Глава 5

Приближени методи

5.2 Стационарна теория на пертурбациите: примери

Ефект на Зееман в слабо магнитно поле

Ефектът на Зееман представлява разцепването на спектралните линии в магнитно поле. Енергията на състояние с пълен ъглов момент J се разцепва на $2J+1$ компоненти (освен ако факторът на Ланде не е нула, виж по-долу).

Описание на системата

Разглеждаме квантова система от n частици, всяка с маса m, координата $\mathbf{r}_k$, импулс $\mathbf{p}_k$ и спин $\mathbf{s}_k$ (за простота ще считаме, че частиците са електрони), взаимодействаща с хомогенно магнитно поле с интензитет $\mathbf{H}$. Хамилтонианът на системата е

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_{k=1}^{n}\left[\hat{\mathbf{p}}_k - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_k)\right]^2 + \sum_{k=1}^{n}\hat{V}(\mathbf{r}_k) - \hat{\boldsymbol{\mu}}_s.\mathbf{H}, \tag{5.1}$$

където $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ е векторният потенциал на магнитното поле, дефиниран чрез $\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathrm{rot}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \equiv \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$, а

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = \sum_{k=1}^{n}\hat{\boldsymbol{\mu}}_{s,k} = \frac{\hbar e}{m_e c}\hat{\mathbf{S}}, \qquad \hat{\mathbf{S}} = \sum_{k=1}^{n}\hat{\mathbf{s}}_k \tag{5.2}$$

са съответно пълният магнитен момент и пълният спин на системата. Всяка частица взаимодейства с магнитното поле чрез своя магнитен момент μ_k, който е пропорционален на спина й,

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{s,k} = \frac{\hbar e}{m_e c}\hat{\mathbf{s}}_k = 2\mu_B\hat{\mathbf{s}}_k, \tag{5.3}$$

където μ_B е магнетонът на Бор-Прокопиу,

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e c} \approx 9.274\times 10^{-24}\mathrm{J/T}. \tag{5.4}$$

В случая на постоянно магнитно поле ($\mathbf{H} = \mathrm{const}$) векторният потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ е

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{H}\times\mathbf{r}. \tag{5.5}$$

Лесно се проверява, че

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \nabla \times (\tfrac{1}{2}\mathbf{H} \times \mathbf{r}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{H}(\nabla.\mathbf{r}) - \tfrac{1}{2}\nabla(\mathbf{H}.\mathbf{r}) = \mathbf{H}, \tag{5.6}$$

понеже $\nabla.\mathbf{r} = 3$ и $\frac{\partial}{\partial r_i} r_j = \delta_{ij}$, както и че изразът (5.5) удовлетворява Кулоновата калибровка:

$$\nabla.\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0. \tag{5.7}$$

Като отчетем, че в Кулоновата калибровка имаме $\hat{\mathbf{p}}.\mathbf{A}(\mathbf{r}) + \mathbf{A}(\mathbf{r}).\hat{\mathbf{p}} = 2\mathbf{A}(\mathbf{r}).\hat{\mathbf{p}}$ и като пренебрегнем члена пропорционален на $\mathbf{A}^2$, т.е. пропорционален на $\mathbf{H}^2$ (което отговаря на приближението за "слабо поле"), намираме

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\sum_{k=1}^{n}\left[\hat{\mathbf{p}}_k - 2\frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_k).\hat{\mathbf{p}}_k\right] + \sum_{k=1}^{n}\hat{V}(\mathbf{r}_k) - \hat{\boldsymbol{\mu}}_s.\mathbf{H}, \tag{5.8}$$

По-нататък намираме

$$\begin{aligned}\frac{e}{m_e c}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{A}(\mathbf{r}_k).\hat{\mathbf{p}}_k &= \frac{e}{2m_e c}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{H}\times\mathbf{r}_k.\hat{\mathbf{p}}_k = \frac{e}{2m_e c}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{H}.\mathbf{r}_k\times\hat{\mathbf{p}}_k \\ &= \frac{e\hbar}{2m_e c}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{H}.\hat{\mathbf{L}}_k = \mu_B\mathbf{H}.\hat{\mathbf{L}},\end{aligned} \tag{5.9}$$

където $\hbar\hat{\mathbf{L}}_k = \mathbf{r}_k \times \hat{\mathbf{p}}_k$ е орбиталният момент на k-тата частица и $\hat{\mathbf{L}} = \sum_{k=1}^{n}\hat{\mathbf{L}}_k$.

Тогава хамилтонианът може да се запише по следния начин:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mu_B\mathbf{H}.\hat{\mathbf{L}} - 2\mu_B\mathbf{H}.\hat{\mathbf{S}} = \hat{H}_0 - \mu_B\mathbf{H}.(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}), \tag{5.10}$$

където

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\sum_{k=1}^{n}\hat{\mathbf{p}}_k^2 + \sum_{k=1}^{n}\hat{V}(\mathbf{r}_k). \tag{5.11}$$

Предположението за *слабо поле* ни позволява да приложим стационарната теория на пертурбациите за хамилтониана (5.10), където пертурбацията е $-\mu_B\mathbf{H}.(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})$.

Пресмятане на отместването на енергиите с теория на пертурбациите

Разглеждаме члена

$$-\mu_B\mathbf{H}.(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) = -\mu_B\mathbf{H}.(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}})$$

като *пертурбация* към $\hat{H}_0$ и прилагаме стационарната теория на пертурбациите. Тук

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \tag{5.12}$$

е пълният ъглов момент на системата, който е сума от пълния орбитален момент $\hat{\mathbf{L}}$ и пълния спин $\hat{\mathbf{S}}$. От теорията на ъгловия момент и правилата за събиране на ъглови моменти знаем, че като набор от квантови числа можем да използваме големините на $\hat{\mathbf{J}}$, $\hat{\mathbf{L}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$, както и проекцията M на пълния момент $\hat{\mathbf{J}}$:

$$J;\ M;\ L;\ S, \tag{5.13}$$

понеже съответните оператори комутират.

За пертурбационната поправка към енергията в първи порядък имаме:

$$E^{(1)} = -\mu_B \mathbf{H}.\langle JMLS|(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}})|JMLS\rangle = -\mu_B \mathbf{H}.\langle \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}\rangle. \tag{5.14}$$

Ключовият момент тук е използването на свойството

$$\langle \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}\rangle = g\langle \hat{\mathbf{J}}\rangle, \tag{5.15}$$

което е следствие от теоремата на Вигнер-Екерт (виж учебника на Месиа за детайли). За простота приемаме, че магнитното поле е насочено по оста z: $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ (казано по друг начин, избираме оста z да е насочена по посока на магнитното поле $\mathbf{H}$). Отчитайки, че $\langle \hat{J}_z\rangle = \langle JMLS|\hat{J}_z|JMLS\rangle = M$, за поправката към енергията намираме:

$$E^{(1)} = -g\mu_B HM. \tag{5.16}$$

Следователно задачата се свежда до намирането на коефициента g.

Лесно се вижда, че свойството (5.15) води до съотношението

$$\langle(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}).\hat{\mathbf{J}}\rangle = g\langle \hat{\mathbf{J}}^2\rangle. \tag{5.17}$$

Наистина, от условието (5.15) получаваме:

$$\begin{aligned}
\langle(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}).\hat{\mathbf{J}}\rangle &= \sum_k \langle JMLS|(\hat{J}_k + \hat{S}_k)\hat{J}_k|JMLS\rangle \\
&= \sum_k \sum_{(JMLS)'} \langle JMLS|(\hat{J}_k + \hat{S}_k)|(JMLS)'\rangle\langle(JMLS)'|\hat{J}_k|JMLS\rangle \\
&= g\sum_k \sum_{(JMLS)'} \langle JMLS|\hat{J}_k|(JMLS)'\rangle\langle(JMLS)'|\hat{J}_k|JMLS\rangle \\
&= g\sum_k \langle JMLS|\hat{J}_k^2|JMLS\rangle = g\langle \hat{\mathbf{J}}^2\rangle,
\end{aligned} \tag{5.18}$$

където сме използвали условието за пълнота на базиса

$$\sum_{(JMLS)'} |(JMLS)'\rangle\langle(JMLS)'| = \hat{\mathbf{I}}. \tag{5.19}$$

Преобразуваме оператора от лявата страна на формула (5.17) по следния начин:

$$\begin{aligned}
(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}).\hat{\mathbf{J}} &= (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}).(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}) = \hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{S}}^2 + 3\hat{\mathbf{L}}.\hat{\mathbf{S}} \\
&= \hat{\mathbf{L}}^2 + 2\hat{\mathbf{S}}^2 + \tfrac{3}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) = \tfrac{3}{2}\hat{\mathbf{J}}^2 - \tfrac{1}{2}\hat{\mathbf{L}}^2 + \tfrac{1}{2}\hat{\mathbf{S}}^2.
\end{aligned} \tag{5.20}$$

От формула (5.17) получаваме веднага

$$g = \frac{3\langle \hat{\mathbf{J}}^2\rangle - \langle \hat{\mathbf{L}}^2\rangle + \langle \hat{\mathbf{S}}^2\rangle}{2\langle \hat{\mathbf{J}}^2\rangle} = \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \tag{5.21a}$$

Константата g се нарича *жиромагнитен фактор на Ланде*. Факторът на Ланде определя големината на Зеемановото разцепване на спектралните линии.

Частни случаи

Отбелязваме няколко важни частни случаи.

1. Исторически се е наложил терминът *нормален ефект на Зееман* за случая, когато
$$g = 1. \tag{5.22}$$
Тази стойност на g се получава например при нулев спин, $S = 0$, когато имаме $J = L$. Възможни са и случаи, когато факторът на Ланде има тази стойност за ненулев спин, например при $J = 2$, $L = 3$, $S = 2$ и др.

2. Под *аномален ефект на Зееман* се разбира общият случай, когато
$$g \neq 1. \tag{5.23}$$

3. Интересна ситуация възниква, когато факторът на Ланде е равен на нула,
$$g = 0, \tag{5.24}$$
понеже тогава прилагането на слабо магнитното поле не води до разцепване на спектралните линии! (Последните се разцепват обаче в силно поле.) Например, факторът на Ланде е нула при: ($J = \frac{1}{2}$, $L = 2$, $S = \frac{3}{2}$), ($J = 1$, $L = 3$, $S = 2$), ($J = \frac{3}{2}$, $L = 4$, $S = \frac{5}{2}$) и др.