2003 г. **№8**

Т р у д ы   Ф О Р А

ГАМИЛЬТОНИАН ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 1/2

П. Г. Коваль, В. Б. Тлячев

Адыгейский государственный университет, г. Майкоп

В статье рассматривается расчет гамильтониана для частицы со спином 1/2 в магнитном поле с точностью до членов v^3/c^3.

Введение

Хорошо известно и описано в учебной литературе [1, 2, 3], что если рассматривать уравнение Дирака для слабых полей и нерелятивистских движений, то можно получить уравнение Паули, учитывая только члены порядка v/c. Учет членов порядка v^2/c^2 приводит к представлению о спин-орбитальном взаимодействии в атоме. Заметим, что в названной литературе рассмотрен случай когда векторный потенциал, а с ним и всякое магнитное поле отсутствуют. Это вполне оправдано для атомов.

Ниже мы рассмотрим прямо противоположный случай – скалярный потенциал положен равным нулю, а векторный отличен от нуля.

Расчеты в случае $\frac{v^2}{c^2}$

Найдем гамильтониан $\hat{H}$ с точностью до членов порядка v^2/c^2 в случае когда скалярный потенциал равен нулю. Будем исходить из уравнения Дирака для электрона во внешнем поле в виде ([3], §33. С. 149.):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left\{c\boldsymbol{\alpha}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + \beta mc^2 + e\Phi\right\}\psi.$$

Исключая энергию покоя частицы mc^2 при помощи преобразования

$$\psi = \psi' e^{-imc^2 t/\hbar}.$$

получим:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + mc^2\right)\psi' = \left\{c\boldsymbol{\alpha}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + \beta mc^2 + e\Phi\right\}\psi'.$$

Представив функцию ψ' в виде $\psi' = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ и рассматривая стационарный случай, получим систему

$$(\varepsilon - e\Phi)\varphi = c\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\chi; \tag{1}$$

$$\left(\varepsilon - e\Phi + 2mc^2\right)\chi = c\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi. \tag{2}$$

Здесь $\varepsilon = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ – оператор энергии.

Выразив из (2) χ и проводя разложение по степеням v/c при $\Phi = 0$, получим с точностью до v^2/c^2

$$\chi = \frac{\left(1 - \frac{\varepsilon}{2mc^2}\right)\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi}{2mc}. \tag{3}$$

Подставим (3) в (1)

$$\varepsilon\varphi = \frac{1-\dfrac{\varepsilon}{2mc^2}}{2m}\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi. \tag{4}$$

Введем обозначение $\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right) = (\mathbf{p}-\mathbf{B})$ и в явном виде раскроем квадрат оператора

$$(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B}))^2. \tag{5}$$

Учитывая свойства матриц Паули $\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1$ и $\sigma_x\sigma_y=i\sigma_z=-\sigma_y\sigma_x$, выражение (5) приведем к виду:

$$(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B}))^2 = (\mathbf{p}-\mathbf{B})^2 - \hbar\boldsymbol{\sigma} rot\mathbf{B} = \left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}. \tag{6}$$

Тогда уравнение (4) преобразуется в уравнение

$$\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon/2mc^2}\varphi = \left[\frac{\left(\mathbf{p}-\dfrac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}\right]\varphi, \tag{7}$$

которое приводится к уравнению Паули, если ввести обозначение $\varepsilon_0 = \dfrac{\varepsilon}{1-\varepsilon/2mc^2}$.

Функция φ нормируется вместе с функцией χ условием:

$$\int(\varphi^*\varphi+\chi^*\chi)\,dV = 1. \tag{8}$$

Найдем функцию φ_w, такую чтобы $\varphi_w^*\varphi_w=\varphi^*\varphi+\chi^*\chi$, после чего преобразуем уравнение (7), переписав его для функции φ_w. Для этого определим в принятом приближении произведение $\chi^*\chi$:

$$\chi^*\chi = \frac{\left(1-\dfrac{\varepsilon}{2mc^2}\right)^2}{4m^2c^2}\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right)^*\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right) \simeq$$
$$\simeq \frac{1}{4m^2c^2}\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right)^*\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right) \simeq \frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi)^*(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi).$$

Аналогично [3] преобразуем оператор $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi)^*(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi)$ к виду

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi)^*(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi) = (\mathbf{p}^*\varphi^*\boldsymbol{\sigma}^*)(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi) = (-\mathbf{p}\varphi^*\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi = -(\mathbf{p}\varphi^*)(\mathbf{p}\varphi).$$

Так как $\int(\mathbf{p}\varphi^*)(\mathbf{p}\varphi)\,dV = -\frac{1}{2}\int(\varphi\mathbf{p}^2\varphi^*+\varphi^*\mathbf{p}^2\varphi)\,dV$, то условие нормировки (8) запишется в виде

$$\int(\varphi^*\varphi+\chi^*\chi)\,dV = \int\left(\varphi^*\varphi+\frac{1}{8m^2c^2}(\varphi\mathbf{p}^2\varphi^*+\varphi^*\mathbf{p}^2\varphi)\right)dV. \tag{9}$$

Введем оператор g, который преобразует функцию φ в функцию φ_w: $\varphi_w = g\varphi$ [1]. Этот оператор с принятой точностью v^2/c^2 можно найти из условия нормировки для функции φ_w [1, 3] $\varphi_w^*\varphi_w = \varphi^*\varphi+\dfrac{1}{8m^2c^2}(\varphi\mathbf{p}^2\varphi^*+\varphi^*\mathbf{p}^2\varphi)$.

$$g = 1+\frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}. \tag{10}$$

Оператор обратный оператору g с принятой точностью равен

$$g^{-1} = 1-\frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}.$$

Чтобы переписать уравнение (7) для функции φ_w, подействуем на него оператором g, тогда получим:

$$\varepsilon_0 g\varphi = gH'\varphi.$$

Заменим в правой части последнего равенства $\varphi = g^{-1}g\varphi$, после чего уравнение (7) примет вид:

$$\varepsilon_0 g\varphi = gH'g^{-1}g\varphi \Rightarrow \varepsilon_0\varphi_w = gH'g^{-1}\varphi_w.$$

Осталось записать оператор $H = gH'g^{-1}$ в явном виде

$$H = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H} = H'.$$

Таким образом мы получили "несколько уточненное"уравнение Паули

$$\varepsilon_0\varphi_w = \frac{1}{2m}\left[\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}\right]\varphi_w, \tag{11}$$

в котором уровни энергии ε оказываются сдвинутыми вниз

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_0}{1 + \frac{\varepsilon_0}{2mc^2}}.$$

Случай $\frac{v^3}{c^3}$

Действуя как и в предыдущем случае мы вновь получаем для функции φ уравнение (7). Введем функцию $\varphi_w = g\varphi$, для которой выполняется равенство $\varphi_w^*\varphi_w = \varphi^*\varphi + \chi^*\chi$. Найдем произведение $\chi^*\chi$:

$$\chi^*\chi = \frac{\left(1 - \frac{\varepsilon}{2mc^2}\right)^2}{4m^2c^2}\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right)^*\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right) \simeq$$
$$\simeq \frac{1}{4m^2c^2}\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right)^*\left(\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right).$$

Используя обозначение $\mathbf{B} = \frac{e}{c}\mathbf{A}$, запишем:

$$(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \mathbf{B})\varphi)^*(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \mathbf{B})\varphi) = (-\mathbf{p}\varphi^*\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}\varphi) =$$
$$-(\mathbf{p}\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi) + (\mathbf{p}\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}\varphi) - \mathbf{B}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi) + \mathbf{B}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}\varphi). \tag{12}$$

Первое слагаемое уже преобразовывалось выше. Последнее слагаемое имеет вид:

$$\mathbf{B}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}\varphi) = \mathbf{B}^2\varphi^*\varphi.$$

Второй член суммы в (12) равен

$$(\mathbf{p}\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}\varphi) = (\mathbf{p}\varphi^*)(\mathbf{B}\varphi) + i([\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}]\varphi^*)(\mathbf{B}\varphi).$$

Третий член суммы в (12) равен

$$-\mathbf{B}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi) = -\mathbf{B}\varphi^*\cdot\mathbf{p}\varphi - i\varphi^*(\mathbf{p}\varphi)[\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}]. \tag{13}$$

Подставляя найденные выражения в условие нормировки (8) мы получим, что

$$\int(\varphi^*\varphi + \chi^*\chi)\,dV =$$
$$= \int\left(\varphi^*\varphi + \frac{1}{8m^2c^2}(\varphi\mathbf{p}^2\varphi^* + \varphi^*\mathbf{p}^2\varphi) + \frac{1}{4m^2c^2}\mathbf{B}[(\mathbf{p}\varphi^*)\varphi - \varphi^*\mathbf{p}\varphi] + \right.$$
$$\left. + \frac{i}{4m^2c^2}[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}][(\mathbf{p}\varphi^*)\varphi + \varphi^*\mathbf{p}\varphi] + \frac{1}{4m^2c^2}\mathbf{B}^2\varphi^*\varphi\right)dV. \tag{14}$$

Следовательно оператор g примет вид

$$g = 1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} - \frac{(\mathbf{Bp})}{4m^2c^2} + \frac{i[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{p}}{4m^2c^2} + \frac{\mathbf{B}^2}{8m^2c^2}. \tag{15}$$

Тогда $(g^*\varphi^* \cdot g\varphi)$ дает подынтегральное выражение (14). Оператор g^{-1} будет иметь вид

$$g^{-1} = 1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} + \frac{\mathbf{Bp}}{4m^2c^2} - \frac{i[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{p}}{4m^2c^2} - \frac{\mathbf{B}^2}{8m^2c^2}, \tag{16}$$

так как в этом случае с точностью v^3/c^3 выполняется равенство $\varphi = g^{-1}g\varphi$. Отбросив последнее слагаемое в операторах g и g^{-1}, преобразуем теперь гамильтониан $H' \to H$ по формуле $H = gH'g^{-1}$, где $H' = \frac{1}{2m}((\mathbf{p}-\mathbf{B})^2 - \frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})$. При этом все время отбрасываем члены степень которых выше чем v^3/c^3:

$$H = \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} - \frac{(\mathbf{Bp})}{4m^2c^2} + \frac{i[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{p}}{4m^2c^2}\right)\left(\frac{(\mathbf{p}-\mathbf{B})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}\right)\left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} + \frac{(\mathbf{Bp})}{4m^2c^2} - \frac{i[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{p}}{4m^2c^2}\right) =$$
$$= \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{B})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H} + \frac{\mathbf{pBp}^2 - \mathbf{Bpp}^2 - \mathbf{p}^2\mathbf{pB} + \mathbf{p}^2\mathbf{Bp}}{16m^3c^2} + \frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Hp}^2}{16m^3c^3} - \frac{e\hbar\mathbf{p}^2\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}}{16m^3c^3} - \frac{i\mathbf{p}^2[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{p}}{8m^3c^2} + \frac{i[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{pp}^2}{8m^3c^2}.$$

Учитывая, что

$$\mathbf{pBp}^2 - \mathbf{Bpp}^2 - \mathbf{p}^2\mathbf{pB} + \mathbf{p}^2\mathbf{Bp} = -i\hbar^3 \operatorname{div}\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{B} + 2\hbar^2(\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{B})\mathbf{p},$$

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{Hp}^2 - \mathbf{p}^2\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H} = \hbar^2\,\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}) + 2i\hbar\operatorname{grad}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\mathbf{p},$$

$$-\mathbf{p}^2[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{p} + [\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{pp}^2 = \hbar^2(\boldsymbol{\Delta}[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}])\mathbf{p} + 2i\hbar\operatorname{grad}(\mathbf{1}[\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma}])\cdot\mathbf{p}(\mathbf{1p}),$$

где $\mathbf{1}$ – вектор с компонентами $\{1, 1, 1\}$ получим выражение оператора H в виде

$$H = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H} + \frac{e\hbar}{16m^3c^3}\left\{-i\hbar^2\operatorname{div}\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{A} + 2\hbar(\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{A})\mathbf{p} + \right.$$
$$\left. + \hbar^2\,\boldsymbol{\Delta}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}) + 2i\hbar\operatorname{grad}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\mathbf{p} + 2i\hbar^2(\boldsymbol{\Delta}[\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}])\mathbf{p} - 4\hbar\operatorname{grad}(\mathbf{1}[\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}])\cdot\mathbf{p}(\mathbf{1p})\right\}. \tag{17}$$

Третье слагаемое в (17) является поправкой порядка $\frac{v^3}{c^3}$ к уравнению Паули.

Гамильтониан второго порядка в случае $\Phi \neq 0$

Множитель e/c перед векторным потенциалом, как это не покажется странным, упрощает расчеты и дает возможность легко получить гамильтониан второго порядка точности в случае когда и скалярный и векторный потенциалы отличны от нуля. В этом случае формула (3) перепишется в виде:

$$\chi = \frac{\left(1 - \frac{\varepsilon - e\Phi}{2mc^2}\right)\boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi}{2mc}. \tag{18}$$

Подставляя (18) в (1), получим уравнение для функции φ:

$$\varepsilon\varphi = (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B})\frac{1 - \frac{\varepsilon - e\Phi}{2mc^2}}{2m}\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B}) + e\Phi)\varphi =$$
$$= (\frac{(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B}))^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B})(\varepsilon - e\Phi)\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B})}{4m^2c^2} + e\Phi)\varphi \simeq$$
$$\simeq (\frac{(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{B}))^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}(\varepsilon - e\Phi)\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{4m^2c^2} + e\Phi)\varphi = H'\varphi. \tag{19}$$

Функция φ нормируется вместе с функцией χ условием (8). Вводя функцию φ_w, для которой выполняется условие $\varphi_w^* \varphi_w = \varphi^* \varphi + \chi^* \chi$, получим оператор g ($\varphi_w = g\varphi$) в таком же виде, как и в случае $\Phi = 0$ – формула (10). Перепишем уравнение (19) для функции φ_w, для чего преобразуем гамильтониан H', отбрасывая члены степень которых выше чем v^2/c^2 :

$$H = gH'g^{-1} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}\,(\mathbf{p}-\mathbf{B}))^2}{2m} + e\Phi - \frac{\varepsilon \mathbf{p}^2}{4m^2c^2} + \frac{e(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})}{4m^2c^2} + \frac{e\mathbf{p}^2\Phi}{8m^2c^2} - \frac{e\Phi\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}. \tag{20}$$

Учитывая (6) и равенство

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\Phi(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) = -\hbar^2\Delta\Phi + 2i\hbar(\mathbf{E}\mathbf{p}),$$

где $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, получим, что в принятом приближении гамильтониан примет вид:

$$\begin{aligned} H = \frac{(\boldsymbol{\sigma}\,(\mathbf{p}-\mathbf{B}))^2}{2m} + e\Phi - \frac{\varepsilon\mathbf{p}^2}{4m^2c^2} + e\frac{\Phi\mathbf{p}^2 + i\hbar(\mathbf{E}\mathbf{p}) + i\hbar\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E}\mathbf{p}]}{4m^2c^2} + e\frac{i\hbar(\mathbf{E}\mathbf{p})}{4m^2c^2} - e\frac{\hbar^2\Delta\Phi}{8m^2c^2} = \\ = \frac{\left(\mathbf{p} - \dfrac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H} + e\Phi - \frac{(\varepsilon - e\Phi)\mathbf{p}^2}{4m^2c^2} + e\frac{i\hbar(\mathbf{E}\mathbf{p})}{2m^2c^2} + e\frac{i\hbar\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E}\mathbf{p}]}{4m^2c^2} + e\frac{\hbar^2\,\mathrm{div}\mathbf{E}}{8m^2c^2}. \end{aligned}$$

Полученное выражение расширяет результаты, описанные в учебниках [1], [3].

Список литературы

1. *Давыдов А. С.* Квантовая механика. – М., 1963.

2. *Левич В. Г., Вдовин Ю. А., Мямлин В. А.* Курс теоретической физики. Т. 2. – М.: Наука, 1971.

3. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика: Учеб.пособие. В 10 т. Т. IV. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. – 3-е изд., испр. – М.: Наука, 1989.

The third order Hamiltonian with spin 1/2 particles

P. G. Koval, V. B. Tlyachev

The article considers calculation of Hamiltonian for particles with spin 1/2 in the magnetic field with accuracy of up to members v^3/c^3.

