

# Оглавление

<b>Глава 4. Взаимодействие систем заряженных частиц с электромагнитным полем . . . . .</b>	<b>4</b>
4.1. Гамильтониан Паули . . . . .	4
4.2. Оператор магнитного момента в квантовой механике . . . . .	7
4.3. Оператор взаимодействия системы заряженных частиц с электромагнитным полем . . . . .	10
4.4. Иерархия магнитных взаимодействий в атомных системах . . . . .	13
4.5. Гамильтониан сверхтонкого взаимодействия . . . . .	15
4.6. Взаимодействие с переменным электромагнитным полем . . . . .	18

## Глава 4

### Взаимодействие систем заряженных частиц с электромагнитным полем

#### 4.1. Гамильтониан Паули

В параграфе 2.4 первой части было получено выражение для гамильтониана заряженной частицы в электромагнитном поле, при этом было установлено соответствие обобщенного  $\mathcal{P}$  и кинематического  $\mathbf{p}$  импульсов

$$\mathcal{P} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad (4.1)$$

где  $\mathbf{A}$  – векторный потенциал электромагнитного поля.

В квантовой механике мы должны согласно принципу соответствия заменить физические величины операторами, при этом в координатном представлении

$$\mathcal{P} \rightarrow \hat{\mathcal{P}} = -i\hbar\nabla. \quad (4.2)$$

Казалось бы, что теперь можно также согласно принципу соответствия заменить классический гамильтониан оператором Гамильтона, однако это будет не совсем верно, поскольку частица в квантовой механике может обладать дополнительными степенями свободы (спином), с которыми могут быть связаны неклассические взаимодействия. Для заряженных частиц со спином равным нулю можно сразу записать:

$$\hat{H}_{s=0} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathcal{P}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + e\varphi, \quad (4.3)$$

где  $\varphi$  – скалярный потенциал электромагнитного поля.

Частица (с массой  $m$ ), обладающая отличным от нуля спином  $s$  *обязательно* обладает магнитным моментом<sup>1</sup>, поэтому классиче-

<sup>1</sup>Подробнее о магнитном моменте в квантовой механике см. параграф 4.2

ское выражение для “фиктивной энергии” взаимодействия магнитного момента с магнитным полем приобретает реальный физический смысл: энергия частицы зависит от магнитного поля в результате взаимодействия ее собственного магнитного момента (не связанного с орбитальным движением!) с магнитным полем. Иными словами, согласно принципу соответствия мы должны учитывать взаимодействие, вводя оператор

$$\widehat{U}_m = -(\widehat{\boldsymbol{\mu}}\widehat{\mathcal{H}}) = -g\mu_0(\widehat{\mathbf{s}}\widehat{\mathcal{H}}), \quad (4.4)$$

где  $g$  и  $\mu_0$  соответственно  $g$ -фактор и магнетон частицы.

Таким образом, оператор Гамильтона заряженной частицы в электромагнитном поле в общем случае имеет вид:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m} \left( \widehat{\mathcal{P}} - \frac{e}{c} \widehat{\mathbf{A}} \right)^2 + e\varphi - g\mu_0(\widehat{\mathbf{s}}\widehat{\mathcal{H}}). \quad (4.5)$$

Выражение (4.5) называется *гамильтонианом Паули*<sup>2</sup>, а уравнение Шредингера с гамильтонианом (4.5) – уравнением Паули.

Гамильтониан Паули зависит не только от величины магнитного поля, но и от потенциалов  $(\phi, \mathbf{A})$ . Однако потенциалы определены неоднозначно, поскольку имеющие непосредственный физический смысл поля определяются производными от компонентов 4-потенциала и инвариантны относительно калибровочного преобразования потенциалов:

$$A^i = A'^i + \frac{\partial f}{\partial x_i}. \quad (4.6)$$

Очевидно, что уравнение Шредингера также должно быть инвариантно относительно такого калибровочного преобразования. Однако легко видеть, что формальная замена потенциалов в гамильтониане изменяет вид уравнения. Таким образом, одновременно с преобразованием (4.6) необходимо преобразовать и волновую функцию. Поскольку прямой физический смысл имеет не сама волновая функция, а квадрат ее модуля (или другая билинейная комбинация), физические результаты не могут измениться при изменении фазы волновой функции. Можно видеть, что, делая замену волновой функции

$$\Psi = e^{-ief/\hbar c} \Psi' \quad (4.7)$$

<sup>2</sup>Гамильтониан Паули получается в результате нерелятивистского предела из уравнения Дирака для частицы со спином  $s = 1/2$ .

при одновременном преобразовании (4.6), сохраняем вид уравнения Шредингера. Действительно:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= e^{-ief/\hbar c} \left\{ \frac{e}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \Psi' + i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} \right\}; \\ \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi &= \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) e^{-ief/\hbar c} \left( \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi' - \frac{e}{c} \nabla f \Psi' \right) = \\ &= e^{-ief/\hbar c} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla f \right) \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{e}{c} \nabla f \right) \hat{\Psi}' = \\ &= e^{-ief/\hbar c} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \Psi'. \end{aligned}$$

Подставляя полученные выражения в уравнение Паули, имеем

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \Psi' + e\varphi' \Psi' - g\mu_0 (\hat{\mathbf{s}} \hat{\mathcal{H}}),$$

где

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}.$$

Зависимость гамильтониана Паули от магнитного поля приводит к тому, что энергетический спектр стационарного уравнения Шредингера (Паули) также зависит от него, причем эта зависимость связана не только с вкладом энергии взаимодействия собственного магнитного момента с магнитным полем. Поэтому может сложиться впечатление, что в квантовой механике энергия даже бесспиновой частицы зависит от магнитного поля, что противоречит общим результатам классической электродинамики. Однако на самом деле здесь нет никакого противоречия. Действительно, не следует забывать, что наблюдаемая величина, в данном случае энергия частицы, есть среднее по состоянию:

$$E_{\text{набл}} = \bar{E} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle,$$

которое в свою очередь *также зависит от магнитного поля*. Зависимость состояния от магнитного поля понятна, и она соответствует классическим представлениям: в магнитном поле заряженная частица изменяет свое движение. В квантовой механике такому классическому изменению движения соответствует не только изменение и зависимость состояния от магнитного поля, но появление зависимости плотности состояний частицы от  $\mathcal{H}$ .

## 4.2. Оператор магнитного момента в квантовой механике

Понятие магнитного момента играет важную роль в квантовой механике. Если в классической физике магнитный момент связан только с орбитальным движением заряженных частиц, то в квантовой механике магнитный момент связан не только с заряженными частицами, но и с нейтральными частицами, обладающими спином и отличной от нуля массой. Более того, именно непосредственная связь магнитного момента частицы и спина обусловила возможность обнаружения у частиц существенно квантовой физической величины: спинового момента.

Из классической электродинамики хорошо известно, что система заряженных частиц, имеющая орбитальный момент импульса  $\mathbf{M} = \sum [\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a]$ , обладает также и магнитным моментом  $\mathcal{M}$ . Например, для двух нерелятивистских частиц с зарядами и массами  $e_1, e_2$  и  $m_1, m_2$  в системе центра масс имеем

$$\mathcal{M} = \frac{1}{2c} \left( \frac{e_1}{m_1} + \frac{e_2}{m_2} \right) \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{M}, \quad (4.8)$$

где  $\mathbf{M}$  – орбитальный момент в системе центра масс. В общем случае выражение для магнитного момента системы заряженных частиц в произвольной системе отсчета имеет вид

$$\mathcal{M} = \frac{1}{2c} \sum_a e_a [\mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a]. \quad (4.9)$$

Естественно, заряд частицы  $e_a$  учитывается с соответствующим знаком. Если отношение заряда к массе для всех частиц одинаково, то

$$\mathcal{M} = \frac{e}{2mc} \sum_a m_a [\mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a] = \frac{e}{2mc} \mathbf{M}. \quad (4.10)$$

В этом случае для системы зарядов можно ввести единое гиромагнитное отношение – отношение магнитного момента к орбитальному, которое равно

$$\gamma = \frac{e}{2mc}. \quad (4.11)$$

В квантовой механике мы должны физическим величинам сопоставить операторы. Поскольку орбитальный момент принято измерять

в квантовой механике в единицах  $\hbar$ , оператор магнитного момента  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  частицы связан с орбитальным моментом  $\hat{\mathbf{l}}$  очевидным соотношением:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \pm \frac{|e|\hbar}{2mc} \hat{\mathbf{l}} \equiv \pm \mu_0 \hat{\mathbf{l}}. \quad (4.12)$$

Константа  $\mu_0$  называется магнетоном частицы и *по определению положительна*. По определению магнитный момент – это максимальная проекция оператора магнитного момента на какую-либо ось. Для орбитального движения он совпадает с магнетоном частицы. Гиромагнитное отношение имеет знак, совпадающий со знаком заряда частицы.

Для собственного магнитного момента частицы, связанного со спином, такие простые рассуждения провести нельзя, поскольку для него нет классической интерпретации и нет возможности воспользоваться принципом соответствия. Если принять определение магнитного момента как значение его максимальной проекции, мы получим, что для спина  $s = 1/2$  она в два раза больше, чем следующая из формальной подстановки в определение (4.12) оператора спинового момента. Поэтому полученную связь следует обобщить и записать *по определению*:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu \hat{\mathbf{s}}/s. \quad (4.13)$$

В формуле (4.13) магнитный момент  $\mu$  – константа, значение которой различно для различных частиц. Для электрона магнитный момент равен

$$\mu \approx \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (4.14)$$

В квантовой электродинамике показывается, что соотношение (4.14) имеет место для всех лептонов (с отличной от нуля массой), т.е. для электрона, позитрона, мюонов.

Оператор магнитного момента, связанного со спином частицы, можно определить через гиромагнитное отношение так же, как и для орбитального момента:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \hbar\gamma\hat{\mathbf{s}}. \quad (4.15)$$

Сравнивая два определения, видим, что величина гиромагнитного отношения и магнитного момента связаны простым соотношением:

$$\gamma = \mu/\hbar s. \quad (4.16)$$

Для лептонов с точностью до членов порядка  $\alpha$  гиромагнитное отношение для спинового момента в два раза больше, чем для орбитального момента.

Наконец, приведем еще одно определение оператора магнитного момента, выраженное через магнетон частицы:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = g\mu_0\hat{\mathbf{s}}. \quad (4.17)$$

Здесь константа  $g$  называется  $g$ -фактором частицы. Для электрона  $\mu_0$  – магнетон Бора, а  $g \approx -2$ . Для лептонов  $g \approx \pm 2$ . Для нуклонов соответствующий магнетон выражается через массу протона  $M_p$  и называется ядерным магнетоном:

$$\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2M_p c}. \quad (4.18)$$

Для протона  $g$ -фактор равен  $g_p \approx +5,585$ , а для нейтрона  $g_n \approx -3,826$ .

Запишем, как и для гиромагнитного соотношения, связь магнитного момента частицы с ее магнетоном:

$$\boldsymbol{\mu} = g\mu_0\mathbf{s}. \quad (4.19)$$

Так, для протона и нейтрона соответственно получаем

$$\mu_p \approx 2,79\mu_N, \quad \mu_n \approx -1,91\mu_N \quad (4.20)$$

Магнитными моментами обладает также большинство изотопов ядер, при этом для них оказывается справедливым соотношение (4.19), где  $\mu_0 = \mu_N$ , а  $g$ -факторы могут быть как положительными, так и отрицательными. Например, наиболее распространенный стабильный изотоп азота  $^{14}\text{N}$  (99,635%) имеет спин  $s = 1$ , а магнитный момент  $\mu_{14} = +0,404\mu_N$ , т.е.  $g_{14} = +0,404$ , а изотоп  $^{15}\text{N}$  (0,365%) имеет спин  $s = 1/2$ ,  $\mu_{15} = -0,283\mu_N$  и соответственно  $g_{15} = -0,566$ .

В заключение параграфа еще раз повторим все три определения оператора магнитного момента:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu\hat{\mathbf{s}}/s = \hbar\gamma\hat{\mathbf{s}} = g\mu_0\hat{\mathbf{s}}. \quad (4.21)$$

### 4.3. Оператор взаимодействия системы заряженных частиц с электромагнитным полем

Для системы заряженных частиц гамильтониан будет равен сумме гамильтонианов (4.5), где теперь под потенциалами и магнитным полем следует понимать как внешние потенциалы и поля, так и создаваемые самими частицами системы. Таким образом будет учтено взаимодействие частиц между собой и с внешними полями<sup>3</sup>:

$$\hat{H} = \sum_a \left\{ \frac{1}{2m_a} \left( \hat{\mathcal{P}}_a - \frac{e_a}{c} \hat{\mathbf{A}}_a \right)^2 + e_a \varphi_a - g_a \mu_{0a} (\hat{\mathbf{s}}_a \hat{\mathcal{H}}_a) \right\}, \quad (4.22)$$

где суммирование ведется по всем частицам системы, а потенциалы и поля определяются на соответствующих частицах.

Выделим из гамильтониана (4.22) взаимодействие, определяющее изменение состояния системы в магнитном поле. В первом слагаемом возникают члены

$$\left( \hat{\mathcal{P}}_a - \frac{e_a}{c} \hat{\mathbf{A}}_a \right)^2 = \hat{\mathcal{P}}_a^2 - \frac{e_a}{c} \left( \hat{\mathcal{P}}_a \hat{\mathbf{A}}_a + \hat{\mathbf{A}}_a \hat{\mathcal{P}}_a \right) + \left( \frac{e_a}{c} \right)^2 \hat{\mathbf{A}}_a^2. \quad (4.23)$$

Преобразуем выражение в скобках правой части

$$\hat{\mathbf{A}}_a \hat{\mathcal{P}}_a = \hat{\mathcal{P}}_a \hat{\mathbf{A}}_a - \left[ \hat{\mathcal{P}}_a, \hat{\mathbf{A}}_a \right] = \hat{\mathcal{P}}_a \hat{\mathbf{A}}_a + i\hbar \operatorname{div} \hat{\mathbf{A}}_a.$$

В первой части мы видели, что  $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$  в статическом поле или при выборе потенциалов в кулоновской калибровке. Как правило приходится рассматривать задачи либо о взаимодействии со статическим магнитным полем, либо со свободным электромагнитным полем, для которого выбирается кулоновская калибровка. Таким образом, можно, не умаляя общности считать, что операторы импульса и векторного потенциала между собой коммутируют, и гамильтониан системы заряженных частиц в электромагнитном поле

<sup>3</sup>Вообще говоря, гамильтониан (4.22) учитывает не все взаимодействия в системе зарядов: собственный магнитный момент движущейся частицы будет взаимодействовать с электрическим полем, что проявляется как спин-орбитальное взаимодействие. Спин-орбитальное взаимодействие получается в нерелятивистском пределе из уравнения Дирака при разложении по степеням  $v/c$  до второго порядка включительно.



может быть записан в виде

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_a \left\{ \frac{1}{2m_a} \hat{\mathcal{P}}_a^2 + e_a \varphi_a - \right. \\ \left. - \frac{e_a}{m_a c} \hat{\mathcal{P}}_a \hat{\mathbf{A}}_a - g_a \mu_{0a} (\hat{\mathbf{s}}_a \hat{\mathcal{H}}_a) + \frac{1}{2m_a} \left( \frac{e_a}{c} \right)^2 \hat{\mathbf{A}}_a^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Легко заметить, что все слагаемые во второй строчке выражения (4.24) связаны с магнитным полем и могут рассматриваться как релятивистские поправки к гамильтониану, содержащему только кулоновские взаимодействия (с электрическим полем). Поэтому в нерелятивистском случае принято гамильтониан системы заряженных частиц представлять в виде<sup>4</sup>:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2, \quad (4.25)$$

где

$$\hat{V}_1 = - \sum_a \left\{ \frac{e_a}{m_a c} \hat{\mathcal{P}}_a \hat{\mathbf{A}}_a + g_a \mu_{0a} (\hat{\mathbf{s}}_a \hat{\mathcal{H}}_a) \right\}, \quad (4.26)$$

$$\hat{V}_2 = \sum_a \frac{1}{2m_a} \left( \frac{e_a}{c} \right)^2 \hat{\mathbf{A}}_a^2. \quad (4.27)$$

Ниже мы покажем, что взаимодействие (4.27) имеет более высокий порядок малого параметра  $v/c$ , поэтому его учитывают в том случае, когда состояния системы таковы, что вклад первого, или даже второго порядка теории возмущений для взаимодействия (4.26) равны нулю.

Взаимодействие (4.26) в статическом магнитном поле может быть преобразовано. Действительно, независящее от времени внешнее магнитное поле для микроскопических объектов всегда может

---

<sup>4</sup>Обычно к гамильтониану  $\hat{H}_0$  относят также спин-орбитальное взаимодействие, которое в нашем случае не введено в явном виде, однако его можно учесть, записав невозмущенный гамильтониан в виде

$$\hat{H}_0 = \sum_a \frac{1}{2m_a} \hat{\mathcal{P}}_a^2 + \hat{V},$$

где оператор  $\hat{V}$  включает наряду с кулоновскими, также и спин-орбитальное взаимодействие.

считаться однородным, поэтому векторный потенциал его равен

$$\mathbf{A}_a \equiv \mathbf{A}(\mathbf{r}_a) = \frac{1}{2} [\boldsymbol{\mathcal{H}} \times \mathbf{r}_a]. \quad (4.28)$$

Подставим выражение для векторного потенциала (4.28) в скалярное произведение в операторе (4.26) и получим

$$\frac{e_a}{2m_a c} \left( \widehat{\mathcal{P}}_a [\boldsymbol{\mathcal{H}} \times \mathbf{r}_a] \right) = \mu_{0a} \left( \boldsymbol{\mathcal{H}} \left[ \mathbf{r}_a \times \widehat{\mathcal{P}}_a \right] \right) = \mu_{0a} \left( \boldsymbol{\mathcal{H}} \widehat{\mathbf{l}}_a \right). \quad (4.29)$$

Системы зарядов, рассматриваемые в квантовой механике, представляют, как правило, атомы или молекулы. В атомах ядро считается бесконечно тяжелым, находящимся в начале координат, а в молекулах ядра совершают вращательно-колебательные движения с характерными частотами, существенно меньшими характерных частот электронной подсистемы. Поэтому в исходном гамильтониане (4.24) удастся в нулевом приближении разделить “быструю” электронную и “медленную” ядерную подсистемы. Для электронной подсистемы магнитные взаимодействия (4.26) и (4.27) упрощаются, поскольку все частицы имеют одно и то же гиромагнитное отношение. Полагая (для простоты)  $g_e \approx -2$ , можем записать оператор  $\widehat{V}_1$  в виде

$$\widehat{V}_1 \equiv \widehat{V}_Z = \mu_0 \boldsymbol{\mathcal{H}} \left( \widehat{\mathbf{L}} + 2\widehat{\mathbf{S}} \right). \quad (4.30)$$

Оператор (4.30) описывает *зеemanовское взаимодействие*.

Исходя из выражения (4.30), можно сказать, что

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{ат}} = -\mu_0 \left( \widehat{\mathbf{L}} + 2\widehat{\mathbf{S}} \right)$$

– оператор магнитного момента атома (молекулы).

Оценим порядок величины взаимодействий (4.30) и (4.27) для электронной подсистемы. Имеем

$$V_Z \sim \frac{e\hbar\mathcal{H}L}{mc} \sim \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{\hbar^2}{me^2} \cdot e\mathcal{H} = \alpha \cdot \frac{e}{a_0^2} \cdot a_0^3 \mathcal{H} \sim \alpha \cdot \mathcal{E}_0 \mathcal{H} a_0^3, \quad (4.31)$$

где  $\mathcal{E}_0$  – атомная единица электрического поля,  $a_0$  – атомная единица длины.

Второе взаимодействие соответственно имеет порядок

$$V_2 \equiv V_D \sim \frac{e^2}{mc^2} \mathcal{H}^2 a_0^2 = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} \cdot \frac{\hbar^2}{me^2} \mathcal{H}^2 a_0^2 = \alpha^2 \mathcal{H}^2 a_0^3. \quad (4.32)$$

Таким образом, отношение второго взаимодействия к первому имеет порядок

$$\frac{V_D}{V_Z} \sim \alpha \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{E}_0} \ll 1.$$

Следовательно, вторым взаимодействием *всегда* можно пренебречь, если первое взаимодействие дает отличный от нуля вклад по теории возмущений.

#### 4.4. Иерархия магнитных взаимодействий в атомных системах

Системы зарядов, рассматриваемые в квантовой механике, как правило содержат частицы, обладающие отличным от нуля спином, поэтому в них всегда присутствуют магнитные взаимодействия. При этом следует разделять взаимодействия с внешним магнитным полем, которые зависят от величины поля как *от параметра*, и взаимодействия, связанные с полями, создаваемыми самими частицами. Последние взаимодействия не зависят от внешних параметров и в нерелятивистских системах *всегда* могут быть учтены как *малые поправки* к основному гамильтониану, содержащему кулоновские взаимодействия. Магнитные взаимодействия в системе частиц также условно можно разделить на взаимодействия магнитных моментов частиц между собой и с полями, создаваемыми токами. Поля, создаваемые токами зарядов, приводят к *спин-орбитальному* взаимодействию, величину которого можно легко оценить, а точное выражение получается в результате разложения уравнения Дирака до второго порядка малости по  $v/c$ .

Оператор взаимодействия магнитного момента частицы с магнитным полем запишем в виде

$$\hat{V}_{s-o} = -(\hat{\boldsymbol{\mu}} \hat{\mathcal{H}}), \quad (4.33)$$

где  $\hat{\mathcal{H}}$  – оператор магнитного поля, создаваемого токами других заряженных частиц, в системе, где данный магнитный момент покоится. В нерелятивистском случае магнитное поле в системе покоя магнитного момента определяется с помощью преобразования

Лоренца электрического поля, существующего в лабораторной системе отсчета:

$$\mathcal{H} = [\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \mathbf{v}/c]. \quad (4.34)$$

В свою очередь оператор электрического поля определяется градиентом кулоновского взаимодействия  $V$  в системе зарядов:

$$\nabla V = -e\boldsymbol{\mathcal{E}}.$$

Учитывая определение оператора магнитного момента электрона, получаем

$$\widehat{V}_{s-o} \sim \frac{g\mu_0}{emc} (\hat{\mathbf{s}}[\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}]) = \frac{\hbar}{(mc)^2} (\hat{\mathbf{s}}[\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}]). \quad (4.35)$$

Точное выражение для оператора спин-орбитального взаимодействия электрона в системе зарядов имеет вид<sup>5</sup>:

$$\widehat{V}_{s-o} = \frac{\hbar}{2(mc)^2} (\hat{\mathbf{s}}[\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}]). \quad (4.36)$$

Важный случай представляет движение частиц в центральном поле (атом):  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ , тогда  $\nabla V = \mathbf{nd}V/dr$ , и оператор (4.36) имеет вид

$$\widehat{V}_{s-o} = \frac{\hbar^2}{2(mc)^2} (\hat{\mathbf{s}}[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}, \quad (4.37)$$

но  $[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = \hbar\mathbf{l}$ , поэтому окончательно получаем

$$\widehat{V}_{s-o} = \frac{\hbar^2}{2(mc)^2 r} \frac{dV}{dr} (\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}) = A(r)(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{l}}). \quad (4.38)$$

Для кулоновского потенциала  $V = -Ze^2/r$  получаем выражение, определяющее характерную величину спин-орбитального взаимодействия:

$$A(r) = \frac{Ze^2\hbar^2}{2(mc)^2 r^3} > 0. \quad (4.39)$$

Оценим теперь порядок величины спин-орбитального взаимодействия в атомных системах. Подставляя  $r \sim a_0 = \hbar^2/me^2$  – атомную единицу длины, получаем

$$A \sim \frac{\hbar^2 e^2}{m^2 c^2} \frac{m^3 e^6}{\hbar^6} = \frac{me^4}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right) = \alpha^2 E_0.$$

<sup>5</sup>Это же выражение можно получить, если при рассмотрении взаимодействия (4.33) учесть прецессию Томаса.

Таким образом, характерная энергия спин-орбитального взаимодействия на 4 порядка меньше характерной атомной энергии. Спин-орбитальное взаимодействие обеспечивает так называемую *тонкую структуру уровней энергии* в системах заряженных частиц (атомах и молекулах).

Взаимодействие магнитных моментов частиц между собой обычно учитывается только для частиц *разного сорта*, составляющих систему зарядов, например, магнитных моментов электронов и ядер в атомах и молекулах или магнитных моментов ядер в многоатомных молекулах. Оценим величину магнитного диполь-дипольного взаимодействия электронов и ядер:

$$V_{\text{dd}} \sim \frac{\mu_{\text{об}}\mu_{\text{N}}}{r^3} \sim \frac{e^2\hbar^2}{mM_p c^2} \frac{m^3 e^6}{\hbar^6} = \frac{m}{M_p} \alpha^2 E_0,$$

где  $M_p$  – масса протона. Таким образом магнитное диполь-дипольное взаимодействие на 3 порядка меньше спин-орбитального. Оно определяет *сверхтонкую структуру* уровней энергии систем зарядов.

Как видно из оценки (4.31), величина взаимодействия  $V_Z$  становится сравнимой с величиной спин-орбитального взаимодействия, входящего в гамильтониан свободного атома, при значении внешнего поля порядка

$$\mathcal{H} \sim \alpha \mathcal{E}_0,$$

что на практике соответствует величинам  $\mathcal{H} \sim 10^4 - 10^5$  Гс.

Решение задачи о системе заряженных частиц во внешнем статическом магнитном поле сводится к определению “расщепления” вырожденных уровней энергии атомов или молекул в отсутствие поля – *эффект Зеемана*. Как видно из приведенных выше оценок, эта задача может решаться методами теории возмущений для вырожденного спектра. Однако выделение невозмущенного гамильтониана в задаче зависит от соотношения *зеemannовской энергии взаимодействия*  $V_Z$  и спин-орбитального взаимодействия в атоме. Поэтому решение задачи по теории возмущений в общем случае удастся получить только в двух приближениях:

- 1) слабое внешнее магнитное поле, когда взаимодействие  $V_Z \ll V_{s-o}$  – спин-орбитального взаимодействия в свободном атоме (*аномальный эффект Зеемана*), и
- 2) сильное магнитное поле, когда имеется противоположное неравенство  $V_Z \gg V_{s-o}$  (нормальный эффект Зеемана или *эффект Пашена–Бака*).

## 4.5. Гамильтониан сверхтонкого взаимодействия

Сверхтонкое взаимодействие определяется оператором (4.26), в котором магнитное поле и соответствующий векторный потенциал создаются магнитными моментами частиц. Будем для определенности рассматривать взаимодействие магнитного момента электрона с магнитным моментом ядра, находящегося в начале координат. Операторы магнитных моментов электрона  $\hat{\mu}_e$  и ядра  $\hat{\mu}_n$  определяются в соответствии с формулой (4.4) и равны<sup>6</sup>

$$\hat{\mu}_e \approx -2\mu_B \hat{\mathbf{s}}_e, \quad \hat{\mu}_n \approx g_n \mu_N \hat{\mathbf{I}}, \quad (4.40)$$

где

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c}, \quad \mu_N = \frac{|e|\hbar}{2M_p c}$$

соответственно магнетон Бора и ядерный магнетон,  $g_n$  –  $g$ -фактор ядра, который может быть как положительным, так и отрицательным.

Для любого слагаемого в сумме (4.26) можем записать

$$\hat{V}_{hfs} = \frac{|e|\hbar}{mc} (\hat{\mathbf{p}} \hat{\mathbf{A}}) + V_{dd}, \quad (4.41)$$

где  $\hat{\mathbf{p}}$  – оператор импульса электрона,  $\hat{\mathbf{A}}$  и  $\hat{V}_{dd}$  – операторы векторного потенциала, создаваемого ядром, и магнитного диполь-дипольного взаимодействия.

Оператор векторного потенциала, создаваемого магнитным моментом ядра, запишем согласно принципу соответствия из выражения для векторного потенциала магнитного момента, полученного в главе 1 первой части:

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{[\hat{\mu}_n \times \mathbf{r}]}{r^3} = \text{rot} \frac{\hat{\mu}_n}{r} \quad (4.42)$$

Преобразуем первое слагаемое оператора сверхтонкого взаимодействия (4.41)

$$\hat{\mathbf{p}} \hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{r^3} (\hat{\mathbf{p}} [\hat{\mu}_n \times \hat{\mathbf{r}}]) = \frac{1}{r^3} (\hat{\mu}_n [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}]) = \frac{\hbar}{r^3} (\hat{\mu}_n \hat{\mathbf{I}}) = \frac{g_n \mu_N \hbar}{r^3} (\hat{\mathbf{I}}). \quad (4.43)$$

<sup>6</sup>Оператор спина ядра принято обозначать  $\hat{\mathbf{I}}$ .

Оператор диполь-дипольного взаимодействия (второе слагаемое в формуле (4.41)) равен

$$\hat{V}_{dd} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_e \text{rot} \left[ \hat{\boldsymbol{\mu}}_n \times \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^3} \right] = 2g_n \mu_B \mu_N \hat{\mathbf{s}} \text{rotrot} \frac{\hat{\mathbf{I}}}{r}. \quad (4.44)$$

Преобразуем полученное выражение

$$\hat{\mathbf{s}} \text{rotrot} \frac{\hat{\mathbf{I}}}{r} = \hat{s}_\alpha \hat{I}_\beta e_{\alpha\gamma\mu} e_{\mu\nu\beta} \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \frac{1}{r} = \hat{s}_\alpha \hat{I}_\beta \left( \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} - \delta_{\alpha\beta} \Delta \right) \frac{1}{r}.$$

Первое слагаемое дает хорошо известное выражение энергии взаимодействия двух точечных диполей, которое не приводит к недоразумениям в классической электродинамике, поскольку по определению  $r \neq 0$ . Однако легко видеть, что это выражение становится неопределенным при  $r \rightarrow 0$ . Преобразуем первое слагаемое в скобках, чтобы устранить неопределенность, возникающую для квантовой частицы, когда  $r \rightarrow 0$ :

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} = \left( \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \Delta \right) + \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \Delta.$$

Теперь оператор, стоящий в скобках, при действии на некоторую функцию приводит к формальному выражению, обращаемому в 0 при  $r \rightarrow 0$  и совпадающему по форме с классическим выражением для энергии диполь-дипольного взаимодействия, поскольку при  $r \neq 0$  имеем  $\Delta(1/r) = 0$ . Вместе с тем замечаем, что с учетом  $r = 0$

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}). \quad (4.45)$$

Таким образом оператор диполь-дипольного взаимодействия может быть записан в виде

$$\hat{V}_{dd} = 2g_n \mu_B \mu_N \frac{3(\hat{\mathbf{s}}\mathbf{n})(\hat{\mathbf{I}}\mathbf{n}) - (\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{I}})}{r^3} + \frac{8\pi}{3} 2g_n \mu_B \mu_N (\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{I}}) \delta(\mathbf{r}). \quad (4.46)$$

Последнее выражение в операторе диполь-дипольного взаимодействия дает отличный от нуля вклад только в том случае, когда вероятность нахождения электрона на ядре отлична от нуля и поэтому называется *контактным взаимодействием*.

Собирая все результаты, получаем окончательное выражение для оператора сверхтонкого взаимодействия

$$\widehat{V}_{hfs} = \frac{2g_n\mu_B\mu_N}{r^3} \left( (\widehat{\mathbf{I}\mathbf{I}}) + 3(\widehat{\mathbf{s}\mathbf{n}})(\widehat{\mathbf{I}\mathbf{n}}) - (\widehat{\mathbf{s}\mathbf{I}}) \right) + \frac{16\pi}{3} g_n\mu_B\mu_N (\widehat{\mathbf{S}\mathbf{I}}) \delta(\mathbf{r}). \quad (4.47)$$

#### 4.6. Взаимодействие с переменным электромагнитным полем

Задача о взаимодействии системы зарядов с переменным электромагнитным полем в квантовой механике, как же как и в классической электродинамике, сводится к взаимодействию с полем монохроматической плоской волны с волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Плоская волна поперечна и для нее всегда выполняются условия:  $\boldsymbol{\mathcal{E}} \perp \boldsymbol{\mathcal{H}} \perp \mathbf{k}$ . Для плоской волны удобно выбрать кулоновскую калибровку, тогда  $\varphi = 0$ ,  $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$  и соответственно  $\boldsymbol{\mathcal{E}} \parallel \mathbf{A}$ .

Для определенности будем рассматривать электронную подсистему, гамильтониан которой в электромагнитном поле можно всегда записать в *универсальной форме* (4.24), но при этом следует учитывать, что векторный потенциал зависит не только от координат, но и времени:

$$\begin{aligned} \widehat{H} = \widehat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{mc} \sum_a \left( \widehat{\mathcal{P}}_a \mathbf{A}(\mathbf{r}_a, t) \right) + \\ + 2\mu_0 \sum_a \left( \widehat{\mathbf{s}}_a \boldsymbol{\mathcal{H}}(\mathbf{r}_a, t) \right) + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_a). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Запишем векторный потенциал плоской линейно поляризованной монохроматической волны:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \Re \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} = \mathbf{A}_0 \cos(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t + \alpha). \quad (4.49)$$

Для области видимой части спектра частота  $\omega \sim 10^{15} \text{с}^{-1}$  и соответственно  $k \sim 10^{-5} \text{см}^{-1}$ , поэтому в области пространства с размерами порядка атомных поле электромагнитной волны можно считать однородным<sup>7</sup>.

<sup>7</sup>Это приближение аналогично тому, которое применяется в классической теории поля при рассмотрении рассеяния монохроматической плоской электромагнитной волны системой нерелятивистски движущихся зарядов.



В плоской монохроматической волне  $\mathcal{H} = [\mathbf{n} \times \mathcal{E}]$ , и поскольку  $\mathcal{E} = -c^{-1}\dot{\mathbf{A}}$ , для магнитного поля имеем  $\mathcal{H} = c^{-1}[\dot{\mathbf{A}} \times \mathbf{n}]$ . Взаимодействие электромагнитного поля с собственными магнитными моментами электронов имеет порядок

$$\mu_0 \mathcal{H} \sim \mu_0 k A.$$

Отношение второго члена взаимодействия к первому имеет порядок  $ka \ll 1$ , поэтому последними двумя слагаемыми в гамильтониане (4.48) можно пренебречь при условии, что остающееся взаимодействие дает отличный от нуля вклад в первом порядке теории возмущений.