

### 3.17. Электрон во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана.

#### 3.17.1. Электрон в магнитном поле

В классической электродинамике при рассмотрении движения частицы с зарядом  $e$  во внешнем электромагнитном поле, характеризуемом векторным потенциалом  $\vec{A}(\vec{r}, t)$ , импульс частицы  $\vec{p}$  заменяется выражением  $\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)$ . Классическая функция Гамильтона тогда имеет вид:

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + U \quad (3.17.1)$$

Здесь  $c$  – скорость света,  $m_0$  – масса электрона (индекс 0 приведен, чтобы в дальнейшем не путать массу с проекцией орбитального квантового числа  $m$ ),  $U$  – потенциальная энергия электрона во внешнем поле. Вспомним, что магнитное поле получаем из уравнения

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A} \quad (3.17.2)$$

В квантовой механике вместо векторов записываются соответствующие операторы:

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \Rightarrow \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\hat{A}\right) \quad (3.17.3)$$

Оператор полной энергии – оператор Гамильтона – можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_0} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 + U = \\ &= \frac{1}{2m_0} \left[ \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}A_x\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}A_y\right)^2 + \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c}A_z\right)^2 \right] + U \end{aligned} \quad (3.17.4)$$

Преобразуем гамильтониан. Запишем действие оператора кинетической энергии на волновую функцию

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 \psi = -\hbar^2\nabla^2\psi + i\hbar\frac{e}{c}(\text{div}\vec{A})\psi + 2i\hbar\frac{e}{c}\vec{A} \cdot \nabla\psi + \frac{e^2}{c^2}A^2\psi \quad (3.17.5)$$

Будем использовать калибровку Лоренца (в стационарном случае)

$$\text{div}\vec{A} = 0,$$

а также тот факт, что последнее слагаемое в (3.17.5)  $\frac{e^2}{c^2}A^2\psi$  вносит малый вклад в энергию. В самом деле,

это слагаемое дает небольшой вклад по малому параметру  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ . Тогда получаем следующее уравнение Шредингера:

$$\nabla^2\psi - i\frac{2e}{\hbar c}\vec{A}\nabla\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \quad (3.17.6)$$

Итак, при движении частицы в магнитном поле в уравнении Шредингера появляется дополнительное слагаемое, связанное с векторным потенциалом этого поля.

#### 3.17.2. Простой эффект Зеемана.

Рассмотрим поведение атомарного электрона в постоянном однородном магнитном поле. Напомним следующие моменты, рассмотренные в курсе выше. В кулоновском поле в нерелятивистском приближении энергетические уровни вырождены, т.е. энергия зависит только от главного квантового числа  $n$ . В центрально-симметричном поле, но отличном от кулоновского (как электрон приближенно рассматривается в многоэлектронном атоме), снимается вырождение по орбитальному квантовому числу, и энергия электрона зависит от  $n$  и  $l$ . Наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к тонкой структуре спектральных линий, так что энергия зависит от полного момента импульса  $J$  (или  $j$ ). В отсутствие внешних полей все направления в пространстве эквивалентны, поэтому энергия уровней не зависит от магнитного квантового числа  $m$ . При этом кратность вырождения составляет  $2J+1$  значений.

Однако при включении магнитного поля получаем это вырождение снимается, поскольку состояния с различными проекциями магнитного момента имеют различные энергии во внешнем магнитном поле. Это расщепление приводит к усложнению структуры спектральных линий, что и составляет суть *эффекта Зеемана*.

На первом этапе рассмотрения забудем о спине электрона. На практике это означает, что рассматриваем состояние атома со спином равным 0:  $S = 0$ . Выберем направление однородного магнитного поля по оси  $z$ :

$$B = B_z, \quad B_x = B_y = 0 \quad (3.17.7)$$

Тогда векторный потенциал, описывающий такое магнитное поле в калибровке Лоренца, имеет следующие векторные компоненты (см Главу 3 Электромагнетизма, §3.7):

$$A_x = -\frac{1}{2}By, \quad A_y = \frac{1}{2}Bx, \quad A_z = 0 \quad (3.17.8)$$

И магнитное поле записывается как

$$B_z = (\text{rot}\vec{A})_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = B \quad (3.17.9)$$

Вычислим следующее слагаемое, входящее в уравнение:

$$\vec{A}\nabla\psi = A_x \frac{\partial}{\partial x}\psi + A_y \frac{\partial}{\partial y}\psi + A_z \frac{\partial}{\partial z}\psi = \frac{1}{2}B \left( x \frac{\partial\psi}{\partial y} - y \frac{\partial\psi}{\partial x} \right) = \frac{1}{2}B \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \quad (3.17.10)$$

где  $\varphi$  – азимутальный угол в сферической системе координат, определяющий поворот вокруг оси  $z$ . Магнитное поле направлено вдоль оси  $z$ , при этом, очевидно, что в задаче выполняется аксиальная (осевая) симметрия. Тогда полная волновая функция может быть представлена в виде

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_l(\theta)\Phi_m(\varphi) = R_{nl}(r)\Theta_l(\theta)e^{im\varphi} \quad (3.17.11)$$

Здесь, как и ранее, ввели магнитное квантовое число  $m$ , характеризующее проекцию момента импульса на ось  $z$ . При этом имеем

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = imR_{nl}(r)\Theta_l(\theta)e^{im\varphi} = im\psi \quad (3.17.12)$$

Тогда подставим функцию (3.17.11) в уравнение Шредингера (3.17.6) и, учитывая (3.17.12), получаем

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left( E_0 + m \frac{eB\hbar}{2m_0c} - U \right) \psi = 0 \quad (3.17.13)$$

Вводя полную энергию электрона

$$E = E_0 + m \frac{e\hbar}{2m_0c} B \quad (3.17.14)$$

где  $E_0$  – энергия в отсутствие магнитного поля, получаем такое же уравнение Шредингера, как без магнитного поля. Изменилось лишь собственное значение энергии, которое теперь зависит от величины магнитного поля и квантового числа  $m$ :

$$E_n = E_{0n} + m \frac{e\hbar}{2m_0c} B = E_{0n} + \hbar m \Omega_{\text{ларм}} = E_{0n} + m M_B B$$

где  $M_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$  – магнетон Бора,  $\Omega_{\text{ларм}} = \frac{eB}{2m_0c}$  – Ларморовская частота прецессии.

Итак, получаем, что уровни с  $l \neq 0$  расщепляются на  $(2l + 1)$  компоненту. На рис. 17.1 показано расщепление  $np$  ( $l = 1$ ) и  $nd$  ( $l = 2$ ) уровней на 3 и 5 компонент, соответственно. Рассмотрим переходы, разрешенные правилами отбора для орбитального квантового числа  $\Delta l = \pm 1$ . В отсутствие магнитного поля имеем переходы с уровня  $np$  на уровень  $ns$  (левая часть рис. 17.1) и с уровня  $nd$  на уровень  $np$  (правая часть рис. 17.1). Обозначим частоту излученного кванта при  $B = 0$  через  $\omega_0$ .

Вспомогая правила отбора оптических переходов для магнитного квантового числа  $\Delta m = 0, \pm 1$ ,

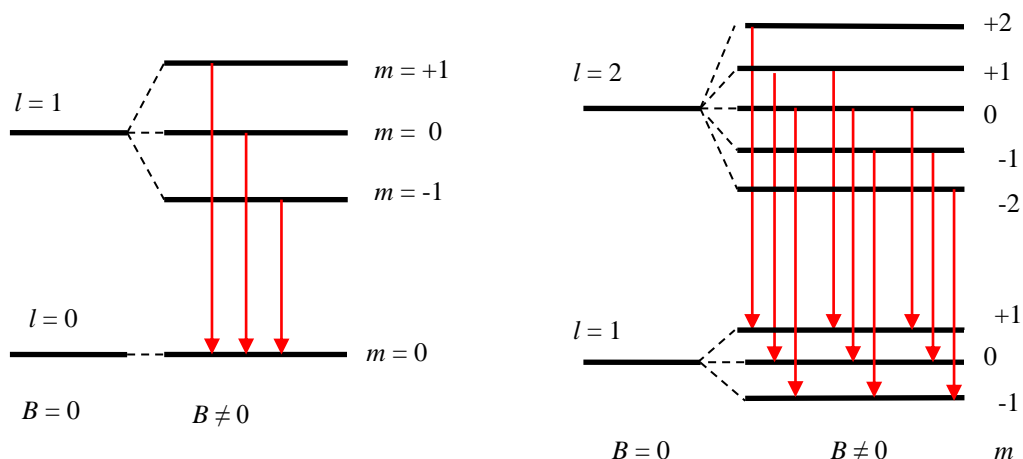


Рис. 17.1.

получаем, что при включении внешнего магнитного поля каждая спектральная линия с частотой  $\omega_0$  расщепляется на три линии излучения с энергиями:

$$\hbar\omega = \hbar\left(\omega_0 - \frac{e\hbar B}{2m_0c}\right), \quad \hbar\omega_0, \quad \hbar\left(\omega_0 + \frac{e\hbar B}{2m_0c}\right) \quad (3.17.15)$$

Хотя число возможных переходов с уровня  $nd$  велико (т.е. больше 3-х), тем не менее, получаем только 3 различные энергии излученного кванта.

Таким образом, при включении магнитного поля вместо одной спектральной линии получаем *простой триплет – Лоренцевский триплет*:

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 - \hbar\Delta m\Omega_{\text{ларм}},$$

Напомним, что и в классической физике (электродинамике) мы также получали 3 частоты:

$$\omega = \omega_0, \quad \omega_0 \pm \Omega_{\text{ларм}}$$

за счет Ларморовской прецессии. Это так называемый *простой* или *нормальный эффект Зеемана*.

На эксперименте простой эффект Зеемана реализуется, когда спин распадающегося состояния равен нулю  $S = 0$ .

### 3.17.3. Сложный эффект Зеемана.

Однако на эксперименте вместо триплета чаще всего появляется четное число расщепленных линий излучения атома в магнитном поле. Все дело в том, что необходимо учитывать спин и спин-орбитальное взаимодействие, т.е. учитывать полный момент импульса. Рассмотрим атом в рамках нормальной связи, когда состояние характеризуется орбитальным  $\vec{L}$ , спиновым  $\vec{S}$  и полным  $\vec{J}$  моментами импульса:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Механическим моментам импульса  $\vec{L}$  и  $\vec{S}$  электрона соответствуют орбитальный и спиновый магнитные моменты. Орбитальный магнитный момент и его проекция определяются следующими соотношениями:

$$\vec{M}_L = -\frac{e}{2m_0c}\vec{L} = -g_L\vec{L},$$

$$M_L = -\frac{e}{2m_0c}L_L = -\frac{e\hbar}{2m_0c}\sqrt{L(L+1)},$$

$$M_{Lz} = -\frac{e}{2m_0c}L_z = -\frac{e}{2m_0c}m\hbar.$$

Спиновый магнитный момент и его проекция определяются соответствующим образом:

$$\vec{M}_S = -\frac{e}{m_0 c} \vec{S} = -g_S \vec{S}$$

$$M_S = -\frac{e}{m_0 c} L_S = -\frac{e\hbar}{m_0 c} \sqrt{S(S+1)},$$

$$M_{S_z} = -\frac{e}{m_0 c} L_{S_z} = -\frac{e}{m_0 c} m_s \hbar = -\frac{e\hbar}{m_0 c} \cdot \left(\pm \frac{1}{2}\right) = \mp M_B$$

Здесь мы ввели гиромагнитные отношения для орбитального и спинового моментов  $g_L$  и  $g_S$ .

Если измерять механический момент электрона в единицах  $\hbar$ , а магнитный момент в единицах магнетона Бора

$$M_B = -\frac{e\hbar}{2m_0 c}, \text{ то в этих единицах:}$$

$$g_L = 1, \quad g_S = 2$$

То, что  $g_L$  и  $g_S$  разные, обеспечивает сложную связь полного механического момента импульса и полного магнитного момента, т.е. определяют сложный характер эффекта Зеемана. Вектор полного магнитного момента  $\vec{M}_J$  становится не параллельным полному механическому моменту  $\vec{J}$  (Рис. 17.2).

$$\vec{M}_J = -g_L \vec{L} - g_S \vec{S}$$

Можно найти проекцию магнитного момента на направление полного момента  $\vec{J}$ , сосчитав скалярное произведение:

$$(\vec{M}_J, \vec{J}) = M_{J\parallel} J$$

$$M_{J\parallel} = -gJ$$

где  $g$  – *множитель Ланде*

$$g = \frac{g_L + g_S}{2} + \frac{g_S - g_L}{2} \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Поскольку перпендикулярная составляющая полного магнитного момента не определена, она совершает прецессию вокруг направления  $\vec{J}$ . При достаточно медленных процессах от нее можно отвлечься и считать, что полный магнитный момент сводится только к его продольной проекции  $M_J \approx M_{J\parallel}$

Тогда энергия уровня в магнитном поле расщепляется согласно (в обычных единицах):

$$E = E_0 - (\vec{M}_J, \vec{B}) = E_0 + g m_J \Omega \hbar = E_0 + g m_J M_B B$$

Это расщепление уровней приводит к *сложному эффекту Зеемана*.

В качестве примера рассмотрим переходы в щелочных металлах: с дублетного уровня  $n^2 p_{1/2}$ ,  $n^2 p_{3/2}$  на синглетный уровень  $n^2 s_{1/2}$ . Для определения спектральных линий рассчитаем множитель Ланде для этих уровней.

Для $n^2 p_{3/2}$ :	имеем	$L=l=1, S=s=1/2, J=j=3/2$	и получаем	$g=4/3,$
для $n^2 p_{1/2}$ :	–	$L=1, S=1/2, J=1/2$	–	$g=2/3,$
для $n^2 s_{1/2}$ :	–	$L=0, S=1/2, J=1/2$	–	$g=2$

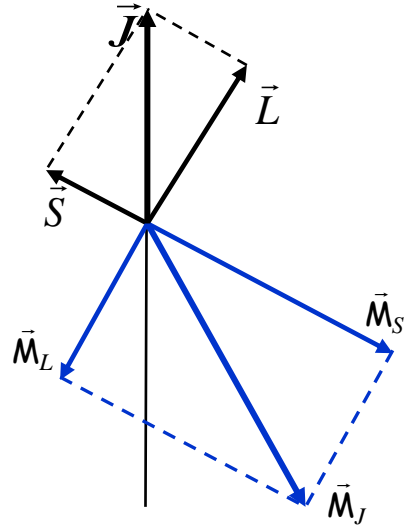


Рис. 17.2.

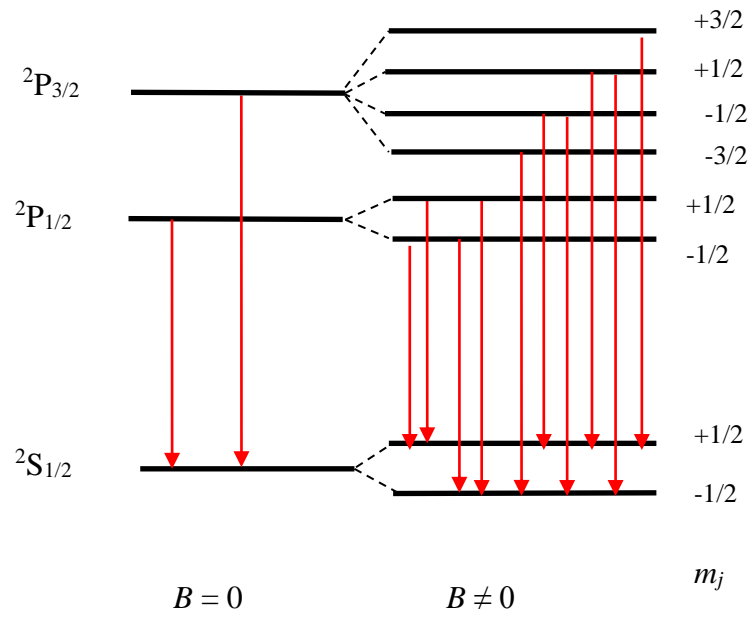


Рис. 17.3.