

Rozdział 16

Oddziaływanie z polem elektromagnetycznym

16.1 Przypomnienie fizyki klasycznej

16.1.1 Równania Lagrange’a

Równania Lagrange’a drugiego rodzaju są postaci

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_i} = Q_i, \quad (16.1)$$

gdzie T jest energią kinetyczną rozważanego układu fizycznego, (q_i, \dot{q}_i) są uogólnionymi współrzędnymi i prędkościami, zaś Q_i – siły uogólnione. Jeżeli siły są zachowawcze, to wówczas można je wyrazić za pomocą energii potencjalnej, która zależy jedynie od współrzędnych uogólnionych $\{q_i\}$. Wówczas $Q_i = -\partial V / \partial q_i$. Wstawiając siły tego typu do równań Lagrange’a (16.1), otrzymujemy równania ruchu

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} (T - V) \right) - \frac{\partial}{\partial q_i} (T - V) = 0, \quad (16.2)$$

Możemy wtedy wprowadzić Lagrangian zdefiniowany jako różnica $\mathcal{L} = T - V$. Jednakże, w ogólnym przypadku, tylko niektóre siły można przedstawić za pomocą energii potencjalnej $V(q_i)$, podczas gdy inne będą wymagać uogólnionych wyrażeń typu (16.1).

Czasami mamy do czynienia z pewnego rodzaju przypadkiem pośrednim, który zachodzi wtedy gdy, siły uogólnione można wyrazić za pomocą tzw. potencjału uogólnionego U , który może być funkcją nie tylko współrzędnych $\{q_i\}$, ale także prędkości $\{\dot{q}_i\}$

$$Q_j = - \frac{\partial U}{\partial q_i} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i} \right). \quad (16.3)$$

Jeśli takie wyrażenie dla sił wstawimy do równań (16.1), to przyjmą one następujący kształt

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} (T - U) \right) - \frac{\partial}{\partial q_i} (T - U) = 0. \quad (16.4)$$

W takim przypadku Lagrangian to $\mathcal{L} = T - U$. Jest to uogólnienie poprzedniej sytuacji, bowiem U zawiera nie tylko przyczynę typu potencjalnego, ale także zależy od prędkości cząstek tworzących układ fizyczny (drugi człon w (16.3)). Pokażemy teraz, że układ cząstek naładowanych oddziałujących z zewnętrznym polem elektromagnetycznym można opisać właśnie za pomocą potencjału uogólnionego U . Dzięki temu będziemy potem mogli skonstruować formalizm kanoniczny (hamiltonowski) przydatny do zastosowania w mechanice kwantowej.

16.1.2 Potencjał uogólniony U_e dla cząstki w polu

Ponieważ będziemy stosować nasze rezultaty w nierelatywistycznej mechanice kwantowej, więc i na gruncie fizyki klasycznej pozostaniemy w granicach nierelatywistycznych. Aby utrzymać maksymalną prostotę rozważań, będziemy mówić o pojedynczej cząstce o masie m i ładunku q poruszającej się w polu elektromagnetycznym opisanym wektorami elektrycznym $\vec{E}(\vec{r}, t)$ i magnetycznym $\vec{B}(\vec{r}, t)$. W naszym zapisie pominiemy argumenty pól (są one, jak się wydaje, zawsze oczywiste), bowiem cząstka "czuje" pola w punkcie, w którym się w danej chwili znajduje. Rozważane pola są czysto klasyczne (są to zadane z zewnątrz, wektorowe funkcje położenia i czasu). Energię pola możemy uważać za ustaloną, a więc zawsze możemy ją pominąć, bo jako stała nie wnosi wkładu do równań ruchu.

Pola i potencjały

Wielkościami fizycznymi charakteryzującymi pole elektromagnetyczne są natężenie $\vec{E}(\vec{r}, t)$ pola elektrycznego i wektor indukcji $\vec{B}(\vec{r}, t)$ pola magnetycznego. Z elektrodynamiki klasycznej wiemy, że wygodnie jest wyrazić pola za pomocą potencjałów wektorowego $\vec{A}(\vec{r}, t)$ i skalarnego $\phi(\vec{r}, t)$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \text{rot } \vec{A}(\vec{r}, t), \quad \vec{E}(\vec{r}, t) = -\nabla\phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (16.5)$$

Potencjały są określone z dokładnością do tzw. transformacji cechowania

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \nabla\chi(\vec{r}, t) \quad (16.6a)$$

$$\phi(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \phi'(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\vec{r}, t) \quad (16.6b)$$

gdzie $\chi(\vec{r}, t)$ jest dowolną funkcją położenia i czasu. Można pokazać, że równania elektrodynamiki (równania Maxwella) są niezmiennicze ze względu na wybór cechowania. Dlatego też pola $\vec{E}(\vec{r}, t)$ i $\vec{B}(\vec{r}, t)$ są takie same przy dowolnym cechowaniu. Wybór konkretnego cechowania wynika z wygody rachunkowej i nie ma wpływu na przewidywania fizyczne.

Lagrangian cząstki w polu

Za pomocą potencjałów zapiszemy siłę Lorentza, z którą pola oddziałują na cząstkę naładowaną

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) = q \left(-\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{v} \times \text{rot } \vec{A} \right). \quad (16.7)$$

Posługując się elementarną analizą wektorową, ostatni człon zapiszemy w postaci

$$\begin{aligned} \vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}) &= \vec{e}_i \epsilon_{ijk} v_j \epsilon_{klm} \nabla_l A_m = \vec{e}_i v_j (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \nabla_l A_m \\ &= \vec{e}_i v_j (\nabla_i A_j - \nabla_j A_i) = \vec{e}_i v_j \nabla_i A_j - (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{A} \end{aligned} \quad (16.8)$$

Co więcej, prędkość \vec{v} jest w formalizmie Lagrange'a niezależna od położenia cząstki, wobec tego

$$\vec{e}_i v_j \nabla_i A_j = \vec{e}_i \nabla_i (v_j A_j) = \nabla(\vec{v} \cdot \vec{A}). \quad (16.9)$$

Zauważmy dalej, że pełna pochodna czasowa potencjału wektorowego może być zapisana jako

$$\frac{d\vec{A}}{dt} = \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{A}. \quad (16.10)$$

Wykorzystując dwa ostatnie równania przekształcamy (16.8) i otrzymujemy

$$\vec{v} \times \text{rot } \vec{A} = \nabla(\vec{v} \cdot \vec{A}) - \frac{d\vec{A}}{dt} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (16.11)$$

To wyrażenie podstawiamy do siły Lorentza (16.7), która teraz wynosi

$$\vec{F} = q \left(-\nabla\phi + \nabla(\vec{v} \cdot \vec{A}) - \frac{d\vec{A}}{dt} \right). \quad (16.12)$$

Pola uważamy za zewnętrzne, a więc są one funkcjami jedynie położenia i czasu (a nie prędkości). Wobec tego

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial v_j} (\vec{A} \cdot \vec{v}) \right] = \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial v_j} (A_k v_k) = \frac{d}{dt} (A_k \delta_{jk}) = \frac{dA_j}{dt}, \quad (16.13)$$

co pozwala dalej przekształcić ostatni składnik w (16.12). Dzięki temu mamy

$$\vec{F} = q \left[-\nabla(\phi - \vec{v} \cdot \vec{A}) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{v}} (\vec{v} \cdot \vec{A}) \right) \right], \quad (16.14)$$

gdzie połączyliśmy dwa człony z gradientami. Oczywiście potencjał skalarny jest także niezależny od prędkości, więc możemy napisać

$$\vec{F} = q \left[-\nabla(\phi - \vec{v} \cdot \vec{A}) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{v}} (\phi - \vec{v} \cdot \vec{A}) \right) \right]. \quad (16.15)$$

Porównując to równanie ze wzorem (16.3) stwierdzamy, że siła Lorentza działająca na cząstkę naładowaną w polu elektromagnetycznym daje się zapisać za pomocą potencjału uogólnionego U_e

$$\vec{F} = -\nabla U_e + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial U_e}{\partial \vec{v}} \right) \quad \text{gdzie} \quad U_e = q\phi - q\vec{v} \cdot \vec{A}, \quad (16.16)$$

Możemy więc napisać odpowiedni Lagrangian. Ma on postać

$$\mathcal{L}_e = T - U_e = \frac{m\vec{v}^2}{2} - q\phi + q\vec{v} \cdot \vec{A}, \quad (16.17)$$

i równania ruchu dla cząstki w polu wynikają natychmiast z równań (16.4).

16.1.3 Formalizm kanoniczny (hamiltonowski)

Jak wspominaliśmy, pole uznajemy za zewnętrzne, o ustalonej energii. Wobec tego jego energia może być nieuwzględniona w hamiltonianie, bowiem jako stała nie ma znaczenia w równaniach ruchu. Koncentrujemy się więc na hamiltonianie cząstki naładowanej. Pęd kanoniczny obliczamy na podstawie znanego nam już Lagrangianu (16.17). Zgodnie z regułami, otrzymujemy

$$\vec{p} = \frac{\partial \mathcal{L}_e}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} + q\vec{A}. \quad (16.18)$$

Choć używamy oznaczenia \vec{p} , podkreślamy, że jest to pęd kanoniczny, podczas gdy pęd kinetyczny wyraża się standardowo $\vec{p}_{kin} = m\vec{v}$. Możemy teraz łatwo skonstruować hamiltonian cząstki w polu. Zgodnie z definicją mamy

$$H_e = \vec{p} \cdot \vec{v} - \mathcal{L}_e = \frac{m\vec{v}^2}{2} + q\phi \quad (16.19)$$

W formalizmie kanonicznym prędkość \vec{v} nie jest zmienną niezależną. Eliminujemy ją za pomocą pędu kanonicznego, i nasz hamiltonian przyjmuje postać

$$H_e = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi. \quad (16.20)$$

Hamiltonian ten nazwiemy *hamiltonianem minimalnego sprzężenia*. Opisuje on ruch cząstki o masie m i ładunku q w zewnętrznym polu elektromagnetycznym o potencjale wektorowym $\vec{A}(\vec{r}, t)$ i skalarnym $\phi(\vec{r}, t)$.

16.1.4 Krótka uwaga o cechowaniu

Nie będziemy tu niczego wyprowadzać, omówimy w wielkim skrócie pewne ważne fakty dotyczące transformacji cechowania w fizyce klasycznej. Przewidywania fizyczne nie mogą zależeć od wyboru cechowania potencjałów. Transformacji cechowania potencjałów musi więc towarzyszyć zmiana (transformacja) zmiennych kanonicznych

$$\vec{r} \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{r}' = \vec{r}, \quad \vec{p} \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{p}' = \vec{p} + q\nabla\chi(\vec{r}, t) \quad (16.21)$$

gdzie q jest oczywiście ładunkiem cząstki. Wielkości fizyczne (mieralne) $G(\vec{p}, \vec{r}, t)$ muszą mieć następującą własność

$$\begin{aligned} G(\vec{p}, \vec{r}, t) &\xrightarrow{\text{cechowanie}} G'(\vec{p}', \vec{r}', t) \text{ [podstawienia (16.21)]} \\ &= G'(\vec{p} + q\nabla\chi, \vec{r}, t) \\ &= (\text{ta sama postać co przed podstawieniem}) \end{aligned} \quad (16.22)$$

Dla przykładu rozważmy energię kinetyczną. Przed transformacją cechowania wyraża się ona standardowym wzorem

$$E_{kin} = \frac{1}{2\mu}(\vec{p} - q\vec{A})^2 \quad (16.23)$$

Dokonując transformacji cechowania otrzymujemy

$$E'_{kin} = \frac{1}{2\mu}(\vec{p}' - q\vec{A}')^2 \quad (16.24)$$

Następnie w powyższym wzorze podstawiamy relacje (16.21) i otrzymujemy

$$\begin{aligned} E'_{kin} &= \frac{1}{2\mu}(\vec{p} + q\nabla\chi - q\vec{A}')^2 = \frac{1}{2\mu}[\vec{p} - q(\vec{A}' - \nabla\chi)]^2 \\ &= \frac{1}{2\mu}(\vec{p} - q\vec{A})^2 = E_{kin} \end{aligned} \quad (16.25)$$

A więc otrzymujemy wyjściową energię kinetyczną. Oznacza to, że energia kinetyczna jest wielkością fizyczną niezmienniczą względem cechowania. Postać hamiltonianu (16.19), ze względu na obecność składnika $q\phi$ nie jest niezmiennicza. Nie trudno jednak pokazać, że dokonując transformacji potencjałów i transformacji (16.21) równania ruchu cząstki nie ulegną zmianie, a więc rzeczywiście przewidywania fizyczne są niezależne od wyboru konkretnego cechowania potencjałów. Nie będziemy tu dalej dyskutować kwestii cechowania i niezmienniczości równań ruchu przy cechowaniu potencjałów (odsyłamy do podręczników mechaniki klasycznej i/lub elektrodynamiki).

16.1.5 Hamiltonian cząstki klasycznej

Cząstka może poruszać się nie tylko pod wpływem oddziaływania zewnętrznego pola elektromagnetycznego. Może też posiadać energię potencjalną $V(\vec{r})$ wynikająca z oddziaływań innego typu (tzw. wewnętrzna energia potencjalna układu fizycznego). Wówczas hamiltonian minimalnego sprzężenia uwzględnia $V(\vec{r})$ i ma postać

$$H = \frac{1}{2\mu}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi + V(\vec{r}), \quad (16.26)$$

dla cząstki o masie μ i ładunku q poruszającej się w zewnętrznych polach (16.5) opisanych potencjałami $\vec{A}(\vec{r}, t)$ oraz $\phi(\vec{r}, t)$. Energia potencjalna $V(\vec{r})$ jest niezależna od pól zewnętrznych. Warto także przypomnieć, że pęd \vec{p} występujący w hamiltonianie jest pędem kanonicznym, a nie kinetycznym.

Na zakończenie naszej, z konieczności skrótowej dyskusji poczynimy jeszcze pewne dodatkowe uwagi, które warto mieć w pamięci.

- Rozważaliśmy tu tylko jedną cząstkę, ale jak się wydaje, nietrudno jest uogólnić nasze wyprowadzenie na przypadek układu wielu cząstek.
- Przedstawiona teoria jest nierelatywistyczna.
- Hamiltonian nie zawiera energii pola elektromagnetycznego.
- Cechowanie potencjałów jest tu nieokreślone. Przy wyborze jakiegoś innego cechowania, hamiltonian (16.20) może przyjąć nieco inną postać.

16.2 Przybliżenie półklasyczne w mechanice kwantowej

16.2.1 Hamiltonian

Pełne podejście kwantowo-mechaniczne wymaga kwantowania nie tylko układu cząstek naładowanych, ale również pola elektromagnetycznego. W takim jednak wypadku przechodzimy na grunt elektrodynamiki kwantowej, co zdecydowanie wykracza poza zakres niniejszych wykładów.

Posługiwać się będziemy przybliżeniem półklasycznym polegającym na tym, że pola zewnętrzne traktować będziemy jako zwykłe (klasyczne) funkcje położenia i czasu. Przybliżenie to jest oczywiście ograniczeniem, które nie pozwala opisać zjawisk związanych z kwantową naturą pól elektromagnetycznych. Jest to jednak przybliżenie dające niezły wgląd w przebieg wielu ważnych zjawisk fizycznych. Stosując zasadę odpowiedniości do klasycznego hamiltonianu (16.19) tworzymy kwantowo-mechaniczny hamiltonian dla cząstki o masie μ i ładunku q , poruszającej się w polu o potencjale (wewnętrznym) $V(\vec{r})$ i poddanej oddziaływaniu z zewnętrznym polem elektromagnetycznym opisanym potencjałami $\vec{A}(\vec{r}, t)$ oraz $\phi(\vec{r}, t)$. A zatem operator Hamiltona ma teraz postać

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2 + q\phi + \hat{V}(\vec{r}) \quad (16.27a)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} - \frac{q}{2\mu}(\hat{\vec{p}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{\vec{p}}) + \frac{q^2}{2\mu}\vec{A}^2 + q\phi + \hat{V}(\vec{r}), \quad (16.27b)$$

gdzie jawnie (za pomocą "daszków") oznaczyliśmy wielkości o charakterze operatorowym. W drugiej linii powyższej relacji zapisaliśmy hamiltonian zwracając uwagę na kolejność poszczególnych członów. Jest to konieczne, bowiem potencjał wektorowy jako funkcja położenia, może nie

komutować z operatorem pędu. Wprowadzimy teraz umowę terminologiczną, pisząc

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}(\mathbf{r}) && - \text{hamiltonian atomowy,} \\ H_1 &= -\frac{q}{2\mu}(\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{A}} + \vec{\mathbf{A}} \cdot \vec{\mathbf{p}}) && - \text{człon paramagnetyczny,} \\ H_2 &= \frac{q^2}{2\mu}\vec{\mathbf{A}}^2 && - \text{człon diamagnetyczny.} \end{aligned} \quad (16.28)$$

Całkowity hamiltonian (16.27) jest więc sumą

$$\hat{H} = H_0 + H_1 + H_2 + q\phi. \quad (16.29)$$

Sens i znaczenie fizyczne tych członów, a także rzędy wielkości energii związanych z nimi, omówimy dalej.

W zastosowanym przybliżeniu półklasycznym potencjały pól zewnętrznych są zwykłymi funkcjami położenia i czasu, więc na ogół nie komutują z operatorem pędu $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. Wyjaśnia to następujące twierdzenie.

Twierdzenie 16.1 *Składowe operatora pędu i potencjału wektorowego spełniają relację komutacyjną:*

$$[p_k, A_j] = -i\hbar \frac{\partial A_j}{\partial x_k}. \quad (16.30)$$

Dowód. W reprezentacji położeniowej dla dowolnej funkcji falowej $\psi(\mathbf{r})$ mamy

$$\begin{aligned} [p_k, A_j]\psi(\mathbf{r}) &= -i\hbar(\nabla_k A_j - A_j \nabla_k)\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \nabla_k(A_j \psi) + i\hbar A_j \nabla_k \psi \\ &= -i\hbar(\nabla_k A_j)\psi - i\hbar A_j(\nabla_k \psi) + i\hbar A_j(\nabla_k \psi) \\ &= -i\hbar(\nabla_k A_j)\psi. \end{aligned} \quad (16.31)$$

Wobec dowolności funkcji $\psi(\mathbf{r})$ wynika stąd teza (16.30). ■

W świetle powyższego twierdzenia rozważamy człon paramagnetyczny hamiltonianu

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{q}{2\mu}(p_k A_k + A_k p_k) = -\frac{q}{2\mu}(p_k A_k - A_k p_k + A_k p_k + A_k p_k) \\ &= -\frac{q}{2\mu}[p_k, A_k] - \frac{q}{\mu}A_k p_k = \frac{iq\hbar}{2\mu}\text{div}\vec{\mathbf{A}} - \frac{q}{\mu}\vec{\mathbf{A}} \cdot \vec{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (16.32)$$

Tym samym pełny hamiltonian wyraża się wzorem

$$H = H_0 + \frac{iq\hbar}{2\mu}\text{div}\vec{\mathbf{A}} - \frac{q}{\mu}\vec{\mathbf{A}} \cdot \vec{\mathbf{p}} + \frac{q^2}{2\mu}\vec{\mathbf{A}}^2 + q\phi. \quad (16.33)$$

Konkretna postać potencjałów wektorowego $\vec{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$ (a zatem i $\text{div}\vec{\mathbf{A}}$) oraz skalarne $\phi(\mathbf{r}, t)$, zależy od konkretnego problemu, a więc od wyboru cechowania.

Podkreślimy także, że hamiltonian (16.33) nie zawiera spinu elektronowego, a więc nie zawiera jakichkolwiek sprzężeń pomiędzy polem a spinem.

16.2.2 Niezmienniczość ze względu na cechowanie

Cechowanie potencjałów zarówno w przypadku klasycznym jak i kwantowym nie może wpływać na przewidywania fizyczne. Kwestią tą dość szczegółowo zajmiemy się w *Uzupełnieniach*. Tutaj zaś poprzestaniemy na krótkim stwierdzeniu podstawowych faktów.

Jeżeli w równaniu Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H \psi(\vec{r}, t), \quad \text{gdzie} \quad \hat{H} = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi + V(\vec{r}), \quad (16.34)$$

dokonyamy transformacji cechowania potencjałów

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \nabla \chi(\vec{r}, t) \quad (16.35a)$$

$$\phi(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \phi'(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\vec{r}, t) \quad (16.35b)$$

i jednocześnie przetransformujemy funkcję falową

$$\psi(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \psi'(\vec{r}, t) = \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \chi(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (16.36)$$

to równanie Schrödingera dla "nowej" funkcji falowej ψ' ma postać

$$i\hbar \frac{\partial \psi'(\vec{r}, t)}{\partial t} = H' \psi'(\vec{r}, t) \quad (16.37)$$

gdzie "nowy" hamiltonian H' ma postać taką jak w (16.34), ale z nowymi – już przecechowanymi potencjałami.

Tak więc, równanie Schrödingera jest niezmiennicze względem transformacji cechowania potencjałów, jeśli wybierając nowe cechowanie jednocześnie dokonamy transformacji funkcji falowej według wzoru (16.36). Zwróćmy uwagę, że przetransformowana funkcja falowa różni się od "starej" – nieprzetransformowanej jedynie o czynnik fazowy. Mogłoby się wydawać, że różnica ta nie ma znaczenia fizycznego, bo $|\exp(iq\chi/\hbar)| = 1$. Tak jednak nie jest. Czynnik fazowy w (16.36) nie jest czynnikiem globalnym, wykładnik jest funkcją położenia i czasu, a więc zmienia się od punktu do punktu i tym samym ma istotne znaczenie fizyczne.

16.2.3 Ciągłość prądu prawdopodobieństwa

Rozważmy równanie Schrödingera z czasem, w którym $\psi(\vec{r}, t)$ jest funkcją falową bezspinojowej cząstki naładowanej

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t), \quad (16.38)$$

z hamiltonianem (16.33), który zapiszemy tymczasowo w postaci

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + \frac{iq\hbar}{2\mu} \operatorname{div} \vec{A} - \frac{q}{\mu} \vec{A} \cdot \vec{p} + \Phi(\vec{r}, t), \quad (16.39)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$\Phi(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) + q\phi(\vec{r}, t) + \frac{q^2}{2\mu} \vec{A}^2(\vec{r}, t), \quad (16.40)$$

co stanowi rzeczywistą funkcję położenia \vec{r} , która także jest sparametryzowana czasem t .

Określamy teraz gęstość prawdopodobieństwa (robimy to tak samo jak i poprzednio, w przypadku bez pól elektromagnetycznych)

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2. \quad (16.41)$$

i szukamy dla niej równania ruchu. Oczywiście mamy

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) + \psi^*(\vec{r}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \right). \quad (16.42)$$

Z równania Schrödingera (16.38) i jego sprzężenia wynika

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} H^* \psi^*. \quad (16.43)$$

A więc po podstawieniu do równania (16.42) otrzymujemy (funkcje falowe i ich pochodne są przemienne – to nie są operatory)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \psi H^* \psi^* + \frac{1}{i\hbar} \psi^* H \psi. \quad (16.44)$$

Podstawiamy hamiltonian (16.39), przy czym $\vec{p} = -i\hbar \nabla$. Zatem z (16.44) dostajemy

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & -\frac{1}{i\hbar} \psi(\vec{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{iq\hbar}{2\mu} \operatorname{div} \vec{A} - \frac{iq\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot \nabla + \Phi(\vec{r}, t) \right] \psi^*(\vec{r}, t) \\ & + \frac{1}{i\hbar} \psi^*(\vec{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{iq\hbar}{2\mu} \operatorname{div} \vec{A} + \frac{iq\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot \nabla + \Phi(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (16.45)$$

Rozpisując poszczególne składniki powyższej sumy, łatwo widzimy, że człony zawierające $\Phi(\vec{r}, t)$ się znoszą. Otrzymujemy

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = & \frac{\hbar^2}{2\mu} (\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi) + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\operatorname{div} \vec{A}) (\psi \psi^*) + \frac{iq\hbar}{\mu} \psi \vec{A} \cdot (\nabla \psi^*) \\ & - \frac{\hbar^2}{2\mu} (\psi^* \nabla^2 \psi) + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\operatorname{div} \vec{A}) (\psi \psi^*) + \frac{iq\hbar}{\mu} \psi^* \vec{A} \cdot (\nabla \psi). \end{aligned} \quad (16.46)$$

Porządkując dalej

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \\ & + \frac{iq\hbar}{\mu} (\operatorname{div} \vec{A}) (\psi \psi^*) + \frac{iq\hbar}{\mu} (\psi^* \vec{A} \cdot \nabla \psi + \psi \vec{A} \cdot \nabla \psi^*). \end{aligned} \quad (16.47)$$

Oczywista jest relacja różniczkowa

$$\vec{A} \cdot \nabla (\psi^* \psi) = \psi^* \vec{A} \cdot \nabla \psi + \psi \vec{A} \cdot \nabla \psi^*. \quad (16.48)$$

Wobec tego otrzymujemy

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) + \frac{iq\hbar}{\mu} \left[\vec{A} \cdot \nabla (\psi^* \psi) + \psi^* \psi \operatorname{div} \vec{A} \right]. \quad (16.49)$$

Pierwszy człon w powyższym wzorze jest identyczny jak w przypadku bez pola. Korzystaliśmy wtedy z tożsamości analizy wektorowej (2.42), stosując ją więc ponownie we wzorze (16.49), otrzymujemy

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \operatorname{div} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \frac{iq\hbar}{\mu} \left[\vec{A} \cdot \nabla (\psi^* \psi) + \psi^* \psi \operatorname{div} \vec{A} \right]. \quad (16.50)$$

Pokażemy teraz co zrobić z drugim członem powyższego wyrażenia.

$$\begin{aligned} \operatorname{div} (\vec{A} \psi^* \psi) &= \nabla_k (A_k \psi^* \psi) = \psi^* \psi \nabla_k A_k + A_k \nabla_k (\psi^* \psi) \\ &= \psi^* \psi \operatorname{div} \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla (\psi^* \psi). \end{aligned} \quad (16.51)$$

Wobec tego z (16.50) otrzymujemy

$$i \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\hbar}{2\mu} \operatorname{div}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \frac{iq}{\mu} \operatorname{div}(\vec{A} \psi^* \psi). \quad (16.52)$$

A zatem możemy napisać równanie

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\frac{i\hbar}{2\mu}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + \frac{q}{\mu} \vec{A} \psi^* \psi\right). \quad (16.53)$$

Wprowadzając więc wektor

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2\mu i}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{q}{\mu} \vec{A} \psi^* \psi \quad (16.54)$$

mamy równanie ciągłości dla gęstości prawdopodobieństwa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \operatorname{div} \vec{j} \quad (16.55)$$

dla gęstości prawdopodobieństwa $\rho = |\psi|^2$ i dla gęstości prądu prawdopodobieństwa określonej w (16.54).

Dokonując transformacji cechowania potencjałów (16.35) i jednocześnie biorąc nową funkcję falową w/g (16.36) stwierdzamy, że gęstość prawdopodobieństwa

$$\rho \xrightarrow{\text{cechowanie}} \rho' = \rho, \quad (16.56)$$

jest ewidentnie niezmiennicza. Gęstość prądu prawdopodobieństwa transformuje się jak

$$\vec{j} \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{j}' = \frac{\hbar}{2\mu i}(\psi'^* \nabla \psi' - \psi' \nabla \psi'^*) - \frac{q}{\mu} \vec{A}' \psi'^* \psi'. \quad (16.57)$$

W *Uzupełnieniach* pokazujemy, że przy omawianych transformacjach zachodzi także

$$\vec{j} \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{j}' = \vec{j}. \quad (16.58)$$

A zatem zarówno gęstość, jak i prąd prawdopodobieństwa są inwariantne względem transformacji cechowania potencjałów. Oznacza to, że przewidywania teorii nie zależą od wyboru cechowania. Wybierając pewne konkretne cechowanie możemy kierować się wygodą obliczeń, zaś wyniki nie będą zależeć od wybranego cechowania.

16.3 Cząstka bezspinowa w jednorodnym polu magnetycznym

Kwantowo-mechaniczny opis cząstki bez spinowej w polu magnetycznym wymaga posłużenia się równaniem Schrödingera z hamiltonianem postaci (16.33), a więc przede wszystkim wymaga określenia potencjałów. Rozważamy tu jednorodne (stałe co wartości i kierunku) pole magnetyczne o indukcji \vec{B} . Jest to zagadnienie statyczne, więc od razu możemy przyjąć, że potencjał skalarny pola $\phi \equiv 0$. Pozostaje wybrać potencjał wektorowy.

16.3.1 Wybór potencjału wektorowego

Zaproponujemy tu następujący wybór potencjału wektorowego

$$\vec{\mathbf{A}} = -\frac{1}{2}(\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{B}}), \quad \text{gdzie} \quad \vec{\mathbf{B}} = \text{const.} \quad (16.59)$$

Możemy powiedzieć, że wybór nasz polega na wyborze pewnego konkretnego cechowania, takiego które okazuje się wygodne w praktycznych obliczeniach. Potencjał wektorowy określa pole magnetyczne o indukcji (stosujemy tu zapis $\partial_k = \nabla_k = \partial/\partial x_k$)

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{B}} &= \text{rot } \vec{\mathbf{A}} = \vec{\mathbf{e}}_i \varepsilon_{ijk} \partial_j \left[-\frac{1}{2} (\varepsilon_{kmn} x_m B_n) \right] \\ &= -\frac{1}{2} \vec{\mathbf{e}}_i (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) \delta_{jm} B_n \\ &= -\frac{1}{2} \vec{\mathbf{e}}_i (\delta_{in} B_n - 3\delta_{in} B_n) = \vec{\mathbf{e}}_i B_i = \vec{\mathbf{B}}. \end{aligned} \quad (16.60)$$

Do konstrukcji hamiltonianu (16.33) potrzebujemy jeszcze dywergencji potencjału wektorowego. W tym przypadku wynosi ona

$$\begin{aligned} \text{div } \vec{\mathbf{A}} &= \text{div} \left[-\frac{1}{2} (\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{B}}) \right] = -\frac{1}{2} \partial_k \varepsilon_{klm} x_l B_m = -\frac{1}{2} \varepsilon_{klm} \delta_{kl} B_m \\ &= -\frac{1}{2} \varepsilon_{kkm} B_m = 0, \end{aligned} \quad (16.61)$$

bowiem $\vec{\mathbf{B}} = \text{const.}$, z założenia.

16.3.2 Hamiltonian

Korzystamy z ogólnej formuły (16.33) gdzie kładziemy $\phi = 0$ oraz $\text{div } \vec{\mathbf{A}} = 0$. Podstawiając także wybraną postać potencjału wektorowego, otrzymujemy

$$H = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{r}}) - \frac{q}{2m} (\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{B}}) \cdot \vec{\mathbf{p}} + \frac{q^2}{8m} (\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{B}})^2. \quad (16.62)$$

Operatory położenia i pędu nie komutują, więc analizując trzeci człon musimy uważać na kolejność operatorów

$$\begin{aligned} (\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{B}}) \cdot \vec{\mathbf{p}} &= (\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{B}})_k p_k = \varepsilon_{kmn} x_m B_n p_k \\ &= -B_n \varepsilon_{nmk} x_m p_k = -B_n L_n = -\vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\mathbf{L}}, \end{aligned} \quad (16.63)$$

gdzie $\vec{\mathbf{L}}$ jest operatorem orbitalnego momentu pędu.

Zbadajmy teraz wyraz w ostatnim składniku hamiltonianu (16.62).

$$\begin{aligned} (\vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{B}})^2 &= (\varepsilon_{kmn} x_m B_n) (\varepsilon_{kps} x_p B_s) = (\delta_{mp} \delta_{ns} - \delta_{ms} \delta_{np}) x_m x_p B_n B_s \\ &= x_m x_m B_n B_n - x_m x_n B_n B_m = \vec{\mathbf{r}}^2 \vec{\mathbf{B}}^2 - (\vec{\mathbf{r}} \cdot \vec{\mathbf{B}})^2 \\ &= \vec{\mathbf{B}}^2 \left(\vec{\mathbf{r}}^2 - \frac{(\vec{\mathbf{r}} \cdot \vec{\mathbf{B}})^2}{\vec{\mathbf{B}}^2} \right) = \vec{\mathbf{B}}^2 \vec{\mathbf{r}}_\perp^2, \end{aligned} \quad (16.64)$$

gdzie $\vec{\mathbf{r}}_\perp$ jest składową wektora $\vec{\mathbf{r}}$ prostopadłą do wektora pola magnetycznego $\vec{\mathbf{B}}$.

Teraz do hamiltonianu (16.62) podstawiamy relacje (16.63) i (16.64). Otrzymujemy

$$H = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{r}}) - \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\mathbf{L}} + \frac{q^2}{8m} \vec{\mathbf{B}}^2 \vec{\mathbf{r}}_\perp^2 \quad \text{gdzie} \quad \mu_B = q\hbar/2m, \quad (16.65)$$

gdzie μ_B nazywamy magnetonem Bohra. Zgodnie z wprowadzonym wcześniej nazewnictwem, rozpoznajemy tutaj

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad - \quad \text{hamiltonian atomowy,} \quad (16.66a)$$

$$H_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{B} \cdot \vec{L} \quad - \quad \text{człon paramagnetyczny,} \quad (16.66b)$$

$$H_2 = \frac{q^2}{8m} \vec{B}^2 \vec{r}_\perp^2 \quad - \quad \text{człon diamagnetyczny.} \quad (16.66c)$$

16.3.3 Dyskusja rzędów wielkości

Jeśli weźmiemy pod uwagę atom wodoru, to możemy prosto oszacować rzędy wielkości energii związanych z poszczególnymi członami hamiltonianu (16.66).

Hamiltonian atomowy H_0 jest oczywiście związany z energiami stanów atomowych. Energie te są rzędu kilku eV. Wobec tego oszacowanie odpowiednich częstości daje

$$\frac{\Delta E_0}{h} \approx 10^{14} - 10^{15} \text{ Hz.} \quad (16.67)$$

Jest to zresztą typowy zakres częstotliwości widma światła widzialnego.

Następnie chcemy oszacować energie związane z członem paramagnetycznym hamiltonianu. Wartości momentu pędu są rzędu \hbar . Wobec tego

$$\frac{\Delta E_1}{h} \approx \frac{1}{h} \left(\frac{\mu_B}{\hbar} \hbar B \right) = \frac{1}{h} \left(\frac{q\hbar}{2m} B \right) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{qB}{2m} \right). \quad (16.68)$$

Stąd więc wynika, że Biorąc dane liczbowe, ładunek $q = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, masę elektronu $m = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

$$\frac{\Delta E_1}{h} \approx 1.4 \cdot 10^{10} \left(\frac{\text{Hz}}{\text{tesla}} \right) B = 1.4 \cdot 10^6 \left(\frac{\text{Hz}}{\text{gauss}} \right) B = 1.4 \left(\frac{\text{MHz}}{\text{gauss}} \right) B \quad (16.69)$$

gdzie w końcu wartość pola B trzeba wyrazić w gaussach (10^{-4} tesli). Pole B równe 10 tesli (10^5 gaussów) jest już całkiem silne. W takim przypadku mamy więc

$$\frac{\Delta E_1}{h} \approx 1.4 \cdot 10^5 \text{ MHz} = 1.4 \cdot 10^{11} \text{ Hz.} \quad (16.70)$$

Porównując to oszacowanie z (16.67) widzimy, że

$$\Delta E_0 \gg \Delta E_1. \quad (16.71)$$

Innymi słowy, stwierdzamy, że energie związane z członem paramagnetycznym są znacznie mniejsze niż energie stanów atomowych, do których prowadzi człon atomowy.

Pozostaje zbadać człon diamagnetyczny. Sensownie jest przyjąć, że $|\vec{r}_\perp|$ jest rzędu promienia Bohra. Wobec tego piszemy oszacowanie

$$\Delta E_2 \approx \frac{q^2}{m} a_0^2 B^2. \quad (16.72)$$

Aby ułatwić rachunki, rozpatrzmy stosunek

$$\frac{\Delta E_2}{\Delta E_1} = \frac{q^2 a_0^2 B^2}{m} \frac{2m}{q\hbar B} = \frac{2qa_0^2}{\hbar} B = 2 \frac{q\hbar B}{2m} \frac{2ma_0^2}{\hbar^2} \quad (16.73)$$

gdzie $\Delta E_1 = q\hbar B/2m$ wynika z relacji (16.68). Przypomnijmy teraz, że energia jonizacji atomu wodoru wynosi $E_I = \hbar^2/2m a_0^2$. Widzimy więc, że stosunek (16.73) możemy zapisać w postaci

$$\frac{\Delta E_2}{\Delta E_1} = 2 \frac{\Delta E_1}{E_I}. \quad (16.74)$$

Energia jonizacji jest rzędu ΔE_0 , więc z (16.71) wynika, że $\Delta E_1/E_I \ll 1$. Wobec tego (16.74) sprowadza się do oszacowania

$$\frac{\Delta E_2}{\Delta E_1} \ll 1, \quad \implies \quad \Delta E_2 \ll \Delta E_1. \quad (16.75)$$

Człon diamagnetyczny daje więc energie jeszcze mniejsze niż paramagnetyczny.

Podsumowując, stwierdzamy, że energie związane z kolejnymi członami hamiltonianu (16.66) spełniają oszacowania

$$\Delta E_0 \gg \Delta E_1 \gg \Delta E_2, \quad (16.76)$$

i choć sens poniższej relacji jest dyskusyjny, napiszemy

$$\|H_0\| \gg \|H_1\| \gg \|H_2\|. \quad (16.77)$$

Oszacowanie to będziemy rozumieć w następujący sposób. Energie własne hamiltonianu atomowego są duże, stanowią główną część wartości własnych pełnego hamiltonianu. Człon paramagnetyczny daje jedynie (proporcjonalnie niewielkie) poprawki do energii atomowych. Człon diamagnetyczny (jako jeszcze znacznie mniejszy) daje przyczynki, które są poprawkami do poprawek. Argumentacja ta jest wyjaśnieniem, dlaczego w wielu praktycznych zagadnieniach człon diamagnetyczny można po prostu zaniedbać.

16.3.4 Interpretacja członu paramagnetycznego

Rozważmy człon H_1 hamiltonianu

$$H_1 = - \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\mathbf{L}} \quad \text{gdzie} \quad \mu_B = q\hbar/2m. \quad (16.78)$$

Zróbmy teraz "przypomnienie" z fizyki klasycznej.

- Ładunek q porusza się po orbicie kołowej o promieniu r z prędkością v . Opowiada temu prąd o natężeniu

$$I = \frac{q}{T} = q \frac{\omega}{2\pi} = q \frac{v}{2\pi r}. \quad (16.79)$$

- Wartość momentu magnetycznego kołowego obwodu z prądem

$$M_m = IS = q \frac{v}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{qvr}{2}. \quad (16.80)$$

- Moment pędu cząstki naładowanej

$$\mathcal{L} = mvr. \quad (16.81)$$

- Wobec tego moment magnetyczny wynosi

$$M_m = \frac{q}{2m} \mathcal{L}. \quad (16.82)$$

Na gruncie fizyki klasycznej wiemy, że zarówno moment pędu $\vec{\mathcal{L}}$, jak i moment magnetyczny $\vec{\mathbf{M}}_m$ są prostopadłe do płaszczyzny orbity.

- Energia oddziaływania obwodu z prądem o momencie magnetycznym \vec{M}_m z zewnętrznym polem magnetycznym \vec{B} dana jest wzorem

$$U_m = - \vec{B} \cdot \vec{M}_m = - \frac{q}{2m} \vec{B} \cdot \vec{\mathcal{L}}. \quad (16.83)$$

Widzimy więc pełną analogię formalną pomiędzy klasycznym wyrażeniem dla energii oddziaływania (16.83), a kwantowo-mechanicznym hamiltonianem (operatorem energii) (16.78). Dlatego też interpretujemy H_1 jako hamiltonian sprzężenia między zewnętrznym polem magnetycznym a momentem magnetycznym atomu wynikającym z orbitalnego ruchu elektronu wokół jądra.

Należy jednak poczynić dwie dodatkowe uwagi. Po pierwsze, wiemy skądinąd, że elektron posiada spin, który tutaj został całkowicie zaniedbany. Ze spinem wiąże się spinowy moment pędu \vec{S} , z nim zaś skojarzony jest spinowy moment magnetyczny \vec{M}_s elektronu

$$\vec{M}_s = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}, \quad (16.84)$$

który także może sprzęgać się z polem magnetycznym, przy czym odpowiednia energia oddziaływania wynosi

$$U_s = - 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B}. \quad (16.85)$$

Zwróćmy uwagę na podobieństwo tej formuły do (16.78), choć należy podkreślić, że jest tu obecny "dodatkowy" czynnik 2, którego nie ma w H_1 . Do dyskusji spinu wrócimy w dalszych rozdziałach.

Po drugie zauważmy, że argumentacja klasyczna jest tu trochę naciągana. Pomyliliśmy tu kanoniczny (hamiltonowski) moment pędu

$$\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \times \vec{p}, \quad (16.86)$$

z kinetycznym momentem pędu

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{L}}_{kin} &= m \vec{r} \times \vec{v} = m \vec{r} \times \frac{1}{m} (\vec{p} - q\vec{A}) = \vec{r} \times \vec{p} - q (\vec{r} \times \vec{A}) \\ &= \vec{\mathcal{L}} - q (\vec{r} \times \vec{A}). \end{aligned} \quad (16.87)$$

Można pokazać, choć już nie będziemy tego robić, że popełniony błąd nie jest duży. Błąd naszego rozumowania jest tego samego rzędu co energie ΔE_2 związane z członem diamagnetycznym (który zwykle zaniedbujemy).

16.3.5 Interpretacja członu diamagnetycznego

Gdy atom wodoropodobny jest w stanie podstawowym wówczas $l = 0$ i człon paramagnetyczny H_1 nie daje wkładu do energii, choć atom znajduje się w polu magnetycznym. Jedyne wpływy pola na wartości energii zachodzi poprzez człon diamagnetyczny H_2 . Pole magnetyczne (opisane potencjałem wektorowym \vec{A}) modyfikuje jednak prąd prawdopodobieństwa, we wzorze (16.54) jest bowiem składnik zależny od \vec{A} . Dlatego też w atomie jest indukowany pewien moment magnetyczny. Hamiltonian diamagnetyczny opisuje właśnie sprzężenie pomiędzy zewnętrznym polem magnetycznym a zaindukowanym przez to pole momentem magnetycznym.

16.4 Normalny efekt Zeemana dla atomu wodoropodobnego

Wracamy do hamiltonianu (16.65), w którym wobec przeprowadzonej dyskusji, zaniedbamy człon diamagnetyczny. Rozważamy więc hamiltonian o postaci

$$H = H_0 - \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{B} \cdot \vec{L} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{B} \cdot \vec{L}. \quad (16.88)$$

Badanym obiektem fizycznym jest atom wodoropodobny (a więc $V(\vec{r}) = V(r) = -\beta/r$). Masa zredukowana elektronu jest tak niewiele różna od masy swobodnego elektronu, że po prostu będziemy pisać m , w razie potrzeby pamiętając, że jest to masa zredukowana. Tak więc wszystko co powiedzieliśmy dotąd o atomie (wodoropodobnym) pozostaje w mocy. W szczególności, możemy wypisać funkcje własne hamiltonianu atomowego i odpowiednie energie własne

$$\begin{aligned}\psi_{nlm}(\vec{r}) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \\ E_n &= -\frac{E_{IB}}{n^2} = -\frac{m\beta^2}{2n^2\hbar^2} = -\frac{Z^2\hbar^2}{2n^2 m a_0^2}.\end{aligned}\quad (16.89)$$

Podkreślmy tutaj, że w naszym modelu nie uwzględniamy spinu elektronu. Dlatego też należy mieć świadomość, że nasze rozważania mają charakter bardziej ilustracyjny niż fizyczny. Tym niemniej model ten ma przynajmniej jakościowy sens.

16.4.1 Poziomy energetyczne

Analizujemy więc hamiltonian atomu wodoropodobnego umieszczonego w stałym i jednorodnym polu magnetycznym. Wybieramy układ współrzędnych tak, aby pole magnetyczne było skierowane wzdłuż osi z : $\vec{B} = (0, 0, B)$. Hamiltonian (16.88) zapiszemy więc w postaci

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{\beta}{r} - \frac{\mu_B}{\hbar} B L_z = H_0 - \frac{\mu_B}{\hbar} B L_z. \quad (16.90)$$

Zagadnienie ma potencjał o symetrii sferycznej. Obowiązuje więc wszystko to, o czym mówiliśmy poprzednio. Przechodzimy do współrzędnych sferycznych. Laplasjan znów produkuje część radialną i część kątową, proporcjonalną do \vec{L}^2 . Widzimy więc, że operatory H , \vec{L}^2 i L_z nadal stanowią ZZOK. Funkcje własne – stany stacjonarne pozostaną niezmiennione, tj. mają postać (16.89). Ponieważ nasz hamiltonian zawiera dodatkowy człon, więc tym razem inne będą energie. Ponieważ

$$L_z \psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar \psi_{nlm}(\vec{r}), \quad (16.91)$$

więc łatwo widać, że zagadnienie własne energii będzie postaci

$$H \psi_{nlm}(\vec{r}) = (H_0 + H_1) \psi_{nlm}(\vec{r}) = (E_n - \mu_B m B) \psi_{nlm}(\vec{r}) \quad (16.92)$$

a zatem degeneracja zostanie przynajmniej częściowo usunięta, bowiem uzyskane energie są dodatkowo numerowane liczbą m .

$$E_{n,m} = E_n - \mu_B m B. \quad (16.93)$$

Oznaczmy teraz (ładunek q elektronu jest ujemny)

$$\omega_L = -\frac{qB}{2m} = -\frac{\mu_B}{\hbar} B, \quad (16.94)$$

wobec czego mamy energie w postaci

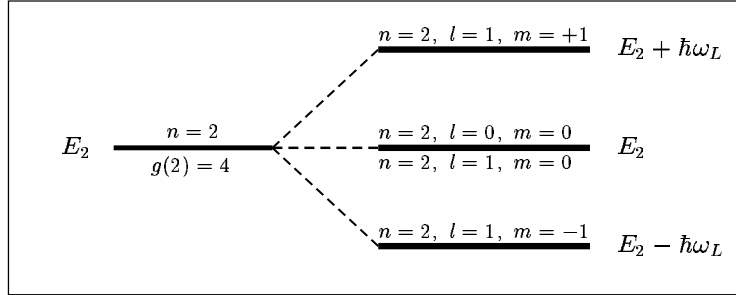
$$E_{n,m} = E_n + m\hbar\omega_L. \quad (16.95)$$

Omówimy uzyskane rezultaty dla kilku pierwszy stanów atomu wodoropodobnego. Dla stanu podstawowego mamy $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$, więc energia tego stanu nie ulegnie zmianie. Dla pierwszego stanu wzbudzonego z (16.92) i (16.95) mamy natomiast

$$(H_0 + H_1) \psi_{200}(\vec{r}) = E_2 \psi_{200}(\vec{r}) \quad (16.96a)$$

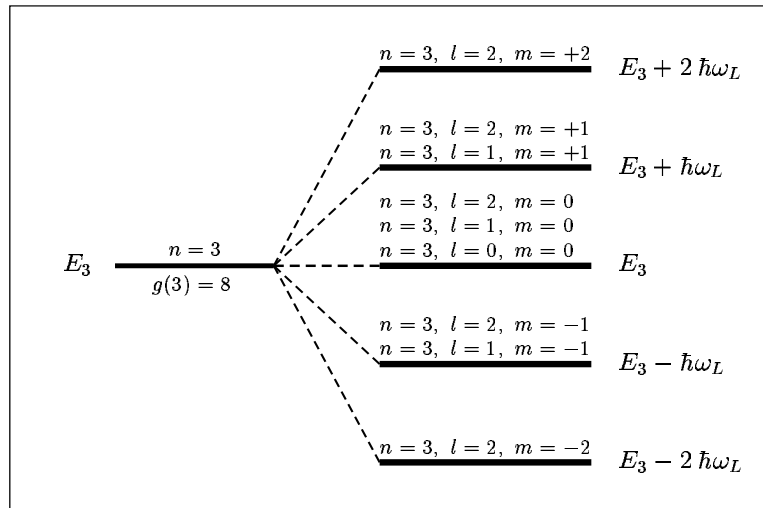
$$(H_0 + H_1) \psi_{21m}(\vec{r}) = (E_2 + m\hbar\omega_L) \psi_{21m}(\vec{r}) \quad (16.96b)$$

Biorąc kolejne $m = -1, 0, +1$, które są dopuszczalne w stanie $\psi_{21m}(\vec{r})$ stwierdzamy, że pod wpływem zewnętrznego pola magnetycznego nastąpiło rozszczepienie poziomu $n = 2$. Wartość własna energii E_2 "rozdzieliła" się na trzy, tzw. podpoziomy zeemanowskie. Dwa z nich ($n = 2, l = 1, m = \pm 1$) są niezdegenerowane, natomiast trzeci odpowiada dwóm stanom ($n = 2, l = 0, m = 0$) oraz ($n = 2, l = 0, m = 0$), jest więc zdegenerowany dwukrotnie. Pole magnetyczne sprawiło więc, że degeneracja energii została częściowo usunięta. Ilustruje to poniższy rysunek. Po lewej



Rys. 16.1: Normalny efekt Zeemana dla pierwszego stanu wzbudzonego ($n = 2$) atomu wodoropodobnego.

stronie mamy sytuację bez pola, więc dla ($n = 2$) mamy jeden $2^2 = 4$ -krotnie zdegenerowany poziom energetyczny. Po prawej stronie przedstawiona jest sytuacja w polu \vec{B} . Poziom zdegenerowany uległ rozszczepieniu na trzy podpoziomy, liczby kwantowe (numerujące odpowiednie stany) zostały przyporządkowane każdemu z podpoziomów. Rysunek 16.1 nie uwzględnia żadnej skali energetycznej. Jest to jedynie schemat rozszczepienia poziomu $n = 2$ na podpoziomy zeemanowskie. Oczywiście możemy kontynuować nasze rozważania. Kolejna wartość własna energii E_3



Rys. 16.2: Normalny efekt Zeemana dla drugiego stanu wzbudzonego ($n = 3$) atomu wodoropodobnego.

atomu wodoropodobnego jest (w sytuacji bez pola) zdegenerowana 8-krotnie. Prowadząc analizę tak samo jak dla $n = 2$, możemy zbudować schemat analogiczny do przedstawionego na rysunku 16.1. Dla $n = 3$ maksymalna wartość orbitalnej liczby kwantowej $l = 2$. Wobec tego minimalna i maksymalna wartość m to ± 2 . W obecności pola magnetycznego możemy więc spodziewać się, że będzie występować 5 podpoziomów zeemanowskich. Nie będziemy tu prowadzić wszystkich

(bardzo prostych) rozważań. Wyniki dyskusji dla $n = 3$ podsumowuje schemat 16.2, który także nie zachowuje żadnej skali energetycznej.

Dalsza analiza dla kolejnych n prowadzi do wniosku, że n^2 -krotnie zdegenerowany poziom energetyczny ulega rozszczepieniu na podpoziomy zeemanowskie, co częściowo usuwa degenerację. Liczba podpoziomów zeemanowskich jest równa ilości dopuszczalnych liczb kwantowych m dla maksymalnego l dozwolonego dla danego n . A więc liczba podpoziomów równa jest $(2l_{max} + 1)$. Z drugiej strony $l_{max} = n - 1$, zatem mamy $[2(n - 1) + 1] = (2n - 1)$ podpoziomów zeemanowskich. Widzimy więc, że n^2 -krotnie zdegenerowany poziom energetyczny atomu wodoropodobnego ulega rozszczepieniu na nieparzystą liczbę podpoziomów zeemanowskich. Efekt ten nazywamy normalnym efektem Zeemana.

Zauważmy, że dla niektórych atomów zachodzi anomalny efekt Zeemana, w którym liczba podpoziomów zeemanowskich jest parzysta. Wynika to z istnienia spinu elektronu, który tutaj zaniedbaliśmy. Do dyskusji spinu, jego wpływu na różne efekty zachodzące w atomach wrócimy w dalszych częściach wykładu.

* * * * *