

# Kapitel 10

## Geladene Teilchen im elektromagnetischen Feld

*Das Interessanteste aber ist gegenwärtig das Experiment von Stern und Gerlach. Die Einstellung der Atome ohne Zusammenstöße ist nach den jetzigen Überlegungsmethoden durch Strahlung nicht zu verstehen; eine Einstellung sollte von Rechts wegen mehr als 100 Jahre dauern. Ich habe mit Ehrenfest eine kleine Rechnung darüber angestellt. Rubens hält das experimentelle Ergebnis für absolut sicher.*

A. Einstein an M. Born; 1921

Zum Verständnis der komplizierten elektromagnetischen Kräfte zwischen Elektronen und Atomen (z.B. in Festkörpern) einerseits, sowie zum tieferen Studium des Atombaus andererseits untersucht man elektrisch geladene und/oder polarisierbare Teilchen in bekannten äußeren elektrischen und magnetischen Feldern. Dank ihrer elektromagnetischen Eigenschaften (Ladung, Momente) reagieren Atome in charakteristischer Weise auf angelegte Felder. Die Beschreibung eines äußeren elektromagnetischen Feldes ist eine Näherung, bei der vorausgesetzt wird, dass in dem betrachteten System Teilchen plus Feld die *Rückwirkung* der Teilchen auf das Feld vernachlässigt werden kann. Das ist für makroskopische Felder, die von Spulen, Kondensatoren oder anderen elektromagnetischen Anordnungen erzeugt werden, wenigstens dann zu erwarten, wenn die Zahl der Teilchen, die sich im Feld bewegen, nicht makroskopisch ist. Wir müssen auch annehmen, dass eine klassische Beschreibung der der Feld-Freiheitsgrade möglich ist. In vielen praktischen Fällen ist dies eine sehr gute Näherung. Hier wirkt das Korrespondenzprinzip, da in makroskopischen Feldern derart viele hoch angeregte Quantenzustände enthalten sind, dass man von Interferenzphänomenen absehen kann. Eine strenge Begründung dieser Annahme

muss von der *Quantenelektrodynamik* geliefert werden, in der die Potentiale und Feldstärke zu operatorwertigen Feldern werden.

Wir betrachten ein Teilchen der Ladung  $e$ , das sich in einem elektromagnetischen Feld bewegt, das durch ein skalares Potential  $\varphi$  und ein Vektorpotential  $\mathbf{A}$  beschrieben wird. Diese Felder sind Funktionen von Raum und Zeit, wobei ein Raumpunkt die Stelle ist, an der das Teilchen (dessen Rückwirkung auf das Feld vernachlässigt wird) das Feld spürt. In der Quantentheorie ist aber der Ort ein Operator, der als Argument der Potentiale auftritt,

$$\varphi = \varphi(t, \mathbf{x}) \quad \text{und} \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}(t, \mathbf{x}).$$

Wie diese Größen in den Hamilton-Operator einzubauen sind, ergibt sich aus dem klassischen Hamilton-Formalismus. In der klassischen Mechanik ist die Bewegung eines geladenen Teilchens mit Masse  $\mu$  durch die Lösung der *Lorentz-Gleichung*

$$\mu \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = e \left( \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \frac{\mathbf{v}}{c} \wedge \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \right). \quad (10.1)$$

mit vorgegebenen Anfangsbedingungen bestimmt. Diese Bewegungsgleichung ist die Euler-Lagrange-Gleichung zur *Lagrangefunktion*

$$L = \frac{\mu}{2} \mathbf{v}^2 + \frac{e}{c} \mathbf{v} \mathbf{A} - e\varphi. \quad (10.2)$$

Aus den Potentialen können das magnetische und elektrische Feld vermittels

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad \text{und} \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi$$

berechnet werden. Wie aus der Elektrodynamik bekannt, führen eichäquivalente Potentiale zu denselben elektromagnetischen Feldern. Um die zugehörige Hamiltonfunktion zu berechnen, benutzt man

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \implies \mu \mathbf{v} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \equiv \boldsymbol{\pi}, \quad (10.3)$$

wobei wir neben dem eichvarianten *kanonischen Impuls*  $\mathbf{p}$  den eichinvarianten *kinetischen Impuls*  $\boldsymbol{\pi}$  eingeführt haben. Es folgt nun

$$H = \frac{1}{2\mu} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi = \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\pi}^2 + e\varphi. \quad (10.4)$$

Der Hamilton-Operator hat dieselbe Form wie die Hamilton-Funktion, wobei  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{x}$

(auch als Argument der Potentiale) als Operatoren aufgefasst werden. In Gegenwart eines Magnetfeldes kommutieren die Komponenten des kinetischen Impulses allerdings nicht,

$$[\pi_i, \pi_j] = \left[ p_i - \frac{e}{c} A_i, p_j - \frac{e}{c} A_j \right] = \frac{ie\hbar}{c} F_{ij} = \frac{ie\hbar}{c} \epsilon_{ijk} B_k, \quad (10.5)$$

im Gegensatz zu den Komponenten des kanonischen Impulses.

Beim Übergang von der klassischen Hamiltonfunktion zum Hamilton-Operator gibt es Mehrdeutigkeiten, wie sie schon früher im Abschnitt über *Wellenmechanik mit Kräften* besprochen wurden. Die in der klassischen Theorie identischen Ausdrücke

$$\mathbf{p}^2 - 2\frac{e}{c}\mathbf{A}\mathbf{p} + \frac{e^2}{c^2}\mathbf{A}^2 \quad \text{und} \quad \mathbf{p}^2 - \frac{e}{c}(\mathbf{A}\mathbf{p} + \mathbf{p}\mathbf{A}) + \frac{e^2}{c^2}\mathbf{A}^2 \quad (10.6)$$

sind in der Quantentheorie verschiedene Operatoren, da im Allgemeinen  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$  nicht vertauschen. Diese sogenannte *ordering ambiguity* wird eingeschränkt, indem man  $H = H^\dagger$  verlangt. Dies garantiert eine unitäre Zeitentwicklung und schreibt die zweite Alternative in (10.6) vor. In Kapitel 2 haben wir bereits allgemeine Eigenschaften der Schrödingergleichung in beliebigen Eichfeldern (und krummlinigen Koordinaten) diskutiert. Insbesondere haben wir gesehen, daß der Schrödingersche Erhaltungssatz gilt: Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho = \psi^\dagger\psi$  und die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2\mu} (\psi^\dagger \boldsymbol{\pi} \psi + (\boldsymbol{\pi} \psi)^\dagger \psi) \quad (10.7)$$

erfüllen die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (10.8)$$

Mit richtigen Abfalleigenschaften oder Randbedingungen der Wellenfunktionen folgt daraus die Erhaltung für die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu finden.

## 10.1 Elektronen im Magnetfeld

Untersucht man die Bewegung eines geladenen Teilchens im Magnetfeld, so ist es vorteilhaft die *Weyl-Eichung*  $\varphi = 0$  zu wählen, was immer möglich ist. In dieser Eichung ist  $H$  in (10.4) proportional zum Quadrat des eichinvarianten kinetischen Impulses,

$$H = \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\pi}^2. \quad (10.9)$$

Um die Bewegungsgleichungen im Heisenberg-Bild abzuleiten berechnen wir

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{i}{\hbar}[H, \mathbf{x}] = \frac{1}{\mu}\boldsymbol{\pi} \quad (10.10)$$

$$\dot{\boldsymbol{\pi}} = \frac{i}{\hbar}[H, \boldsymbol{\pi}] \stackrel{(10.5)}{=} \frac{e}{2\mu c}(\boldsymbol{\pi} \wedge \mathbf{B} - \mathbf{B} \wedge \boldsymbol{\pi}), \quad (10.11)$$

wobei wir den Index  $H$  an den Operatoren im Heisenberg-Bild nicht explizit schreiben. Die beiden Beziehungen entsprechen der klassischen Lorentz-Gleichung im Magnetfeld. Allerdings erhalten wir hier einen symmetrisierten Ausdruck für die Kraft, weil  $\boldsymbol{\pi}$  und  $\mathbf{B}$  im Allgemeinen nicht vertauschen.

Im Folgenden wollen wir die Bewegung eines Elektrons mit  $e = -e_0$  studieren. Weiter sei das Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}$  homogen, d.h. seine Stärke  $B$  und seine Richtung  $\mathbf{e}$  seien ortsunabhängig. Dann vereinfachen sich die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen wie folgt,

$$\mu\dot{\mathbf{x}} = \boldsymbol{\pi} \quad \text{und} \quad \dot{\boldsymbol{\pi}} = \omega_c \mathbf{e} \wedge \boldsymbol{\pi} \quad (10.12)$$

wobei die *Zyklotronfrequenz*

$$\omega_c [\text{MHz}] = \frac{e_0 B}{\mu c} \sim 2\pi \cdot 2.8 \times B [\text{Gauss}] \quad (10.13)$$

auftritt. Die zweite Bewegungsgleichung in (10.12) besagt, daß  $\boldsymbol{\pi} = \mu\mathbf{v}$  mit der Umlauffrequenz  $\omega_c$  um das Magnetfeld rotiert. Diese Gleichung ist einfach zu integrieren,

$$\boldsymbol{\pi}(t) = \boldsymbol{\pi}_{0\parallel} - \mathbf{e} \wedge (\mathbf{e} \wedge \boldsymbol{\pi}_0) \cos \omega_c t + \mathbf{e} \wedge \boldsymbol{\pi}_0 \sin \omega_c t, \quad (10.14)$$

wobei  $\boldsymbol{\pi}_0 = \boldsymbol{\pi}(0)$  den anfänglichen kinetischen Impuls und  $\boldsymbol{\pi}_{\parallel} = (\mathbf{e}, \boldsymbol{\pi})\boldsymbol{\pi}$  den kinetischen Impuls in Richtung des Magnetfelds bezeichnen. Die Geschwindigkeit  $\mathbf{v}_{\parallel} = \boldsymbol{\pi}_{\parallel}/\mu$  in Richtung des Magnetfeldes ist zeitunabhängig. Die Integration von  $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}$  führt auf folgende Zeitentwicklung für den Ortsoperator

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{X} + \mathbf{v}_{0\parallel}t + \frac{1}{\omega_c} \mathbf{e} \wedge (\mathbf{e} \wedge \mathbf{v}_0) \sin \omega_c t + \frac{1}{\omega_c} \mathbf{e} \wedge \mathbf{v}_0 \cos \omega_c t, \quad (10.15)$$

Der beiden letzten Terme auf der rechten Seite hängen nur von der Anfangsgeschwindigkeit senkrecht zum Magnetfeld ab. Offensichtlich sind die Integrationskonstanten  $\mathbf{X}$  die *Schwerpunktskoordinaten* in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld und die Anfangskoordinate in Richtung des Magnetfeldes. Mit dem Ortsoperator im Heisenberg-Bild durchläuft der mittlere Ort des Teilchens eine Spiralbahn auf der Oberfläche des Zylinders mit Sym-

metrieachse in Richtung von  $\mathbf{B}$  durch  $\mathbf{X}$  mit Radius

$$r = |\mathbf{e} \wedge \langle \mathbf{v}_0 \rangle| / \omega_c. \quad (10.16)$$

Der Einfachheit halber legen wir nun das Magnetfeld in die 3-Richtung,  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Dann ist die Bewegung in diese Richtung die eines freien Teilchens, da  $\pi_3$  mit dem Hamilton-Operator vertauscht. Es genügt daher im Folgenden die Bewegung in der zum Magnetfeld senkrechten 12-Ebene zu betrachten. Die Lösung (10.15) der Bewegungsgleichung in dieser Ebene lautet

$$\mathbf{x}_\perp(t) = \mathbf{X}_\perp + \frac{1}{\mu\omega_c} \begin{pmatrix} \sin \omega_c t & \cos \omega_c t \\ -\cos \omega_c t & \sin \omega_c t \end{pmatrix} \boldsymbol{\pi}_\perp(0), \quad \mathbf{x}_\perp = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (10.17)$$

Da die Schwerpunktskoordinaten  $\mathbf{X}_\perp$  Bewegungskonstanten sind, ergibt die Auswertung dieser Gleichung zur Zeit  $t=0$

$$\mathbf{X}_\perp = \mathbf{x}_\perp(0) - \frac{1}{\mu\omega_c} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\pi}_\perp(0). \quad (10.18)$$

Statt Orts- und Impulsoperatoren ist es hier nützlich die hermiteschen Operatoren  $\boldsymbol{\pi}_\perp$ ,  $\mathbf{X}_\perp$  zu benutzen. Deren Komponenten haben die Vertauschungsrelationen

$$[\pi_i, \pi_j] = \frac{\hbar}{i} \mu \omega_c \epsilon_{ij}, \quad [X_i, X_j] = i\hbar \frac{\epsilon_{ij}}{\mu \omega_c}, \quad [\pi_i, X_j] = 0, \quad i, j = 1, 2. \quad (10.19)$$

Die Berechnung des Kommutators zweier Operatoren im Heisenberg-Bild ist einfacher, wenn diese zu gleichen Zeiten auftreten. Selbst der Kommutator  $[x_i(t), p_j(t')]$  mit  $t \neq t'$  ist für viele Systeme schwierig zu berechnen. Deshalb ist auch die Formel (10.18) hilfreich bei der Berechnung der Vertauschungsrelationen (10.19).

Nun sieht man explizit, dass der Hamilton-Operator für die Bewegung in der 12-Ebene,

$$H_\perp = \frac{1}{2\mu} (\pi_1^2 + \pi_2^2), \quad (10.20)$$

mit den Operatoren der Schwerpunktskoordinaten  $X_i$  vertauscht. Da  $\pi_1$  und  $\pi_2$  (bis auf eine Skalierung) dieselben Vertauschungsrelation wie die Position und der Impuls eines Teilchens auf der Linie erfüllen, kann  $H$  als Hamilton-Operator eines *harmonischen Oszillators* interpretiert werden. Aber wegen der vorhandenen Bewegungskonstanten  $X_i$  wird das Spektrum entartet sein.

Nun können wir die von der Theorie des harmonischen Oszillators bekannten *Vernichtungs-*

und *Erzeugungsoperatoren* einführen,

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega_c}}(\pi_1 - i\pi_2) \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega_c}}(\pi_1 + i\pi_2), \end{aligned} \quad (10.21)$$

welche die bekannten Kommutationsregeln  $[a, a^\dagger] = 1$  erfüllen. Der Hamilton-Operator für ein Elektron im homogenen Magnetfeld schreibt sich dann gemäß

$$H_\perp = \hbar\omega_c \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (10.22)$$

Die Energieeigenwerte von  $H_\perp$  sind die *Landau-Niveaus*,

$$E_n = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (10.23)$$

die eine wichtige Rolle in der Festkörperphysik spielen, zum Beispiel beim Verständnis des *Quanten-Hall-Effekts*. Der Erzeugungsoperator  $a^\dagger$  erhöht die Energie um ein Quant  $\hbar\omega_c$  und  $a$  erniedrigt sie um denselben Betrag.

Um die explizite Form der Energie-Eigenfunktionen

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} |0\rangle \quad , \quad a|0\rangle = 0 \quad (10.24)$$

in der Ortsdarstellung,  $\psi_n(\mathbf{x}_\perp) = \langle \mathbf{x}_\perp | n \rangle$ , zu finden, brauchen wir die explizite Form von  $a$  und  $a^\dagger$  in dieser Darstellung. Da einerseits

$$\pi_1 = \frac{\hbar}{i} \partial_1 - \frac{\mu\omega_c}{2} x_2 \quad \text{und} \quad \pi_2 = \frac{\hbar}{i} \partial_2 + \frac{\mu\omega_c}{2} x_1$$

gilt und andererseits die  $a, a^\dagger$  komplexe Linearkombinationen der kinetischen Impulse sind, treten die komplexen Operatoren

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + ix_2) \quad \text{resp.} \quad \partial_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (\partial_1 - i\partial_2)$$

auf. Eine kurze Rechnung ergibt folgende Darstellung für  $a$  und  $a^\dagger$ :

$$a = \frac{1}{2ir_0} (\bar{z} + 2r_0^2 \partial_z) \quad , \quad a^\dagger = \frac{i}{2r_0} (z - 2r_0^2 \bar{\partial}_z), \quad \text{wobei} \quad r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_c}} \quad (10.25)$$

die *magnetische Länge* bezeichnet. Der Grundzustand (10.24) hat damit in der Ortsdar-

stellung die Form

$$\psi_0(z, \bar{z}) = e^{-z\bar{z}/2r_0^2} f(\bar{z}) \quad (10.26)$$

und ist hochgradig entartet. Die angeregten Zustände können nun gemäß (10.24) mit Hilfe des Operators  $a^\dagger$  aus dem Grundzustand erzeugt werden. Die hochgradige Entartung der Energie-Eigenzustände deutet darauf hin, dass es neben der Energie noch weitere verträgliche Observablen gibt, die den Zustand des Elektrons festlegen. Eine davon wird eine Funktion der Bewegungskonstante  $\mathbf{X}_\perp$  sein.

Da die Komponenten  $X_1$  und  $X_2$  nicht vertauschen, können wir den Schwerpunkt nicht scharf machen. Aber wir können den quadrierten Abstand des Bahnschwerpunktes vom Ursprung festlegen,

$$X^2 = X_1^2 + X_2^2 = 2b^\dagger b + r_0^2, \quad (10.27)$$

wobei wir die dimensionsbehafteten neuen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\begin{aligned} b &= \frac{1}{\sqrt{2}} (X_1 + iX_2) = \frac{z}{2} + r_0^2 \bar{\partial}_z \\ b^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (X_1 - iX_2) = \frac{\bar{z}}{2} - r_0^2 \partial_z \end{aligned} \quad (10.28)$$

eingeführt haben. Diese erfüllen die vertraute Vertauschungsrelation

$$[b, b^\dagger] = r_0^2. \quad (10.29)$$

Da die Schwerpunktskoordinaten mit den kinetischen Impulsen vertauschen, kommutieren  $b, b^\dagger$  mit  $a, a^\dagger$ . Der kleinste Wert des Schwerpunktsradius ist wegen (10.27) gleich der magnetischen Länge  $r_0$  und die entsprechende Eigenfunktion muss von  $b$  annihilert werden,

$$b \psi_n \sim b a^{\dagger n} \psi_0 = a^{\dagger n} b \psi_0 = a^{\dagger n} e^{-z\bar{z}/2r_0^2} r_0^2 \bar{\partial}_z f(\bar{z}) = 0.$$

Also ist  $f$  konstant und der normierte Grundzustand mit minimalem  $\mathbf{X}_\perp^2 = r_0^2$  gleich

$$\psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi} r_0} e^{-r^2/4r_0^2}. \quad (10.30)$$

Die angeregten Zustände mit Energie  $E_n = \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$  und  $\mathbf{X}_\perp^2 = r_0^2$  lauten

$$\psi_{n,0} = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} \psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \frac{iz}{r_0} \right)^n \psi_{0,0}. \quad (10.31)$$

Auf diese Zustände können wir nun wiederholt mit  $b^\dagger$  wirken und erhalten,

$$\psi_{n,m} = \frac{1}{r_0^m \sqrt{m!}} b^{\dagger m} \psi_{n,0}.$$

Die Quantenzahl  $n = 0, 1, 2, \dots$  charakterisiert die Energie und die Quantenzahl  $m = 0, 1, 2, \dots$  den Abstand des Schwerpunktes vom Ursprung,

$$\begin{aligned} H|mn\rangle &= \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})|mn\rangle \\ \mathbf{X}_\perp^2|mn\rangle &= r_0^2(2m + 1)|mn\rangle. \end{aligned} \quad (10.32)$$

Diese Zustände haben die Form

$$\psi_{n,m} = P_{n,m}(z, \bar{z}) e^{-r^2/4r_0^2},$$

wobei  $P_{n,m}$  ein Polynom der Ordnung  $n$  in  $z$  und der Ordnung  $m$  in  $\bar{z}$  ist.

## 10.2 Wasserstoffatom im Magnetfeld

Die Einwirkung eines überlagerten Magnetfeldes auf die Bewegung der Atomelektronen bildet die Grundlage für ein Verständnis des *Zeeman-Effektes* und des Diamagnetismus. Wir betrachten hier das einfache Wasserstoffatom im äußeren Magnetfeld und berechnen die Eigenwerte und Eigenfunktionen des 1-Elektron Hamilton-Operators

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2\mu} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \varphi(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 + \varphi(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{ie\hbar}{2\mu c} (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{ie\hbar}{\mu c} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu c^2} \mathbf{A}^2 + \varphi(r). \end{aligned} \quad (10.33)$$

Hier beschreibt  $\mathbf{A}$  das äußere Magnetfeld und  $\varphi$  das Coulomb-Feld des Atomkerns. Wir wollen annehmen, das Magnetfeld sei in einer Umgebung von mehreren Angström um den Atomkern annähernd konstant. Ohne große Fehler dürfen wir dann das Magnetfeld durch

ein konstantes Feld  $\mathbf{B}$  ersetzen. Für ein homogenes Magnetfeld wählen wir das Potential

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \wedge \mathbf{x} \implies \nabla \wedge \mathbf{A} = \mathbf{B} = B \mathbf{e} = \text{konstant}, \quad (10.34)$$

so daß für ein in die 3-Richtung zeigendes Magnetfeld die feldabhängigen Terme in (10.33) folgende Form annehmen,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{2} \partial_i \epsilon_{ijk} B_j x_k = \frac{1}{2} \epsilon_{iji} B_j = 0 \\ \mathbf{A} \cdot \nabla &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} B_j x_k \partial_i = \frac{i}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \\ \mathbf{A}^2 &= \frac{1}{4} (\mathbf{B} \wedge \mathbf{x})^2 = \frac{1}{4} (x^2 B^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{B})^2) = \frac{1}{4} B^2 (x^2 + y^2). \end{aligned}$$

Damit lautet der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2 B^2}{8\mu c^2} (x^2 + y^2) + \varphi(r). \quad (10.35)$$

Der zweite Term  $\sim \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$  liefert einen Beitrag zum *Paramagnetismus*, der dritte Term zum *Diamagnetismus*. Das Verhältnis des paramagnetischen Terms zur Coulomb-Energie ist

$$\frac{(-e/2\mu c) \langle L_3 \rangle B}{e^2/a} \sim \frac{(-e/2\mu c) \hbar B}{e^2/a} = \frac{\alpha}{2} \frac{B}{e_0/a^2} = 2 \times 10^{-10} \cdot B(\text{Gauss}) \quad (10.36)$$

und deshalb stört für irdische Magnetfelder (demnächst 45 Tesla =  $4.5 \times 10^5$  Gauss am National High Magnetic Field Laboratory in Tallahassee, Florida) der paramagnetische Term das Wasserstoffatom nur sehr wenig. Wir haben den Bohrschen Radius  $a$  und die *Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante*  $\alpha$  benutzt,

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e_0^2} \sim 5.3 \cdot 10^{-9} \text{ cm} \quad \text{und} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \sim 1/137.$$

Für ein nur leicht gestörtes Atom ist

$$\langle x^2 + y^2 \rangle \sim a^2$$

und das Verhältnis des diamagnetischen zum paramagnetischen Anteil etwa

$$\frac{(e^2/8\mu c^2) \langle x^2 + y^2 \rangle B^2}{-(e/2\mu c) \langle L_3 \rangle B} \sim \frac{e_0}{4c} \frac{a^2 B^2}{\hbar B} = \frac{\alpha}{4} \frac{B}{e_0/a^2} = 1.1 \times 10^{-10} \cdot B(\text{Gauss}). \quad (10.37)$$

Unter Laborbedingungen sind diamagnetische Effekte also sehr viel kleiner als paramagnetische Effekte. Aber auf der Oberfläche von *Neutronensternen* sollten Magnetfeldstärken von bis zu  $10^{12}$  Gauss vorhanden sein. Diese Stärke folgt theoretisch aus der magnetischen Flußerhaltung und wurde auch beobachtet (magnetische Bremsung der Rotation, Zyklotron Resonanz Linien  $\sim \mathbf{Bs}$ ).

Falls wir nun den diamagnetischen Term vernachlässigen und  $\mathbf{B}$  in die 3-Richtung legen, dann ist

$$H = H_c - \frac{e}{2\mu c} BL_3, \quad \text{wobei} \quad H_c = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - e^2/r \quad (10.38)$$

der Coulomb-Hamilton-Operator ist, dessen Eigenfunktionen  $|Elm\rangle$  wir im Ortsraum explizit kennen. Offensichtlich gilt

$$H|Elm\rangle = \left(-\frac{Ry}{n^2} + \mu_B Bm\right) |Elm\rangle = \left(-\frac{Ry}{n^2} + \hbar\omega_L m\right) |Elm\rangle, \quad (10.39)$$

wobei die Größen

$$\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2\mu c} \quad \text{und} \quad \omega_L = \frac{e_0 B}{2\mu c} \quad (10.40)$$

das *Bohrsche Magneton* und die *Larmor-Präzession* bezeichnen und

$$\mu_B B = 13.6 \text{ eV} \times 4 \times 10^{-10} \cdot B(\text{Gauss})$$

ist. Deshalb sind die Coulomb-Wellenfunktionen auch Eigenfunktionen von  $H$  mit den Energieeigenwerten

$$E_{nlm} = -\frac{Ry}{n^2} + \mu_B Bm. \quad (10.41)$$

Die Zustände mit und ohne Magnetfeld unterscheiden sich nur durch den Wert der Energien, nicht durch die Form der Eigenfunktionen. Die *äquidistante* Aufspaltung, welche die  $2\ell + 1$ -fache Entartung aufhebt und unabhängig von  $\ell$  ist, wird der *normale Zeeman-Effekt* genannt. Für Magnetfelder der Stärke  $1\text{T} \sim 10^4$  Gauss ist die Aufspaltung von etwa  $\sim 10^{-4}$  eV spektroskopisch leicht auflösbar und man findet im Magnetfeld auch eine Aufspaltung der Wasserstofflinien. Allerdings nicht die dem normalen Zeeman-Effekt (10.41) entsprechende Aufspaltung. Atome mit einer ungeraden Anzahl Elektronen haben Linienaufspaltungen die eher einer halbganzen magnetischen Quantenzahl  $m$  entsprechen. Für den Grundzustand mit  $\ell=0$  sollte sich nach der obigen Rechnung die Energie im Magnetfeld nicht ändern. Auch dies widerspricht dem Experiment. Zum Beispiel findet man eine

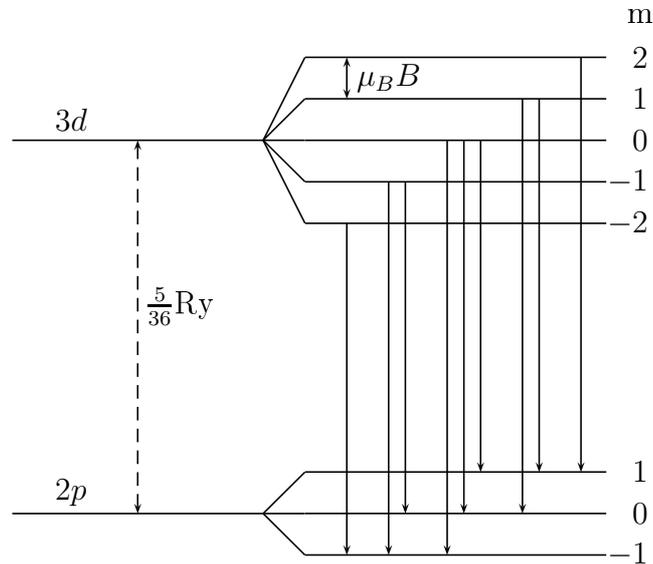


Abbildung 10.1: Die Aufspaltung der Energieniveaus durch den normalen Zeeman-Effekt ohne Spinterm.

Aufspaltung der Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms in zwei Energieniveaus.

### 10.3 Der Spin des Elektrons

Elektronen, Muonen, Protonen, Neutronen, Neutrinos und die  $\Lambda$ ,  $\Sigma$  oder  $\Xi$  Teilchen haben alle einen inneren Drehimpuls. Die experimentellen Nachweise für die Existenz dieses Spins sind zahlreich<sup>1</sup> und sind für viele bedeutende physikalische Phänomene verantwortlich. Zum Beispiel können die magnetischen Eigenschaften der ferromagnetischen Metalle nur unter Berücksichtigung des Elektronenspins erklärt werden.

Misst man die Komponente des Elektronenspins in irgend eine Richtung, so findet man nur die beiden Werte  $\pm\hbar/2$ . Der Spin wird durch einen hermiteschen Vektoroperator  $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3)$  beschrieben, dessen Komponenten die Drehimpuls-Vertauschungsregeln erfüllen,

$$[s_i, s_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}s_k. \quad (10.42)$$

Die Aussage, dass der Spin in eine beliebige Richtung  $\mathbf{n}$  nur die beiden Werte  $\pm\hbar/2$

<sup>1</sup>Man erinnere sich an den berühmten *Stern-Gerlach Versuch*.

annehmen kann bedeutet, daß  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}$  nur diese beiden Eigenwerte besitzt. Wir bezeichnen die entsprechenden orthonormalen Eigenzustände mit  $|n_\uparrow\rangle$  und  $|n_\downarrow\rangle$ :

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{s})|n_\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|n_\uparrow\rangle \quad \text{und} \quad (\mathbf{n} \cdot \mathbf{s})|n_\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|n_\downarrow\rangle.$$

Jeder Zustandsvektor kann nach den beiden Spineigenzuständen entwickelt werden,

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_\uparrow(\mathbf{x})|n_\uparrow\rangle + \psi_\downarrow(\mathbf{x})|n_\downarrow\rangle. \quad (10.43)$$

Dabei ist der Entwicklungskoeffizient  $\psi_\uparrow(\mathbf{x})$  die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, das Teilchen am Ort  $\mathbf{x}$  mit Spin  $\frac{\hbar}{2}$  in die  $\mathbf{n}$ -Richtung zu finden und  $\psi_\downarrow(\mathbf{x})$  die Amplitude dafür, das Teilchen bei  $\mathbf{x}$  mit Spin  $-\frac{\hbar}{2}$  in die  $\mathbf{n}$ -Richtung zu finden. Entsprechend ist

$$|\psi_\uparrow(\mathbf{x})|^2 + |\psi_\downarrow(\mathbf{x})|^2 = \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen am Ort  $\mathbf{x}$  zu finden.

Wir wählen als Referenzrichtung die 3-Richtung. In der Basis mit diagonalem  $s_3$  gilt

$$s_3 = \frac{\hbar}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und entsprechend hat die Wellenfunktion im Ortsraum die Darstellung

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{x}) \\ \psi_\downarrow(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2. \quad (10.44)$$

Die Wellenfunktion eines (nichtrelativistischen) Elektrons hat also 2 Komponenten und liegt im Hilbertraum  $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$  mit Skalarprodukt

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3x (\phi_\uparrow^*(\mathbf{x})\psi_\uparrow(\mathbf{x}) + \phi_\downarrow^*(\mathbf{x})\psi_\downarrow(\mathbf{x})) = \int d^3x \phi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}). \quad (10.45)$$

Die Vertauschungsregeln und die Wahl  $s_3 = \hbar\sigma_3/2$  legen die Darstellung der anderen zwei Spinoperatoren bis auf eine Phase fest. Man findet

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \quad \text{mit} \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (10.46)$$

Diese hier auftretenden *Pauli-Matrizen*  $\sigma_i$  erfüllen die Relationen

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \implies [\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k. \quad (10.47)$$

Für das weitere Vorgehen ist es angebracht die wichtigsten Eigenschaften der Pauli-Matrizen in Erinnerung zu rufen. Jede hermitesche und spurlose Matrix  $A$  ist eine reelle Linearkombination der drei hermiteschen und spurlosen Pauli-Matrizen,

$$A = \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^3 a_i \sigma_i = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{a} \in \mathbb{R}^3.$$

Es gelten die Relationen

$$\det A = -\mathbf{a}^2 \quad \text{und} \quad AB = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i(\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (10.48)$$

wobei  $B = \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  eine zweite hermitesche und spurlose Matrix ist. Für jede zweidimensionale unitäre Matrix  $U$  ist wegen  $U^\dagger = U^{-1}$  mit  $A$  auch die konjugierte Matrix  $UAU^{-1}$  hermitesch und spurlos, da sich die Spur unter zyklischer Vertauschung der Argumente nicht ändert. Also gilt für jedes  $U \in SU(2)$

$$U(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})U^{-1} = \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

wobei  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$  linear von  $\mathbf{a}$  abhängt. Da die Determinante unter Ähnlichkeitstransformationen  $A \rightarrow UAU^{-1}$  nicht ändert, folgt sofort

$$\det \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \det \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

oder mit der ersten Identität in (10.48), dass die lineare Abbildung  $\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{b}$  die Länge erhält und deshalb eine Drehung im dreidimensionalen Raum sein muss,

$$\mathbf{b} = R(U)\mathbf{a}, \quad R(U) \in SO(3). \quad (10.49)$$

Weiterhin ist die Abbildung

$$\begin{aligned} SU(2) \ni U &\longrightarrow R(U) \in SO(3) \\ U(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})U^{-1} &= (R(U)\mathbf{a}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \quad (10.50)$$

eine *Darstellung* der zweidimensionalen unitären Matrizen als Drehungen im  $\mathbb{R}^3$ . Es gelten die wichtigen Darstellungseigenschaften  $R(\mathbb{1}_2) = \mathbb{1}_3$  und  $R(U_1U_2) = R(U_1)R(U_2)$ . Der Beweis der ersten Eigenschaft ist offensichtlich und derjenige der zweiten einfach:

$$\begin{aligned} (R(U_1U_2)\mathbf{a}) \cdot \boldsymbol{\sigma} &= (U_1U_2)\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} (U_1U_2)^{-1} = U_1 (U_2\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} U_2^{-1}) U_1^{-1} \\ &= U_1 (R(U_2)\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) U_1^{-1} = R(U_1)R(U_2)\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \end{aligned}$$

Die folgende nützliche Formel gibt einen expliziten nichtlinearen Zusammenhang zwischen den Elementen von  $SU(2)$  und denjenigen von  $SO(3)$ ,

$$U(\mathbf{e}, \theta) = e^{-i\mathbf{e} \cdot \mathbf{s} \theta / \hbar} \implies R(U(\mathbf{e}, \theta)) = e^{\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\Omega} \theta} = R(\mathbf{e}, \theta). \quad (10.51)$$

Nach diesen Vorbereitungen ist der Zusammenhang zwischen Drehungen im Raum und Drehungen des Spins schnell hergestellt. Wir werden dazu die Eigenzustände von  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}$  mit denjenigen von  $\mathbf{m} \cdot \mathbf{s}$  in Verbindung bringen. Es seien also  $|n_\uparrow\rangle$  und  $|m_\uparrow\rangle$  die Eigenzustände der Spinoperatoren in Richtung von  $\mathbf{n}$  und  $\mathbf{m}$ ,

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{s})|n_\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hbar |n_\uparrow\rangle \quad \text{und} \quad (\mathbf{m} \cdot \mathbf{s})|m_\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hbar |m_\uparrow\rangle \quad (10.52)$$

Die Einheitsvektoren  $\mathbf{n}$  und  $\mathbf{m}$  können mit einer Drehung  $R$  verbunden werden,  $\mathbf{m} = R\mathbf{n}$ . Transformieren wir beide Seiten der ersten Eigenwertgleichung mit einer unitären Matrix  $U$  und benutzen (10.50), so folgt mit  $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$

$$U\mathbf{n} \cdot \mathbf{s} \underbrace{U^{-1}U}_1 |n_\uparrow\rangle = \underbrace{R(U)\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}}_{\mathbf{m}} U |n_\uparrow\rangle = (\mathbf{m} \cdot \mathbf{s})U |n_\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hbar U |n_\uparrow\rangle.$$

Also ist  $U|n_\uparrow\rangle$  der gesuchte Eigenzustand  $|m_\uparrow\rangle$  des Spins in Richtung von  $\mathbf{m} = R\mathbf{n}$ . Analog ist  $U|n_\downarrow\rangle$  der Eigenzustand  $|m_\downarrow\rangle$  von  $\mathbf{s}$  in Richtung  $\mathbf{m}$ . Wir folgern, dass bei einer Raumdrehung die Wellenfunktion eines Spin- $\frac{1}{2}$  Teilchens mit  $U$  „dreht“,

$$(\Gamma(U)\psi)(\mathbf{x}) = U\psi(R^{-1}(U)\mathbf{x}), \quad (10.53)$$

wobei  $R(U)$  die oben definierte Darstellung  $SU(2) \rightarrow SO(3)$  ist. Wie man leicht nachrechnet hat die Abbildung  $U \rightarrow \Gamma(U)$  ebenfalls die Darstellungseigenschaft

$$\Gamma(U_1 U_2) = \Gamma(U_1)\Gamma(U_2), \quad \Gamma(\mathbb{1}_2) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (10.54)$$

Wegen der Erhaltung des Skalarprodukts,

$$\langle \Gamma(U)\psi | \Gamma(U)\phi \rangle = \int \psi^\dagger(R^{-1}\mathbf{x}) U^\dagger U \phi(R^{-1}\mathbf{x}) d^3x = \langle \psi | \phi \rangle, \quad (10.55)$$

ist es eine unitäre Darstellung der *quantenmechanischen Drehgruppe*  $SU(2)$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$  des nichtrelativistischen Elektrons.

Für Drehungen um die dritte Achse mit Winkel  $\theta$  sind

$$U(\mathbf{e}_3, \theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad R(\mathbf{e}_3, \theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.56)$$

Drehen wir das Bezugssystem einmal um die dritte Achse, dann ändert wegen  $R(\mathbf{e}_3, 2\pi) = \mathbb{1}_3$  und  $U(\mathbf{e}_3, 2\pi) = -\mathbb{1}_2$  die zweikomponentige Wellenfunktion (10.53) das Vorzeichen,

$$(\Gamma(2\pi\text{-Drehung um eine Achse})\psi)(\mathbf{x}) = -\psi(\mathbf{x}).$$

Wir fassen zusammen: Die Wellenfunktion des Elektrons muss gegenüber der eines spinlosen Teilchens durch eine zusätzliche Spinkoordinate  $s$  mit den zwei möglichen Werten  $\pm\frac{1}{2}$  ergänzt werden. Wählen wir den Eigenwert von  $s_3$  in (10.46), dann ist

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_{\uparrow}(\mathbf{x})|\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}(\mathbf{x})|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}.$$

Bei einer Drehung mischen die Koeffizientenfunktionen von  $\psi$  gemäß (10.53). Insbesondere wechselt die Wellenfunktion bei einer Drehung um  $2\pi$  das Vorzeichen.

**Der Gesamtdrehimpuls:** Wir folgen hier der Vorgehensweise im Kapitel über Symmetrien und setzen

$$(\Gamma(U(\mathbf{e}, \theta))\psi)(\mathbf{x}) = (e^{-i\theta J_e/\hbar}\psi)(\mathbf{x}). \quad (10.57)$$

Für ein spinloses Teilchen ist  $J_e$  der Bahndrehimpuls in Richtung  $\mathbf{e}$  und wir erwarten deshalb, dass für ein Teilchen mit Spin der hermitesche Operator  $J_e$  der Gesamtdrehimpuls in Richtung  $\mathbf{e}$  sein wird. Wir setzen in (10.53) die explizite Darstellung (10.51) ein und finden

$$J_e = i\hbar \frac{d}{d\theta} (U(\mathbf{e}, \theta) \psi(R^{-1}(\mathbf{e}, \theta)\mathbf{x})) \Big|_{\theta=0} = \mathbf{e} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{e} \cdot \mathbf{L}.$$

Im letzten Schritt machten wir von (8.48) Gebrauch. Die Drehungen der Wellenfunktion eines Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchens um die Achse  $\mathbf{e}$  werden durch den Operator  $J_e = \mathbf{e} \cdot \mathbf{J}$  erzeugt, wobei  $\mathbf{J}$  die Summe von Bahndrehimpuls und Spin des Teilchens ist,

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s} \quad (10.58)$$

Da  $\Gamma(U)$  eine Darstellung von  $SU(2)$  ist, müssen die Komponenten  $J_i$  des Gesamtdrehim-

pulses  $\mathbf{J}$  die üblichen Drehimpuls-Vertauschungsregeln erfüllen,

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k. \quad (10.59)$$

Dies folgt natürlich sofort aus der Tatsache das die  $L_i$  und  $s_i$  diese Kommutationrelationen erfüllen und die  $L_i$  mit den  $s_j$  vertauschen. Die Formeln für spinlose Teilchen verallgemeinern sich auf Teilchen mit Spin, wenn wir jeweils den Bahndrehimpuls  $\mathbf{L}$  durch den Gesamtdrehimpuls  $\mathbf{J}$  ersetzen. Vektoroperatoren sind nun bezüglich  $\mathbf{J}$  definiert. Zum Beispiel ist

$$(\Gamma(U^{-1})\mathbf{s}\Gamma(U)\psi)(\mathbf{x}) = (U^{-1}\mathbf{s}U)\psi(\mathbf{x}) \stackrel{(10.50)}{=} (R(U)\mathbf{s})\psi(\mathbf{x})$$

woraus folgt

$$\Gamma(U^{-1})\mathbf{s}\Gamma(U) = R(U)\mathbf{s} \quad (10.60)$$

und deshalb ist  $\mathbf{s}$  wie erwartet ein Vektoroperator. Weitere Vektoroperatoren sind zum Beispiel  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{J}$ . Folglich sind  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{s}$ ,  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}$ ,  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$  oder  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  skalare Operatoren, die mit  $\mathbf{J}$  vertauschen.

## 10.4 Magnetische Momente

Ein klassisches Teilchen mit Ladung  $e$ , Masse  $\mu$  und Bahndrehimpuls  $\mathbf{L}$  hat ein mit der Bahnbewegung einhergehendes magnetisches Moment (siehe (10.35))

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{Bahn}} = \frac{e}{2\mu c}\mathbf{L}.$$

Wie wir gesehen haben, gilt dies auch in der Quantenmechanik. Das mit dem Spin eines Teilchens assoziierte magnetische Moment hat die Form

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2\mu c}g\mathbf{s}, \quad (10.61)$$

wobei  $g$  der sogenannte *Lande-Faktor* ist. Die Lande-Faktoren für das Elektron, Proton und Neutron sind etwa

$$g_e = 2, \quad g_p = 5.59, \quad g_n = -3.83, \quad (10.62)$$

wobei beim Neutron die positive Ladung des Protons in die Formel (10.61) eingesetzt wird. Wegen seiner negativen Ladung hat das Elektron ein dem Spin entgegengerichtetes

Moment. Da das Proton etwa 1836-mal schwerer als das Elektron ist, ist sein magnetisches Moment etwa 1000-mal kleiner als dasjenige des Elektrons. Das magnetische Moment des Elektrons ist doppelt so groß wie man klassisch erwarten würde, und der Lande-Faktor  $g = 2$  erschwert eine naive Erklärung des magnetischen Moments durch eine Eigenrotation; denn für diese bekommt man bei Proportionalität von Massen- und Ladungsdichte den Faktor 1. Der ungewöhnliche Faktor  $g_e = 2$  gestattet jedoch eine Deutung der magnetomechanischen Anomalie der Ferromagneten beim *Einstein-de Haas-Effekt*. Da bei ihm der Faktor  $g = 2$  experimentell gefunden wurde, muss man annehmen, daß der Ferromagnetismus nicht von den Bahn-, sondern von den Spin-Momenten herrührt. Übrigens, die einzigen mir bekannten „klassischen“ Objekte, die  $g = 2$  haben, sind geladene rotierende schwarze Löcher.

Die Energie eines magnetischen Momentes in einem Magnetfeld ist  $-\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu}$ , und deshalb ist der Hamilton-Operator eines geladenen Teilchens mit Spin und Lande-Faktor  $g$  gleich

$$H = \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\pi}^2 - \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu}_{\text{spin}} + \varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{eg}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{s} + \varphi(\mathbf{x}). \quad (10.63)$$

Beachte, dass der Hamilton-Operator auf 2-komponentige Wellenfunktionen im Hilbertraum  $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$  wirkt. Die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = \left( \left( \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\pi}^2 + \varphi(\mathbf{x}) \right) \mathbb{1}_2 - \frac{eg}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{s} \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (10.64)$$

heißt *Pauli-Gleichung* und sie bestimmt die zeitliche Entwicklung eines Zustandvektors.

Für konstante Magnetfelder vereinfacht sich der Hamilton-Operator (10.63) für ein Teilchen mit Spin im äußeren Feld bei Vernachlässigung des diamagnetischen Effektes zu

$$H = H_0 - \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + g\mathbf{s}). \quad (10.65)$$

Wir legen das Magnetfeld wieder in die 3-Richtung, so dass  $H$  nur die 3-Komponenten des Bahndrehimpulses und Spin enthält. Wir können nun  $\mathbf{L}^2, L_3, s_3$  gleichzeitig diagonalisieren, da diese untereinander und mit  $H$  kommutieren. Die Eigenwerte von  $s_3$  sind  $\pm \frac{1}{2}\hbar$ :

$$s_3 \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad s_3 \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}.$$

Wählen wir für  $\psi_{\uparrow}$  und  $\psi_{\downarrow}$  die Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms, so finden wir

$$H|nlms_3\rangle = E_{nlms_3}|nlms_3\rangle, \quad E_{nlms_3} = -\frac{Ry}{n^2} + \mu_B B(m + gs_3/\hbar), \quad (10.66)$$

mit  $s_3 = \frac{1}{2}$  für  $\psi_\uparrow$  und  $s_3 = -\frac{1}{2}$  für  $\psi_\downarrow$ . Wegen  $g \approx 2$  ist jeder  $m$ -Eigenwert jetzt doppelt aufgespalten. Die Energie ändert sich abhängig von der Richtung des Elektronenspins. Zum Beispiel, für  $\ell=1$  findet man 6 Zustände statt 3 wie es ohne Spin wären. Allerdings

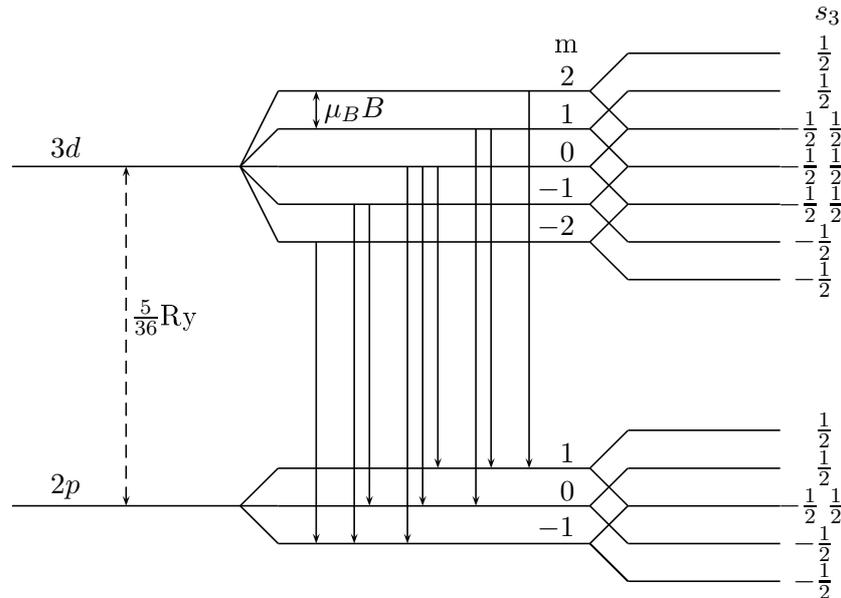


Abbildung 10.2: Die Aufspaltung der Energieniveaus durch den Paschen-Back-Effekt.

haben die Zustände mit  $(m, s_3) = (1, -\frac{1}{2})$  und  $(-1, \frac{1}{2})$  dieselbe Energie, so dass man nur 5 verschiedene Energieniveaus findet, wie in der Abbildung (10.2) angedeutet.

Damit man das eben besprochene Level-Schema beobachtet, muss die Wechselwirkung mit dem  $\mathbf{B}$  Feld stärker als die *Spin-Bahn Kopplung* sein, einem relativistischen Effekt, den wir später besprechen werden. Das heißt, die magnetischen Felder müssen genügend groß sein,  $B \geq 10^5$  Gauss. Ist die magnetische Wechselwirkung mit dem äußeren Feld stärker als die Spin-Bahn-Wechselwirkung wie in (10.65) angenommen, dann heißt die einfache Aufspaltung (10.66) *Paschen-Back-Effekt*.

## 10.5 Spinpräzession

Als nächstes besprechen wir die Spinpräzession im Magnetfeld. Der Hamilton-Operator eines Spins im *homogenen*  $\mathbf{B}$ -Feld, bei Vernachlässigung der Bahnbewegung, lautet

$$H_{\text{spin}} = -\frac{eg}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{s}. \quad (10.67)$$

Im Heisenberg-Bild folgt die Spinbewegung aus der Heisenberg-Gleichung für den Spinoperator,

$$\frac{ds_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H_{\text{spin}}, s_i] = -\frac{i}{\hbar} \frac{eg}{2\mu c} [B_j s_j, s_i] = \frac{eg}{2\mu c} \epsilon_{jik} B_j s_k$$

beziehungsweise aus

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = -\frac{eg}{2\mu c} \mathbf{B} \wedge \mathbf{s} = -\frac{egB}{2\mu c} \mathbf{e} \wedge \mathbf{s}, \quad \mathbf{B} = B\mathbf{e}. \quad (10.68)$$

Auf der rechten Seite steht eine infinitesimale Drehung um die Magnetfeldachse  $\mathbf{e}$ . Deshalb ergibt die Zeitintegration

$$\mathbf{s}(t) = R(\mathbf{e}, -\omega_0 t) \mathbf{s}(0), \quad \text{mit Kreisfrequenz} \quad \omega_0 = \frac{geB}{2\mu c} = -\frac{g}{2}\omega_c \quad (10.69)$$

Für *Elektronen* und *Muonen* ist  $g \sim 2$  und deshalb  $\omega_0$  dem Betrage nach beinahe gleich der Zyklotronfrequenz. Für ein Magnetfeld in 3-Richtung ist

$$R(\mathbf{e}_3, \frac{1}{2}g\omega_c t) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2}g\omega_c t) & -\sin(\frac{1}{2}g\omega_c t) & 0 \\ \sin(\frac{1}{2}g\omega_c t) & \cos(\frac{1}{2}g\omega_c t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Zeigt der Elektronenspin zur Zeit  $t=0$  in 1-Richtung,

$$\langle S_1(0) \rangle = \frac{\hbar}{2}, \quad \langle S_2(0) \rangle = \langle S_3(0) \rangle = 0.$$

dann ergibt sich folgende Zeitentwicklung für die mittleren Spinkomponenten

$$\langle S_1(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\frac{1}{2}g\omega_c t), \quad \langle S_2(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\frac{1}{2}g\omega_c t), \quad \langle S_3(t) \rangle = 0. \quad (10.70)$$

Der Erwartungswert dreht also für die negativ geladenen Elektronen und Muonen im positiven Sinn in der 12 Ebene.

Dieser Effekt wird nun ausgenutzt, um das magnetische Moment des Myons

$$(1.001165924 \pm 0.000000009) \frac{e\hbar}{2m_\mu c}$$

über den schwachen Zerfall des Myons in ein Elektron und ein Neutrino paar,

$$\mu \longrightarrow e + \nu_\mu + \bar{\nu}_e,$$

präzise zu bestimmen.

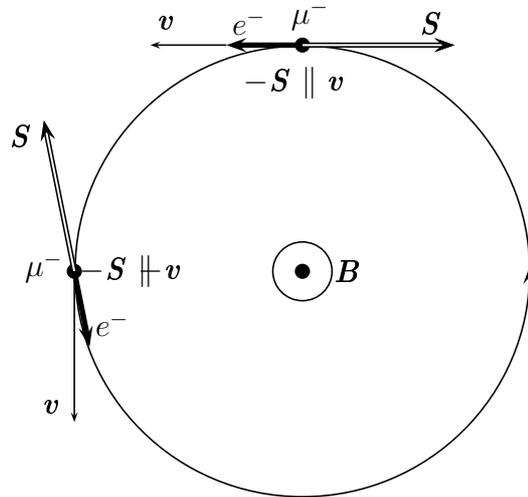


Abbildung 10.3: Bestimmung des anomalen magnetischen Moments von Muonen.

Dazu präpariert man einen Strahl spinpolarisierter Muonen mit einer ihrer *Geschwindigkeit entgegengesetzten Polarisation* und schießt diesen in ein Gebiet mit konstantem Magnetfeld. Die Elektronen werden (im Schwerpunktsystem) bei dem Zerfall vorwiegend in die dem Spin der Muonen entgegengesetzte Richtung emittiert, wie in Abbildung (10.3) gezeigt. Wegen

$$\mathbf{s}_{\perp}(t) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2}g\omega_c t) & -\sin(\frac{1}{2}g\omega_c t) \\ \sin(\frac{1}{2}g\omega_c t) & \cos(\frac{1}{2}g\omega_c t) \end{pmatrix} \mathbf{s}_{\perp}(0)$$

und

$$\mathbf{v}_{\perp}(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_c t) & -\sin(\omega_c t) \\ \sin(\omega_c t) & \cos(\omega_c t) \end{pmatrix} \mathbf{v}_{\perp}(0)$$

würden die Elektronen immer in Strahlrichtung emittiert, falls der Lande-Faktor der Muonen genau 2 wäre. Deshalb ist der Winkel zwischen dem Muonenstrahl und den emittierten Elektronen ein direktes Maß für  $g-2$  der Muonen.

## 10.6 Lie Gruppen und Algebren

Wir haben schon gesehen, dass Symmetrien in der Quantenmechanik und allgemeiner in der Physik eine herausragende Bedeutung haben. Wir wollen deshalb die dabei immer

wieder auftretenden Darstellungen von Symmetriegruppen etwas näher untersuchen. Sei also  $G$  eine *Lie-Gruppe*. Die Elemente  $g \in G$  könnten z.B. Verschiebungen, Drehungen im Raum, quantenmechanische Drehungen von Spinoren oder Lorentz-Transformationen sein. Sei  $g(s)$  eine Kurve in  $G$  welche für  $s = 0$  durch die Identität geht,  $g(0) = e$ . Die *Lie-Algebra*  $\mathcal{G}$  der Gruppe  $G$  enthält alle möglichen infinitesimalen Erzeugenden

$$A = \left. \frac{d}{ds} g(s) \right|_{s=0} = \dot{g}(0). \quad (10.71)$$

Zum Beispiel, für Drehungen im Raum ist  $R^t(s)R(s) = \mathbb{1}_3$  und damit

$$\left. \frac{d}{ds} (R^t(s)R(s)) \right|_{s=0} = \dot{R}^t(0) + \dot{R}(0) \equiv \Omega^t + \Omega = 0.$$

Die infinitesimalen Erzeugenden von  $SO(3)$  sind also die schiefssymmetrischen reellen Matrizen. Wegen

$$\left. \frac{d}{ds} (g_1(\alpha_1 s)g_2(\alpha_2 s)) \right|_{s=0} = \alpha_1 \dot{g}_1(0) + \alpha_2 \dot{g}_2(0) = \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2$$

ist  $\mathcal{G}$  ein *linearer Raum*. Da mit  $g_2(s)$  auch die konjugierte Kurve  $g_1 g_2(s) g_1^{-1}$  für  $s = 0$  durch die Gruppenidentität geht, ist mit  $A_2$  auch

$$\left. \frac{d}{ds} (g_1 g_2(s) g_1^{-1}) \right|_{s=0} = g_1 A_2 g_1^{-1}$$

Element der Lie-Algebra. Die Abbildung  $A \longrightarrow g A g^{-1}$  heißt *adjungierte Darstellung*, welche immer existiert. Da  $\mathcal{G}$  ein Vektorraum ist, muss

$$\left. \frac{d}{ds} (g_1(s) A_2 g_1^{-1}(s)) \right|_{s=0} = [A_1, A_2]$$

ebenfalls in  $\mathcal{G}$  liegen. Damit ist  $\mathcal{G}$  ein Vektorraum mit antisymmetrischem Produkt, dem sogenannten Kommutator,

$$A_i \in \mathcal{G} \longrightarrow \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 \in \mathcal{G}, \quad [A_1, A_2] = -[A_2, A_1] \in \mathcal{G}. \quad (10.72)$$

Damit ist  $\mathcal{G}$  eine *Lie-Algebra*. Wählen wir darin eine Basis  $A_i$ , so definieren die Kommutatoren der Basiselemente die *Strukturkonstanten*

$$[A_i, A_j] = f_{ijk} A_k \quad (10.73)$$

Für einparametrische Untergruppen, für die  $g(s_1 + s_2) = g(s_1)g(s_2)$  gilt, folgt nun

$$\frac{d}{ds}g(s) = \frac{d}{d\epsilon}g(\epsilon + s)|_{\epsilon=0} = \frac{d}{d\epsilon}g(\epsilon)|_{\epsilon=0}g(s) = Ag(s)$$

oder nach Integration bezüglich  $s$  mit der Anfangsbedingung  $g(0) = e$  die Lösung

$$g(s) = e^{sA}. \quad (10.74)$$

Die Abbildung  $A \rightarrow g(s)$  ist die *Exponentialabbildung*. Es sei nun ein quantenmechanischer „Zustand“  $|\psi\rangle$  gegeben. Die möglichen Symmetrien bilden eine Gruppe  $G$  und der mit  $g \in G$  transformierte Zustand sei  $\Gamma(g)|\psi\rangle$ . Nach dem *Wignerschen Satz* müssen Symmetrietransformationen  $\Gamma(g)$  (anti)linear und (anti)unitär sein,

$$\langle \Gamma(g)\phi | \Gamma(g)\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \quad (10.75)$$

und  $G$  stark-stetig darstellen,

$$\Gamma(e) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad \Gamma(g_1 g_2) = \Gamma(g_1)\Gamma(g_2). \quad (10.76)$$

Deshalb ist die Zuordnung

$$G \ni g \longrightarrow \Gamma(g) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$$

eine (stark stetige) unitäre Darstellung der Gruppe  $G$  auf dem Hilbertraum.

Wie werden nun die infinitesimalen Symmetrietransformationen dargestellt? Die infinitesimale Transformation zu  $g(s)$  ist  $A$  in (10.71). Entsprechend ist die infinitesimale Transformation zu  $\Gamma(g(s))$  mit  $g(s) = \exp(sA)$  gleich

$$\frac{d}{ds}\Gamma(e^{sA})|_{s=0} \equiv \Gamma_*(A). \quad (10.77)$$

Da die Operatoren  $\Gamma(g)$  unitär sind, gilt für jede Kurve  $g(s)$  in der Gruppe

$$\Gamma(g(s))\Gamma^\dagger(g(s)) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}.$$

Die Ableitung dieser Identität nach  $s$  an der Stelle  $s=0$  ergibt dann

$$\Gamma_*(A) + \Gamma_*^\dagger(A) = 0, \quad (10.78)$$

was bedeutet, dass die infinitesimalen Erzeugenden  $\Gamma_*(A)$  antihermitesch sind. Genauso wie jedes  $A$  eine einparametrische Untergruppe erzeugt, siehe (10.74), erzeugt jede (antiher-

mitesche) Erzeugende  $\Gamma_*(A)$  eine einparametrische Gruppe von unitären Operatoren. Mit Hilfe der Darstellungseigenschaft (10.76) ergibt sich

$$\frac{d}{ds}\Gamma(e^{sA}) \stackrel{s \rightarrow \epsilon+s}{=} \frac{d}{d\epsilon}\Gamma(e^{\epsilon A}) \Big|_{\epsilon=0} \Gamma(e^{sA}) = \Gamma_*(A)\Gamma(e^{sA})$$

woraus nach einer Integration bezüglich  $s$  folgt, dass

$$\Gamma(e^{sA}) = e^{s\Gamma_*(A)}. \quad (10.79)$$

Wegen  $\Gamma(g_1g_2) = \Gamma(g_1)\Gamma(g_2)$  sieht man sofort, daß  $\Gamma_*$  eine lineare Abbildung ist. Um zu sehen, daß dies ein Lie-Algebra-Homomorphismus ist, benutzt man wiederum die Darstellungseigenschaft von  $\Gamma$ ,

$$\Gamma(g_1g_2(s)g_1^{-1}) = \Gamma(g_1)\Gamma(g_2(s))\Gamma(g_1^{-1})$$

aus welcher durch Ableitung nach  $s$  an der Stelle  $s=0$  folgt

$$\Gamma_*(g_1A_2g_1^{-1}) = \Gamma(g_1)\Gamma_*(A_2)\Gamma(g_1^{-1}).$$

Mit  $g_1 = g_1(s)$  und nochmals ableiten nach  $s$  erhalten wir

$$\Gamma_*([A_1, A_2]) = [\Gamma_*(A_1), \Gamma_*(A_2)]. \quad (10.80)$$

Wir wollen untersuchen, was diese Beziehungen für  $G = SO(3)$  bedeuten. Wir betrachten die infinitesimalen Drehungen um die Achsen  $\boldsymbol{\theta}$  und  $\boldsymbol{\eta}$ :

$$\Omega_{\boldsymbol{\theta}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\theta} \wedge \boldsymbol{x} \quad \text{und} \quad \Omega_{\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\eta} \wedge \boldsymbol{x}$$

Es folgt für den Kommutator zweier infinitesimaler Drehungen

$$[\Omega_{\boldsymbol{\theta}}, \Omega_{\boldsymbol{\eta}}]\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\theta} \wedge (\boldsymbol{\eta} \wedge \boldsymbol{x}) - \boldsymbol{\eta} \wedge (\boldsymbol{\theta} \wedge \boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{\theta} \wedge \boldsymbol{\eta}) \wedge \boldsymbol{x} = \Omega_{\boldsymbol{\theta} \wedge \boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{x}.$$

Das Bild des Kommutator zweier kleiner Drehungen ist gleich dem Kommutator der Bilder,

$$\Gamma_*([\Omega_{\boldsymbol{\theta}}, \Omega_{\boldsymbol{\eta}}]) = \Gamma_*(\Omega_{\boldsymbol{\theta} \wedge \boldsymbol{\eta}}) = [\Gamma_*(\Omega_{\boldsymbol{\theta}}), \Gamma_*(\Omega_{\boldsymbol{\eta}})], \quad (10.81)$$

in Einklang mit der allgemeinen Formel (10.80).