УДК 539.196

О ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ СИСТЕМЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

К. Н. Богатырев, В. П. Макаров

Показано, что система частиц с равным нулю полным зарядом в однородном магнитном поле имеет интеграл движения, аналогичный полному импульсу в отсутствие поля. Получена зависимость волновой функции системы от координат ее центра масс.

Гамильтониан системы N частиц с массами m_a и зарядами e_a, $(a = 1, 2, ..., N)$,

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\Sigma_a \frac{1}{m_a}\left[\hat{\mathbf{P}}_a - \frac{e_a}{c}\mathbf{A}_a(\mathbf{R}_a)\right]^2 + U(\{\mathbf{R}\}), \tag{1}$$

где $\hat{\mathbf{P}}_a = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{R}_a$ – оператор импульса частицы; $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ – векторный потенциал магнитного поля $\mathbf{H}$, который (полагая, что поле однородное) мы выберем в виде $\mathbf{A} = (1/2)\mathbf{H}\times\mathbf{R}$; U – потенциальная энергия частиц, $\{\mathbf{R}\}$ – совокупность всех координат $\mathbf{R}_a$, c – скорость света (см., например, [1], §§111,112)[1].

Скорость $\hat{\mathbf{V}}_c = \hat{\dot{\mathbf{R}}}_c$ и ускорение $\hat{\dot{\mathbf{V}}}_c$ центра масс и изменение полного импульса $\hat{\mathbf{P}} = \Sigma_a\hat{\mathbf{P}}_a$ системы определяются следующими равенствами:

$$\hat{\mathbf{V}}_c = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{m_t}\Sigma_a m_a[\hat{H}, \mathbf{R}_a] = \frac{1}{m_t}\left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{1}{2c}\mathbf{H}\times\mathbf{D}\right),$$

$$\hat{\dot{\mathbf{V}}}_c = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{V}}_c] = -\frac{1}{m_t c}\mathbf{H}\times\hat{\dot{\mathbf{D}}},\ \hat{\dot{\mathbf{P}}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{P}}] = -\frac{1}{2c}\mathbf{H}\times\hat{\dot{\mathbf{D}}}, \tag{2}$$

где $\mathbf{D} = \Sigma_a e_a\mathbf{R}_a$ – дипольный электрический момент и $m_t = \Sigma_a m_a$ – полная масса системы. Из (2) видно, что ни $\hat{\mathbf{V}}_c$, ни $\hat{\mathbf{P}}$ не являются интегралами движения, а интеграл движения (мы обозначим его через $\mathbf{Q}$) – их линейная комбинация:

$$\hat{\mathbf{Q}} = 2\hat{\mathbf{P}} - m_t\hat{\mathbf{V}}_c = \hat{\mathbf{P}} + \frac{1}{2c}\mathbf{H}\times\mathbf{D} = \Sigma_a\left[\hat{\mathbf{P}}_a + \frac{e_a}{c}\mathbf{A}(\mathbf{R}_a)\right]; \tag{3}$$

[1] В гамильтониане $\hat{H}$ опущены не интересующие нас члены, зависящие от спинов частиц.

$[\hat{H}, \hat{\mathbf{Q}}] = 0$. Легко также проверить, что коммутатор $[\hat{Q}_i, \hat{Q}_j] = -i\hbar\frac{e_t}{c}e_{ijk}H_k$, $(i,j,k = x,y,z)$, где $e_t = \Sigma_a e_a$ – полный заряд системы. Следовательно, волновые функции стационарных состояний системы (у которой $e_t = 0$) в однородном магнитном поле $\mathbf{H}$ можно выбрать так, что они будут собственными функциями и оператора $\hat{\mathbf{Q}}$.

Чтобы (при $e_t = 0$) решить уравнение $\hat{\mathbf{Q}}\Psi(\{\mathbf{R}\};\mathbf{Q}) = \mathbf{Q}\Psi(\{\mathbf{R}\};\mathbf{Q})$, введем наряду с координатами $\{\mathbf{R}\}$ некоторые координаты $\{\delta\mathbf{R}\}$, определяющие взаимные положения частиц:

$$\mathbf{R}_a = \mathbf{R}_c + \delta\mathbf{R}_a,\ \Sigma_a m_a \delta\mathbf{R}_a = 0;$$
$$\hat{\mathbf{P}}_a = -i\hbar\frac{m_a}{m_t}\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}_c} + \delta\hat{\mathbf{P}}_a,\ \Sigma_a\delta\hat{\mathbf{P}}_a = 0, \tag{4}$$

причем $\delta\mathbf{R}_a$ и $\delta\hat{\mathbf{P}}_a$ уже не содержат $\mathbf{R}_c$[2]. Подставляя $\mathbf{R}_a$ и $\hat{\mathbf{P}}_a$ из (4) в (3), запишем $\hat{\mathbf{Q}}$ в виде:

$$\hat{\mathbf{Q}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{R}_c} + \frac{1}{2c}\mathbf{H}\times(\delta\mathbf{D} + e_t\mathbf{R}_c), \tag{5}$$

где $\delta\mathbf{D} = \Sigma_a e_a \delta\mathbf{R}_a$. Теперь очевидно, что (при $e_t = 0$)

$$\Psi(\{\mathbf{R}\};\mathbf{Q}) = \exp\{(i/\hbar)[\mathbf{Q} - (1/2c)\mathbf{H}\times\delta\mathbf{D}]\mathbf{R}_c\}\Phi(\{\delta\mathbf{R}\};\mathbf{Q}), \tag{6}$$

где Φ – некоторая функция координат $\delta\mathbf{R}_a$ и от $\mathbf{R}_c$ уже не зависит; как от параметра Φ может еще зависеть от $\mathbf{Q}$. Заметим, что вектор $\mathbf{Q}$ определяет поведение волновой функции (при $e_t = 0$) при трансляции системы как целого. При $\mathbf{H} \neq 0$ вектор $\mathbf{Q}$ заменяет импульс $\mathbf{P}$ при $\mathbf{H} = 0$: в те законы сохранения, в которые при $\mathbf{H} = 0$ входит $\mathbf{P}$, при $\mathbf{H} \neq 0$ входит $\mathbf{Q}$.

Функция Φ определяется, очевидно, из уравнения Шредингера $\hat{H}\Psi(\{\mathbf{R}\}) = E\Psi(\{\mathbf{R}\})$. Не предполагая пока, что $e_t = 0$, но учитывая (6), представим Ψ в виде

$$\Psi(\{\mathbf{R}\}) = \exp(-if)\tilde{\Psi}(\{\mathbf{R}\}),\ f = \frac{1}{2\hbar c}(\mathbf{H}\times\mathbf{D})\mathbf{R}_c. \tag{7}$$

Используя (1), (7) и (4), получим уравнение

$$\hat{\tilde{H}}\tilde{\Psi} = E\tilde{\Psi},\ \hat{\tilde{H}} = \exp(if)\hat{H}\exp(-if) = \hat{H}_0 - \frac{1}{2c}\mathbf{H}\sum_a\frac{e_a}{m_a}(\delta\mathbf{R}_a\times\delta\hat{\mathbf{P}}_a) +$$

$$+\frac{1}{8c^2}\sum_a\frac{e_a^2}{m_a}(\mathbf{H}\times\delta\hat{\mathbf{R}}_a)^2 - \frac{1}{m_t c^2 8}(\mathbf{H}\times\delta\mathbf{D})^2 + \frac{1}{2m_t}(\hat{\mathbf{P}}_c - \frac{1}{c}\mathbf{H}\times\delta\mathbf{D} - \frac{e_t}{c}\mathbf{A}_c)^2,$$

[2] $\delta\mathbf{R}_a$ и $\delta\hat{\mathbf{P}}_a$ не являются уже, вообще говоря, канонически сопряженными величинами.

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\sum_a \frac{1}{m_a}(\delta\hat{\mathbf{P}}_a)^2 + U(\{\delta\mathbf{R}\}),\ \mathbf{A}_c = \mathbf{A}(\mathbf{R}_c) = \frac{1}{2}\mathbf{H}\times\mathbf{R}_c; \qquad (8)$$

$\hat{H}_0$ – гамильтониан покоящейся как целое системы в отсутствие магнитного поля.

Для системы с $e_t = 0$ (см. (7) и (6)) $\tilde{\Psi} = \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{R}_c/\hbar)\Phi$, и Φ удовлетворяет уравнению

$$\hat{H}(\mathbf{Q})\Phi(\{\delta\mathbf{R}\};\mathbf{Q}) = [E(\mathbf{Q}) - (1/2m_t)\mathbf{Q}^2]\Phi(\{\delta\mathbf{R}\};\mathbf{Q}),$$

$$\hat{H}(\mathbf{Q}) = \hat{H}_0 - \frac{1}{2c}\mathbf{H}\sum_a \frac{e_a}{m_a}(\delta\mathbf{R}_a\times\delta\hat{\mathbf{P}}_a) + \frac{1}{8c^2}\sum_a \frac{e_a^2}{m_a}(\mathbf{H}\times\delta\mathbf{R}_a)^2 + \frac{3}{m_t c^2}(\mathbf{H}\times\delta\mathbf{D})^2 -$$

$$-\delta\mathbf{D}\frac{1}{c}\left(\frac{\mathbf{Q}}{\mathbf{m_t}}\times\mathbf{H}\right). \qquad (9)$$

Если система находится еще и в однородном электрическом поле $\mathbf{E}$, то в $\hat{H}$ (1), $\hat{\tilde{H}}$ (8) и $\hat{H}(\mathbf{Q})$ (9) добавляются соответственно слагаемые $-\mathbf{DE}$, $-\mathbf{E}(\delta\mathbf{D} + e_t\mathbf{R}_c)$ и $-\mathbf{E}\delta\mathbf{D}$. Поэтому последний член в $\hat{H}(\mathbf{Q})$ (9) можно рассматривать как энергию взаимодействия системы с электрическим полем $\mathbf{Q}\times\mathbf{H}/m_t c$, возникающем в инерциальной ($\mathbf{Q}$ – интеграл движения) системе отсчета, движущейся относительно лабораторной системы отсчета (в которой имеется поле $\mathbf{H}$) со скоростью $\mathbf{Q}/m_t$ (см., например, [2] §24).

В случае атома удобно ввести координаты электронов относительно ядра: $\mathbf{r}_a = \mathbf{R}_a - \mathbf{R}_n$ (значок "a" теперь относится только к электронам). Тогда (см. (4)): $\delta\mathbf{R}_a = \mathbf{r}_a + \delta\mathbf{R}_n$, $\delta\mathbf{R}_n = -\mathbf{r}_e m/m_t$, $\delta\hat{\mathbf{P}}_a = \hat{\mathbf{p}}_a$ и $\delta\hat{\mathbf{P}} = -\hat{\mathbf{p}}_e$, где m – масса электрона, $\hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{r}_a$, $\mathbf{r}_e = \Sigma_a\mathbf{r}_a$, $\hat{\mathbf{p}}_e = \Sigma_a\hat{\mathbf{p}}_a$.

В простейшем случае атома водорода гамильтониан (1) в переменных $\mathbf{r}$ и $\mathbf{R}_c$ имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{mc}\left[\left(1 - \frac{m}{m_n}\right)\mathbf{A} + \frac{m_t}{m_n}\mathbf{A}_c\right]\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{2m_t}\left(\hat{\mathbf{P}}_c + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \frac{e^2}{2m^*c^2}\left(\mathbf{A}_c + \frac{m_n - m}{m_t}\mathbf{A}\right)^2,$$

где $\hat{H}_0 = (1/2m^*)(\hat{\mathbf{p}})^2 - (e^2/r)$, $m^* = mm_n/m_t$ (m_n – масса ядра), $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}) = (1/2)\mathbf{H}\times\mathbf{r}$ и $(-e)$ – заряд электрона. Функцию f в преобразовании (7) и оператор $\hat{\tilde{H}}$ (8) в этом случае можно записать в виде:

$$f = \frac{e}{\hbar c}\mathbf{r}\mathbf{A}_c,\ \hat{\tilde{H}} = \hat{H}_0 + \mu_B\left(1 - \frac{m}{m_n}\right)\mathbf{H}\hat{\mathbf{l}} + \frac{e^2}{2m^*c^2}\mathbf{A}^2 + \frac{1}{2m_t}\hat{\mathbf{P}}_c^2 + \frac{e}{m_t c}\mathbf{r}(\hat{\mathbf{P}}_c\times\mathbf{H}), \qquad (10)$$

где $\hbar\hat{\mathbf{l}} = \mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}$ и $\mu_B = e\hbar/2mc$. Преобразование $\Psi = \exp(-if)\tilde{\Psi}$ и уравнение $\hat{\tilde{H}}\tilde{\Psi} = E\tilde{\Psi}$ с f и $\hat{\tilde{H}}$ из (10) были впервые получены Лэмбом в одной из его работ [3] по тонкой структуре атома водорода. Поэтому можно сказать, что преобразование (7) есть просто обобщение преобразования Лэмба [3] на произвольную систему.

Преобразование Лэмба [3] используется в теории экситонов в полупроводниках с очевидным переобозначением $m \to m_e$, $m_n \to m_h$, где m_e и m_h – эффективные массы электрона и дырки, и заменой в $\hat{H}_0$ e^2 на e^2/ϵ_0, где ϵ_0 – статическая диэлектрическая постоянная кристалла (см., например, [4] и цитированные там работы). Интересно, что преобразование Лэмба [3] для экситонной проблемы сохраняется даже в том случае, если нельзя ввести эффективную массу (даже тензор масс) электрона или дырки (когда электронная или дырочная зона имеет вырождение более высокое, чем двукратное крамерсово): в этом случае $\mathbf{R}_c$ в преобразовании Лэмба [3] нужно заменить на полусумму $(\mathbf{R}_e + \mathbf{R}_h)/2$ [5]. Заметим, что в теории молекул преобразование вида (7) (без ссылки на работу Лэмба [3]) применялось Говардом и Моссом [6].

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Наука, 1974.

[2] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М., Наука, 1973.

[3] Lamb W. Phys. Rev., **85**, N 2, 259 (1952).

[4] Knox R. S. Theory of Exitons, 1963. [Имеется перевод: Нокс Р. Теория экситонов. М., Мир, 1966.]

[5] Makarov V. P. Phys. Stat. Sol. (b), **44**, N 1, 475 (1971).

[6] Howard B. J., Moss R. E. Mol. Phys., **20**, N 1, 147 (1971).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 23 сентября 1996 г.