_i, v_j] = i\frac{q\hbar}{M^2c}\varepsilon_{ijk}B_k. \tag{22}$$

Таким образом, операторы скорости в плоскости перпендикулярной к направлению поля оказываются некоммутативными. Это значит, что частица не может иметь определенных значений скорости по этим направлениям.

2.1 Калибровочная инвариантность

Мы знаем, что уравнения электродинамики не меняются, если к вектор–потенциалу $\vec{A}$ добавить градиент произвольной функции. Это свойство называют свойством *градиентной* или *калибровочной* инвариантности. Посмотрим как эта инвариантность реализуется в квантовом случае.

Прежде всего отметим, что вероятность обнаружить частицу не меняется, если сделать замену

$$\psi \to \psi' = \exp\left\{i\frac{q}{\hbar c}f(\vec{x})\right\}\psi, \tag{23}$$

т.к. при этом

$$\rho = |\psi|^2 \to \rho' = |\psi'|^2 = \rho. \tag{24}$$

Преобразование (23) называют *локальным калибровочным преобразованием.*

Выясним, что происходит с уравнением Паули при локальном калибровочном преобразовании. С этой целью рассмотрим изменение действия оператора $\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2$ на волновую функцию при локальном калибровочном преобразовании

$$\begin{aligned}
\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2\psi \quad &\to \quad \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2\exp\left\{i\frac{q}{\hbar c}f(\vec{x})\right\}\psi = \\
&= \quad \left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\exp\left\{i\frac{q}{\hbar c}f(\vec{x})\right\}\left[\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\left(\vec{A} - \nabla f\right)\right]\psi = \\
&= \quad \exp\left\{i\frac{q}{\hbar c}f(\vec{x})\right\}\left[\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\left(\vec{A} - \nabla f\right)\right]^2\psi.
\end{aligned} \tag{25}$$

Таким образом уравнение Паули оказывается инвариантным, если одновременно сделать следующие преобразования для волновой функции и вектор–потенциала

$$\psi \to \psi' = \exp\left\{i\frac{q}{\hbar c}f(\vec{x})\right\}\psi, \quad \vec{A} \to \vec{A} + \nabla f(\vec{x}). \tag{26}$$

Такая инвариантность уравнения называется *калибровочной.* Считается, что калибровочная инвариантность является одним из фундаментальных свойств природы. В частности ее естественное обобщение лежит в основе единой теории слабых и электромагнитных взаимодействий, а также фундаментальной теории сильных взаимодействий — квантовой хромодинамики описывающей взаимодействия цветных кварков и глюонов.

3 Квантовая частица во внешнем постоянном магнитном поле

Найдем коммутатор

$$\left[\hat{\vec{p}}, \vec{A}\right] = \frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial\vec{x}}, \vec{A}\right] = \frac{\hbar}{i}\mathrm{div}\vec{A}. \tag{27}$$

Значит, оператор импульса $\hat{\vec{p}}$ и вектор–потенциал $\vec{A}$ коммутативны только, если $\mathrm{div}\vec{A} = 0$. В частности это имеет место для вектор–потенциала (21):

$$\left[\hat{\vec{p}}, \vec{A}\right] = 0. \tag{28}$$

Следовательно

$$\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 = \hat{\vec{p}}^2 - \frac{q}{c}\vec{B}\left(\vec{r}\times\hat{\vec{p}}\right) + \left(\frac{q}{2c}\right)^2\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)^2 = \hat{\vec{p}}^2 - \frac{q}{c}\vec{B}\hat{\vec{L}} + \left(\frac{q}{2c}\right)^2\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)^2. \tag{29}$$

Подставляя это выражение в уравнение Паули получим

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2M}\left[\hat{\vec{p}}^2 - \frac{q}{c}\vec{B}\left(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{s}}\right) + \left(\frac{q}{2c}\right)^2\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)^2\right]\psi. \tag{30}$$

Таким образом гамильтониан для частицы во внешнем постоянном магнитном поле содержит, помимо знакомого нам из курса атомной физики члена линейного по полю, член, квадратично зависимый от поля. Далее (Лекция 6) изучим эффекты, к которым он приводит.

4 Плотность тока для частицы, движущейся в магнитном поле

Из классической механики известно, что функция Лагранжа для частицы с зарядом Q, которая движется в магнитном поле, задаваемом вектор-потенциалом $\vec{A}$, есть

$$L = \frac{Q}{c}\vec{v}\vec{A}, \tag{31}$$

где $\vec{v}$ — скорость частицы. Если заряд распределен по пространству, то (31) может быть переписано в виде

$$L = \frac{1}{c}\int d^3x\vec{j}\vec{A}, \tag{32}$$

где $\vec{j}$ — плотность тока. В статическом случае $L = -H$, где H —- гамильтониан. Тогда ток и вариация гамильтониана по полю $\vec{A}$ связаны согласно

$$\delta H = -\frac{1}{c}\int\vec{j}\delta\vec{A}d^3x. \tag{33}$$

Для того, чтобы вычислить плотность тока в квантовом случае, мы должны вычислить выриацию матричного элемента гамильтониана, который входит в уравнение Паули, между двум квантовыми состояниями $|m\rangle$ и $|n\rangle$

$$\langle m|\hat{H}|n\rangle = \int d^3x\psi_m^*(\vec{x})\left[\frac{1}{2M}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 + \mu_{\text{Б}}\vec{B}\vec{\sigma}\right]\psi_n(\vec{x}). \tag{34}$$

Вариация этого матричного элемента дает

$$\delta\langle m|\hat{H}|n\rangle = \int d^3x\psi_m^*(\vec{x})\left[\frac{q}{2M}\left(\hat{\vec{p}}\,\delta\vec{A} + \delta\vec{A}\,\hat{\vec{p}}\right) + \frac{q^2}{Mc^2}\vec{A}\,\delta\vec{A}\ - \mu\delta\vec{B}\sigma\right]\psi_n(\vec{x}), \tag{35}$$

причем следует считать, что

$$\delta\vec{B} = \mathrm{rot}\left(\delta\vec{A}\right). \tag{36}$$

Преобразуем отдельные члены выражения (35):

$$\begin{aligned}
\int d^3x\psi_m^*(\vec{x})\psi_n(\vec{x}) &= -i\hbar\int d^3x\psi_m^*(\vec{x})\delta\vec{A}\,\nabla\psi_n(\vec{x}) = \\
&= -i\hbar\int d^3x\nabla\left(\psi_m^*(\vec{x})\delta\vec{A}\psi_n(\vec{x})\right) + i\hbar\int d^3x\delta\vec{A}\left(\nabla\psi_m^*(\vec{x})\right)\psi_n(\vec{x}) = \\
&= i\hbar\int d^3x\delta\vec{A}\left(\nabla\psi_m^*(\vec{x})\right)\psi_n(\vec{x}), \qquad (37)\\
\int d^3x\psi_m^*(\vec{x})\delta\vec{B}\vec{\sigma}\psi_n(\vec{x}) &= \int d^3x\,\psi_m^*(\vec{x})\mathrm{rot}\left(\delta\vec{A}\right)\vec{\sigma}\psi_n(\vec{x}). \qquad (38)
\end{aligned}$$

Используем известную формулу $\vec{a}\,\mathrm{rot}b = -\mathrm{div}(\vec{a}\times\vec{b}) + \vec{b}\,\mathrm{rot}\vec{a}$ и приведем (38) к виду

$$\begin{aligned}
&\int d^3x\psi_m^*(\vec{x})\delta\vec{B}\vec{\sigma}\psi_n(\vec{x}) = \\
= &-\int d^3x\,\mathrm{div}\left[\psi_m^*(\vec{x})\left(\vec{\sigma}\times\vec{A}\right)\psi_n(\vec{x})\right] + \int d^3x\,\delta\vec{A}\,\mathrm{rot}\left(\psi_m^*(\vec{x})\vec{\sigma}\psi_n(\vec{x})\right) = \\
= &\int d^3x\,\delta\vec{A}\,\mathrm{rot}\left(\psi_m^*(\vec{x})\vec{\sigma}\psi_n(\vec{x})\right). \qquad (39)
\end{aligned}$$

Тогда (35) сведется к

$$\begin{aligned}
\delta\langle m|\hat{H}|n\rangle &= \int d^3x\,\delta\vec{A}\left\{\frac{iq\hbar}{2Mc}\left[\left(\nabla\psi_m^*(\vec{x})\right)\psi_n(\vec{x}) - \psi_m^*(\vec{x})\left(\nabla\psi_n(\vec{x})\right)\right] + \right.\\
&- \left.\frac{q^2}{Mc^2}\vec{A}\psi_m^*(\vec{x})\psi_n(\vec{x}) - \mu\,\mathrm{rot}(\psi_m^*(\vec{x})\vec{\sigma}\psi_n(\vec{x}))\right\}. \qquad (40)
\end{aligned}$$

Воспользовавшись (33), получим, что ток перехода равняется выражению в фигурной скобке правой части уравнения (40)

$$\begin{aligned}
\vec{j}_{mn} &= \frac{iq\hbar}{2Mc}\left[\left(\nabla\psi_m^*(\vec{x})\right)\psi_n(\vec{x}) - \psi_m^*(\vec{x})\left(\nabla\psi_n(\vec{x})\right)\right] + \\
&+ \frac{q^2}{Mc^2}\vec{A}\psi_m^*(\vec{x})\psi_n(\vec{x}) - \mu\,\mathrm{rot}(\psi_m^*(\vec{x})\vec{\sigma}\psi_n(\vec{x})). \qquad (41)
\end{aligned}$$