вектор $\mathbf{r}$ с гамильтонианом. Простое вычисление приводит к результату

$$m\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \tag{111,10}$$

в точности аналогичному классическому. Для операторов компонент скорости имеют место правила коммутации

$$\begin{aligned} \{\hat{v}_x, \hat{v}_y\} &= i\frac{e\hbar}{m^2c}H_z, \qquad \{\hat{v}_y, \hat{v}_z\} = i\frac{e\hbar}{m^2c}H_x, \\ \{\hat{v}_z, \hat{v}_x\} &= i\frac{e\hbar}{m^2c}H_y, \end{aligned} \tag{111,11}$$

которые легко проверить непосредственным вычислением. Мы видим, что в магнитном поле операторы трех компонент скорости частицы (заряженной) оказываются некоммутативными. Это значит, что частица не может иметь одновременно определенных значений скорости по всем трем направлениям.

При движении в магнитном поле симметрия по отношению к обращению времени имеет место лишь при условии изменения знака поля $\mathbf{H}$ (и векторного потенциала $\mathbf{A}$). Это значит (см. § 18 и 60), что уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ должно сохранить свой вид при переходе к комплексно сопряженным величинам и изменении знака $\mathbf{H}$. Для всех членов в гамильтониане (111,4), за исключением члена $-\hat{\mathbf{s}}\mathbf{H}$, это непосредственно очевидно. Член же $-\hat{\mathbf{s}}\mathbf{H}\psi$ в уравнении Шредингера переходит при указанном преобразовании в $\hat{\mathbf{s}}^*\mathbf{H}\psi^*$, и на первый взгляд нарушает требуемую инвариантность, поскольку оператор $\hat{\mathbf{s}}^*$ не совпадает с $-\hat{\mathbf{s}}$.

Следует, однако, учесть, что волновая функция есть в действительности контрвариантный спинор $\psi^{\lambda\mu\ldots}$, который при комплексном сопряжении переходит в ковариантный $\psi^{\lambda\mu\ldots *}$ (см. § 60). Контравариантным же является спинор $\psi^*_{\lambda\mu\ldots}$. Находя с помощью определений (57,4), (57,5) компоненты $(\hat{\mathbf{s}}\mathbf{H}\psi)^*$ и выражая их через $\psi^*_{\lambda\mu\ldots}$, убеждаемся в том, что операция обращения времени приводит к уравнению Шредингера для компонент $\psi^*_{\lambda\mu\ldots}$ того же вида, который имело исходное уравнение для компонент $\psi^{\lambda\mu\ldots}$.

## § 112. Движение в однородном магнитном поле

Определим уровни энергии частицы в постоянном однородном магнитном поле (*Л. Д. Ландау*, 1930).

Векторный потенциал однородного поля удобно выбрать здесь не в виде (111,7), а в следующей форме:

$$A_x = -Hy, \qquad A_y = A_z = 0 \tag{112,1}$$

(ось $z$ выбрана в направлении поля). Тогда гамильтониан приобретает вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \frac{\mu}{s}\hat{s}_z H. \tag{112,2}$$

Прежде всего замечаем, что оператор $\hat{s}_z$ коммутативен с гамильтонианом (поскольку последний не содержит операторов других компонент спина). Это значит, что $z$-проекция спина сохраняется и потому $\hat{s}_z$ можно заменить собственным значением $s_z = \sigma$. После этого спиновая зависимость волновой функции становится несущественной и $\psi$ в уравнении Шредингера можно понимать как обычную координатную функцию. Для этой функции имеем уравнение

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right]\psi - \frac{\mu}{s}\sigma H\psi = E\psi. \tag{112,3}$$

Гамильтониан этого уравнения не содержит явно координат $x$ и $z$. Поэтому с ним коммутативны также и операторы $\hat{p}_x$ и $\hat{p}_z$ (дифференцирования по $x$ и $z$), т. е. $x$- и $z$-компоненты обобщенного импульса сохраняются. Соответственно этому ищем $\psi$ в виде

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}\chi(y). \tag{112,4}$$

Собственные значения $p_x$ и $p_z$ пробегают все значения от $-\infty$ до $\infty$. Поскольку $A_z = 0$, то $z$-компонента обобщенного импульса совпадает с компонентой обычного импульса $mv_z$. Таким образом, скорость частицы в направлении поля может иметь произвольное значение; можно сказать, что движение вдоль поля «не квантуется».

Подставив (112,4) в (112,3), получим следующее уравнение для функции $\chi(y)$:

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2}\left[\left(E + \frac{\mu\sigma}{s}H - \frac{p_z^2}{2m}\right) - \frac{m}{2}\omega_H^2(y - y_0)^2\right]\chi = 0, \tag{112,5}$$

где введены обозначения $y_0 = -cp_x/eH$ и

$$\omega_H = \frac{|e|H}{mc}. \tag{112,6}$$

Уравнение (112,5) по форме совпадает с уравнением Шредингера (23,6) для линейного осциллятора, колеблющегося с частотой $\omega_H$. Поэтому мы можем сразу заключить, что выражение в круглых скобках в (112,5), играющее роль энергии осциллятора, может принимать значения $(n + 1/2)\hbar\omega_H$, где $n = 0, 1, 2, \ldots$

Таким образом, получаем следующее выражение для уровней энергии частицы в однородном магнитном поле:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_H + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{\mu\sigma}{s} H. \qquad (112,7)$$

Первый член в этом выражении дает дискретные значения энергии, отвечающие движению в плоскости, перпендикулярной к полю; их называют *уровнями Ландау*. Для электрона $\mu/s = -|e|\hbar/mc$, и формула (112,7) принимает вид

$$E = \left(n + \frac{1}{2} + \sigma\right)\hbar\omega_H + \frac{p_z^2}{2m}. \qquad (112,8)$$

Собственные функции $\chi_n(y)$, отвечающие уровням энергии (112,7), даются формулой (23,12) с соответствующим изменением обозначений

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} a_H^{1/2} \sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{2a_H^2}\right) H_n\left(\frac{y-y_0}{a_H}\right), \qquad (112,9)$$

где $a_H = \sqrt{\hbar/m\omega_H}$.

В классической механике движение частиц в плоскости, перпендикулярной к полю $\mathbf{H}$ (плоскость $xy$), происходит по окружности с неподвижным центром. Сохраняющаяся в квантовом случае величина $y_0$ соответствует классической $y$-координате центра окружности. Наряду с ней сохраняется также величина $x_0 = (cp_y/eH) + x$ (легко убедиться в том, что ее оператор коммутативен с гамильтонианом (112,2)). Эта величина соответствует классической $x$-координате центра окружности [1]). Однако операторы $\hat{x}_0$ и $\hat{y}_0$ не коммутативны друг с другом, так что координаты $x_0$ и $y_0$ не могут иметь одновременно определенных значений.

Поскольку (112,7) не содержит величины $p_x$, пробегающей непрерывный ряд значений, уровни энергии вырождены с непрерывной кратностью. Кратность вырождения, однако, становится конечной, если движение в плоскости $xy$ ограничено большой, но конечной площадью $S = L_x L_y$. Число различных (теперь дискретных) значений $p_x$ в интервале $\Delta p_x$ равно $(L_x/2\pi\hbar)\,\Delta p_x$. Допустимы все значения $p_x$, для которых центр орбиты находится внутри $S$ (мы пренебрегаем радиусом орбиты по сравнению с большим $L_y$). Из условий $0 < y_0 < L_y$ имеем $\Delta p_x = eHL_y/c$.

---

[1]) Действительно, для классического движения по окружности радиуса $cmv_t/eH$ ($v_t$ — проекция скорости на плоскость $xy$; см. II, § 21) имеем

$$y_0 = -cp_x/eH = -(cm/eH)\,v_x + y.$$

Из этого выражения очевидно, что $y_0$ есть координата центра окружности. Другой координатой будет

$$x_0 = (cm/eH)\,v_y + x = cp_y/eH + x.$$

Следовательно, число состояний (для заданных $n$ и $p_z$) есть $eHS/2\pi\hbar c$. Если область движения ограничена также и вдоль оси $z$ (длиной $L_z$), то число возможных значений $p_z$ в интервале $\Delta p_z$ есть $(L_z/2\pi\hbar)\,\Delta p_z$ и число состояний в этом интервале есть

$$\frac{eHS}{2\pi\hbar c}\frac{L_z}{2\pi\hbar}\Delta p_z = \frac{eHV}{4\pi^2\hbar^2 c}\Delta p_z. \qquad (112,10)$$

Для электрона имеет место еще дополнительное вырождение: уровни энергии (112,8) совпадают для состояний с квантовыми числами $n$, $\sigma = 1/2$ и $n+1$, $\sigma = -1/2$.

### Задачи

1. Найти волновые функции электрона в однородном магнитном поле в состояниях, в которых он обладает определенными значениями импульса и момента вдоль направления поля.

Решение. В цилиндрических координатах $\rho$, $\varphi$, $z$ с осью $z$ вдоль направления поля векторный потенциал в калибровке (111,7) имеет компоненты $A_\varphi = H\rho/2$, $A_z = A_\rho = 0$ и уравнение Шредингера [1])

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right)+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]-\frac{i\hbar\omega_H}{2}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}+\frac{M\omega_H^2}{8}\rho^2\psi=E\psi. \qquad (1)$$

Ищем решение в виде

$$\psi = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}e^{ip_z z/\hbar}R(\rho)$$

и для радиальной функции получаем уравнение

$$\frac{\hbar^2}{2M}\left(R''+\frac{1}{\rho}R'-\frac{m^2}{\rho^2}R\right)+\left[E-\frac{p_z^2}{2M}-\frac{M\omega_H^2}{8}\rho^2-\frac{\hbar\omega_H m}{2}\right]R=0.$$

Введя новую независимую переменную $\xi = (M\omega_H/2\hbar)\,\rho^2$, переписываем это уравнение в виде

$$\xi R''+R'+\left(-\frac{\xi}{4}+\beta-\frac{m^2}{4\xi}\right)R=0, \qquad \beta=\frac{1}{\hbar\omega_H}\left(E-\frac{p_z^2}{2M}\right)-\frac{m}{2}.$$

При $\xi\to\infty$ искомая функция ведет себя как $e^{-\xi/2}$, а при $\xi\to 0$ как $\xi^{|m|/2}$. Соответственно этому, ищем решение в виде

$$R(\xi)=e^{-\xi/2}\xi^{|m|/2}w(\xi)$$

и для $w(\xi)$ получаем уравнение вырожденной гипергеометрической функции:

$$w=F\left\{-\left(\beta-\frac{|m|+1}{2}\right),\quad |m|+1,\quad \xi\right\}.$$

---

[1]) Заряд электрона пишем как $e=-|e|$, а его массу обозначаем здесь посредством $M$ в отличие от момента $m$. Не существенный для этой задачи член со спином частицы опускаем.

Для того чтобы волновая функция была везде конечной, $\beta - (|m|+1)/2$ должна быть целым неотрицательным числом $n_\rho$. При этом уровни энергии даются формулой

$$E = \hbar\omega_H\left(n_\rho + \frac{|m|+m+1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2M},$$

эквивалентной формуле (112,7). Соответствующие этим уровням радиальные волновые функции

$$R_{n_\rho m}(\rho) = \frac{1}{a_H^{1+|m|}}\left[\frac{(|m|+n_\rho)!}{2^{|m|}n_\rho!\,|m|!^2}\right]^{1/2}\exp\left(-\frac{\rho^2}{4a_H^2}\right)\rho^{|m|}F\left(-n_\rho, |m|+1, \frac{\rho^2}{2a_H^2}\right), \quad (2)$$

где $a_H = \sqrt{\hbar/M\omega_H}$; функции нормированы условием $\int\limits_0^\infty R^2\rho\, d\rho = 1$. Гипергеометрическая функция здесь есть обобщенный полином Лагерра.

2. Определить нижний уровень энергии, отвечающий связанному состоянию электрона в потенциальной яме $U(r)$ малой глубины ($|U| \ll \hbar^2/ma^2$, $a$ — радиус действия сил в яме), на которую наложено также и однородное магнитное поле (*Ю. А. Бычков*, 1960).

Решение. Поставленное для поля $U(r)$ условие обеспечивает (в отсутствие магнитного поля) применимость к нему теории возмущений; при этом связанные состояния в яме отсутствуют (§ 45). При наличии также и магнитного поля поле $U(r)$ можно рассматривать как возмущение лишь для движения в поперечной к **H** плоскости, характер (дискретный) энергетического спектра которого при наложении $U$ не меняется. Характер же движения в направлении **H** меняется — оно становится (как будет видно) из инфинитного финитным, т. е. спектр — из непрерывного дискретным; поэтому для этого движения поле ямы не может рассматриваться по теории возмущений.

Соответственно этому, при разделении переменных в уравнении Шредингера (уравнение (1) предыдущей задачи, дополненное членом $U\psi$ в левой стороне) радиальные функции $R(\rho)$ берем в прежнем виде (2); низшему уровню отвечают значения квантовых чисел $n_\rho = m = 0$. Подставив в уравнение Шредингера $\psi = R_{00}(\rho)\chi(z)$, умножив затем уравнение на $R_{00}(\rho)$ и проинтегрировав его по $\rho\, d\rho$, получим для $\chi(z)$ уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi'' + \bar{U}(z)\chi = \varepsilon\chi, \quad (3)$$

где $\varepsilon = E - \hbar\omega_H/2$,

$$\bar{U}(z) = \int\limits_0^\infty U\left(\sqrt{z^2+\rho^2}\right)R_{00}^2(\rho)\,\rho\, d\rho$$

(а $m$ — снова масса частицы). Это уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера для одномерного движения в потенциальной яме $\bar{U}(z)$, причем $\varepsilon$ — энергия этого движения. Поэтому можно просто воспользоваться результатом задачи 1 к § 45, согласно которому дискретный уровень энергии

$$\varepsilon = -\frac{m}{2\hbar^2}\left[\int\limits_{-\infty}^{\infty}\bar{U}(z)\,dz\right]^2 = -\frac{m}{2\hbar^2}\left[\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_0^\infty U\left(\sqrt{z^2+\rho^2}\right)R_{00}^2(\rho)\,\rho\, d\rho\, dz\right]^2. \quad (4)$$

Волновая функция $R_{00}(\rho)$ затухает на расстояниях $\rho \sim a_H$. Если магнитное поле настолько слабо, что $a_H \gg a$, то интеграл по $d\rho$ определяется областью $\rho \lesssim a$, в которой можно положить $R_{00}(\rho) \approx R_{00}(0) = 1/a_H$. Тогда

$$\varepsilon = -\frac{me^2H^2}{8\pi^2\hbar^4c^2}\left(\int U(r)\,dV\right)^2 \tag{5}$$

($dV = 2\pi\rho\,d\rho\,dz \to 4\pi r^2\,dr$). В обратном случае сильного магнитного поля, когда $a_H \ll a$, интеграл в (4) определяется областью $\rho \lesssim a_H$, в которой можно положить $U\left(\sqrt{\rho^2+z^2}\right) \approx U(z)$. Тогда интеграл по $d\rho$ сводится к нормировочному интегралу функции $R_{00}$ и обращается в 1, так что

$$\varepsilon = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(\int_0^\infty U(z)\,dz\right)^2. \tag{6}$$

В обоих случаях оценка интегралов показывает, что $\varepsilon \ll \hbar\omega_H$.

3. Определить уровни энергии атома водорода в магнитном поле настолько сильном, что $a_H \ll a_B$, где $a_B$ — боровский радиус (*R. J. Elliott, R. Loudon*, 1960).

Решение. При поставленном условии, $\hbar\omega_H \gg me^4/\hbar^2$, влияние кулонова поля ядра на движение электрона в поперечной к **H** плоскости можно рассматривать как малое возмущение. Мы возвращаемся поэтому к рассмотренной в задаче 2 ситуации, и можно применить уравнение (3), причем

$$\overline{U}(z) = -e^2\int_0^\infty \frac{R_{00}^2(\rho)\,\rho}{\sqrt{\rho^2+z^2}}\,d\rho. \tag{7}$$

Написав в этом выражении радиальную функцию $R_{00}$, мы ограничиваемся ниже уровнями энергии продольного движения, относящимися к нулевому уровню Ландау $(\hbar\omega_H/2)$ поперечного движения.

Волновая функция основного состояния, $\chi_0(z)$, простирается на расстояния $|z| \lesssim a_B$, медленно меняясь на их протяжении (не имея нулей, она не обращается в нуль при $z=0$). Поэтому для основного уровня выполняются условия, использованные в решении задачи 1 § 45, и можно воспользоваться основанной на этом решении формулой (6). При этом логарифмически расходящийся интеграл «обрезается» сверху на расстояниях $|z| \sim a_B$, а внизу — на расстояниях $|z| \sim a_H$ (где $|z| \sim \rho$ и замена $\sqrt{\rho^2+z^2}$ на $|z|$ в (7) не допустима). В результате находим

$$\varepsilon_0 = -\frac{2me^4}{\hbar^2}\ln^2\frac{a_B}{a_H} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\ln^2\frac{\hbar^3H}{m^2c\,|e|^3}. \tag{8}$$

Эта формула имеет, как говорят, логарифмическую точность: предполагается, что не только само отношение $a_B/a_H$, но и его логарифм велики; при этом числовой множитель в аргументе логарифма остается неопределенным.

Возбужденные состояния дискретного спектра получаются как решения уравнения Шредингера (3) с полем $\overline{U}(z) \approx -e^2/z$ (получающимся из (7) при $z \sim a_B \gg \rho$). Но это уравнение подстановкой $\chi = z\varphi(z)$ приводится к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{z^2}\frac{d}{dz}\left(z^2\frac{d\varphi}{dz}\right) - \frac{e^2}{z}\varphi = \varepsilon\varphi, \tag{9}$$

совпадающему по форме с уравнением для радиальных волновых функций $s$-состояний в трехмерной кулоновой задаче. Поэтому искомые уровни даются формулой (36,10)

$$\varepsilon_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}, \tag{10}$$

причем $n = 1, 2, 3 \ldots$ Это выражение тоже имеет лишь логарифмическую точность — следующий поправочный член был бы мал по сравнению с основным лишь в отношении $1/\ln(a_B/a_H)$.

Уравнение (9) определяет волновую функцию лишь при $z > 0$; она может быть продолжена в область $z < 0$ как $\chi(-z) = \chi(z)$ или $\chi(-z) = -\chi(z)$. Соответственно этому, в рассмотренном приближении уровни (10) двукратно вырождены. Это вырождение, однако, снимается в высших приближениях по $a_H/a_B$.

## § 113. Атом в магнитном поле

Рассмотрим атом, находящийся в однородном магнитном поле $\mathbf{H}$. Его гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_a \left[\hat{\mathbf{p}}_a + \frac{|e|}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)\right]^2 + U + \frac{|e|\hbar}{mc}\mathbf{H}\hat{\mathbf{S}}, \tag{113,1}$$

де суммирование производится по всем электронам (заряд электрона написан как $-|e|$); $U$ — энергия взаимодействия электронов с ядром и друг с другом; $\hat{\mathbf{S}} = \sum \hat{\mathbf{s}}_a$ — оператор полного (электронного) спина атома.

Если векторный потенциал поля выбран в виде (111,7), то как уже было отмечено, оператор $\hat{\mathbf{p}}$ коммутативен с $\mathbf{A}$. Учитывая, это обстоятельство при раскрытии квадрата в (113,1) и обозначив посредством $\hat{H}_0$ гамильтониан атома в отсутствие поля, находим

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|}{mc}\sum_a \mathbf{A}_a\hat{\mathbf{p}}_a + \frac{e^2}{2mc^2}\sum_a \mathbf{A}_a^2 + \frac{|e|\hbar}{mc}\mathbf{H}\hat{\mathbf{S}}.$$

Подставив сюда $\mathbf{A}$ из (111,7), получим

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|}{2mc}\mathbf{H}\sum_a [\mathbf{r}_a\hat{\mathbf{p}}_a] + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_a [\mathbf{H}\mathbf{r}_a]^2 + \frac{|e|\hbar}{mc}\mathbf{H}\hat{\mathbf{S}}.$$

Но векторное произведение $[\mathbf{r}_a\hat{\mathbf{p}}_a]$ есть оператор орбитального момента электрона, а суммирование по всем электронам дает оператор $\hbar\hat{\mathbf{L}}$ полного орбитального момента атома. Таким образом,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})\mathbf{H} + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_a [\mathbf{H}\mathbf{r}_a]^2 \tag{113,2}$$

($\mu_B$ — магнетон Бора). Оператор

$$\hat{\mu}_{\text{ат}} = -\mu_B(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \tag{113,3}$$