

9 Teilchen im Elektromagnetischen Feld

Im folgenden betrachten wir ein quantenmechanisches Teilchen in einem als klassisch gedachten elektromagnetischen Feld. Zwar müssen im Prinzip auch die Anregungen des elektromagnetischen Feldes quantisiert werden, bei hohen Besetzungszahlen darf man aber in guter Näherung annehmen, dass eine klassische Beschreibung ausreichend ist.

Das elektromagnetische Feld wird durch ein skalares und ein Vektorpotential charakterisiert

$$\varphi = \varphi(\vec{x}, t), \quad \vec{A} = \vec{A}(\vec{x}, t) \quad (91)$$

In der QM sind die Orte allerdings Operatoren. Über den Hamilton-Formalismus lässt sich ableiten, wie φ und A in den QM-Formalismus eingebaut werden können. Die klassische Bewegungsgleichung eines geladenen Teilchens im Feld ist die Lorentz-Gleichung:

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = e \left(\vec{E}(\vec{x}, t) + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}(\vec{x}, t) \right) \quad (92)$$

mit Geschwindigkeit $\vec{v} = \dot{\vec{x}} = \frac{d\vec{x}}{dt}$ und

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad \text{und} \quad \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \psi. \quad (9.3)$$

(9.2) folgt aus dem Wirkungsprinzip mit Lagrange-~~Funktion~~ Funktion

$$L = \frac{\mu}{2} \vec{v}^2 + \frac{e}{c} \vec{v} \cdot \vec{A} - e\psi. \quad (9.4)$$

Um die zugehörige Hamilton-Funktion zu konstruieren, führen wir den kanonischen Impuls

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} \Rightarrow \vec{p} = \mu \vec{v} + \frac{e}{c} \vec{A} \quad (9.5)$$

ein. Dieser ist um das Vektorpotential verschieden vom kinetischen Impuls

$$\vec{\pi} := \mu \vec{v} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}. \quad (9.6)$$

Die Hamilton-Funktion folgt wie üblich aus

$$\begin{aligned} H &= \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L = \vec{p} \cdot \vec{v} - \frac{\mu}{2} \vec{v}^2 - \frac{e}{c} \vec{v} \cdot \vec{A} + e\psi \\ &= \vec{v} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) - \frac{\mu}{2} \vec{v}^2 + e\psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow H &= \frac{1}{\mu} \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} - \frac{1}{2\mu} \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} + e\psi \\
 &= \frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\psi \equiv \frac{1}{2\mu} \vec{\pi}^2 + e\psi \quad (9.7)
 \end{aligned}$$

In der Hamilton-Funktion tauchen also Produkte der Form $\vec{p} \cdot \vec{A}$, $\vec{A} \cdot \vec{p}$ auf. Während klassisch die Reihenfolge keine Rolle spielt, ist sie in der QM wegen Inkompatibilität von $\vec{p}$ und $\vec{A}(\vec{x})$ wichtig. Damit H hermitesch bleibt, muss die richtige Reihenfolge:

$$H = \frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\psi \equiv \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e}{c} \left(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} \right) + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 + e\psi \quad (9.8)$$

tauchen (und nicht $2\vec{p} \cdot \vec{A}$ oder $2\vec{A} \cdot \vec{p}$).

Als erste wichtige Beobachtung halten wir fest, dass in der QM die kinetischen Impulse komponentenweise nicht vertauschen:

$$[\pi_i, \pi_j] = [p_i - \frac{e}{c} A_i, p_j - \frac{e}{c} A_j] = -\frac{e}{c} ([A_i, p_j] + [p_i, A_j])$$

$$\Rightarrow [\pi_i, \pi_j] = -\frac{e}{c} \hbar (i \partial_j A_i - i \partial_i A_j) \\ = i \hbar \frac{e}{c} F_{ij} = i \hbar \frac{e}{c} \varepsilon_{ijk} B_k. \quad (9.9)$$

Die Stärke des Magnetfeldes ist also ein Maß für die Nichtvertauschbarkeit.

9.2 Eichtransformationen

Die Darstellung des Feldes $\vec{E}$ und $\vec{B}$ durch das skalare und das Vektorpotential φ und $\vec{A}$, die sogenannten Eichpotentiale, ist nicht eindeutig.

$\vec{E}$ und $\vec{B}$ sind invariant unter

$$\varphi \rightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda \quad (9.15)$$

mit $\Lambda = \Lambda(\vec{x}, t)$, denn

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \rightarrow -\vec{\nabla} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \Lambda = \vec{E} \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} \Rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{A} + \underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \Lambda}_{=0} = \vec{B} \end{aligned} \quad (9.16)$$

für reguläre $\Lambda(\vec{x}, t)$. Diese Transformationen sind Eichtransformationen, die die Physik invariant lassen. Da $\Lambda = \Lambda(\vec{x}, t)$, handelt es sich um eine lokale Symmetrietransformation.

Da die Koordinaten $\vec{x}$ und Geschwindigkeiten $\dot{\vec{x}} = \vec{v}$ durch die Lorentz-Gleichung bestimmt sind, in der nur die Felder $\vec{E}$ und $\vec{B}$ auftauchen,

sind $\vec{x}$ und $\vec{v}$, und damit auch der kinetische Impuls $\vec{\pi} = m\vec{v}$, eichinvariant. Damit folgt zwingend, dass der kanonische Impuls

$$\vec{p} = \vec{\pi} + \frac{e}{c} \vec{A} \rightarrow \vec{\pi} + \frac{e}{c} \vec{A} + \frac{e}{c} \vec{\nabla} \Lambda \quad (9.17)$$

nicht eichinvariant ist.

Alle diese Betrachtungen gelten bereits klassisch. Quantenmechanisch erwarten wir, dass die Korrespondenz zur klassischen Mechanik verlangt, dass die Erwartungswerte $\langle \vec{x} \rangle$ und $\langle \vec{\pi} \rangle$ eichinvariant sind, und damit

$$\langle \vec{x} \rangle \equiv \langle \psi | \vec{x} | \psi \rangle = \langle \tilde{\psi} | \vec{x} | \tilde{\psi} \rangle \quad (9.18)$$

$$\langle \vec{\pi} \rangle \equiv \langle \psi | \vec{\pi} | \psi \rangle = \langle \tilde{\psi} | \vec{\pi} | \tilde{\psi} \rangle,$$

wobei wir zugelassen haben, dass sich die Zustände $|\psi\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}\rangle$ unter Eichtransformationen ändern können. Da die Eichtrasfos eine Symmetrietransfo sind, lassen

sie sich durch einen unitären Operator darstellen,

$$|\hat{\psi}\rangle = \mathcal{G} |\psi\rangle, \quad \mathcal{G}^\dagger = \mathcal{G}^{-1}, \quad (9.19)$$

$$\Rightarrow \langle \hat{\psi} | \hat{\psi} \rangle = \langle \psi | \psi \rangle.$$

Damit ist die Invarianzeigenschaft (9.18) erfüllt, falls

$$\mathcal{G}^\dagger \vec{x} \mathcal{G} = \vec{x}$$

und

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} = \mathcal{G}^\dagger \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} - \frac{e}{c} \vec{\nabla} \Lambda \right) \mathcal{G}. \quad (9.20)$$

Beide Bedingungen werden erfüllt durch

$$\mathcal{G} = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\vec{x}, t)\right), \quad (9.21)$$

denn $[\mathcal{G}, \vec{x}] = 0$ (c.f. (9.20)) und

$$\begin{aligned} \underline{\mathcal{G}^\dagger \vec{p} \mathcal{G}} &= e^{-\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\vec{x}, t)} \vec{p} e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\vec{x}, t)} = \vec{p} + e^{-\frac{ie}{\hbar c} \Lambda} \left[\vec{p}, e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda} \right] \\ &= \vec{p} - i\hbar e^{-\frac{ie}{\hbar c} \Lambda} \vec{\nabla} e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda} = \underline{\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{\nabla} \Lambda}, \quad (9.22) \end{aligned}$$

so dass (9.20) erfüllt ist. D.h. der Zusatzterm, der

in (9.22) durch die Eich-Nichtinvarianz von $\vec{p}$ entsteht, kündigt sich genau gegen den Transformationskern von $\vec{A}$.

Somit implementiert (9.21) die Invarianz der Quantenmechanik unter Eichtransformationen, die lokale Phasentransformationen der Wellenfunktionen bedeuten. Diese Invarianz zeigt sich auch an der Schrödinger-Gleichung,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = H |\psi, t\rangle = \left(\frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + e\varphi \right) |\psi, t\rangle. \quad (9.23)$$

Die eichtransformierte Schrödinger-Gleichung lautet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}, t\rangle = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} - \frac{e}{c} \vec{\nabla} \Lambda \right)^2 + e\varphi - \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda \right) |\tilde{\psi}, t\rangle \quad (9.24)$$

Mit

$$|\tilde{\psi}, t\rangle = e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\vec{x}, t)} |\psi, t\rangle \quad (9.25)$$

geht (9.24) in der Tat in (9.23) über, wenn wir (9.22) zweimal verwenden.

Im Ortsraum gilt im übrigen

$$\tilde{\psi}(\vec{x}', t) = e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\vec{x}', t)} \psi(\vec{x}', t). \quad (9.26)$$

Dass der kanonische Impuls nicht eichinvariant ist, hängt zusammen mit der Eigenschaft, dass $\vec{p}$ die Erzeugende von Translationen ist. Da Translationen die Wellenfunktionen räumlich verschieben, Eichtransformationen an verschiedenen Orten ^{aber} verschieden aussehen können, kann die Erzeugende nicht invariant unter Eichtransformationen sein.

9.3 Elektronen im Magnetfeld

Für die Bewegung eines geladenen Teilchens im Magnetfeld bei $\vec{E} = 0$ ist es bequem, die Eichinvarianz auszunutzen und $\varphi = 0$ zu setzen (Weyl-Eichung). Der Hamilton-Operator reduziert sich dann auf

$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2. \quad (9.27)$$

Wir arbeiten im Folgenden im Heisenberg-Bild, in welchem die Heisenberg-Operatoren folgende Bewegungsgleichungen erfüllen:

$$\ddot{\vec{x}} = -\frac{i}{\hbar} [\vec{x}, H] = -\frac{i}{\hbar} [\vec{x}, \frac{\vec{\pi}^2}{2\mu}] = \frac{1}{\mu} \vec{\pi} \quad (9.28)$$

$$\dot{\vec{\pi}} = -\frac{i}{\hbar} [\vec{\pi}, H] = \frac{e}{2\mu c} (\vec{\pi} \times \vec{B} - \vec{B} \times \vec{\pi}) .$$

Diese Bewegungsgleichungen entsprechen der Lorentz-Gleichung mit symmetrisierter $\vec{\pi}$, $\vec{B}$ -Abhängigkeit:

$$\mu \ddot{\vec{x}} = \frac{e}{2c} (\dot{\vec{x}} \times \vec{B} - \vec{B} \times \dot{\vec{x}}) . \quad (9.29)$$

Wir beschränken uns nun auf ein konstantes homogenes $\vec{B}$ -Feld in Richtung z : $\vec{B} = B \hat{e}$, in dem sich ein Elektron mit Ladung $e = -e_0 < 0$ bewegt. Die Bewegungsgleichungen reduzieren sich damit auf

$$\mu \ddot{\vec{x}} = \vec{\pi} , \quad \dot{\vec{\pi}} = \omega_c \hat{e} \times \vec{\pi} \quad (9.30)$$

mit der Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{e_0 B}{\mu c} \simeq 2\pi \cdot 2,8 \frac{B}{[\text{Gauss}]} \cdot \text{MHz} . \quad (9.31)$$

Integration der π -Gleichung liefert

$$\vec{\pi}(t) = \vec{\pi}_{0||} - \hat{e} \times (\hat{e} \times \vec{\pi}_0) \cos \omega_c t + \hat{e} \times \vec{\pi}_0 \sin \omega_c t, \quad (9.32)$$

mit der Anfangsbedingung $\vec{\pi}(0) \equiv \vec{\pi}_0$ und

$\vec{\pi}_{0||} := \hat{e}(\hat{e} \cdot \vec{\pi}_0)$ der Komponente des Anfangsimpulses in Richtung des Magnetfeldes. Die Geschwindigkeit $\vec{v}_|| = \frac{1}{\mu} \vec{\pi}_{||}$ ist zeitunabhängig, d.h. es gibt

keine Beschleunigung in Magnetfeldrichtung. Einsetzen von (9.32) in die $\vec{x}$ -Gleichung von (9.30) und Integration liefert

$$\vec{x}(t) = \vec{X} + \vec{v}_{0||} t + \frac{1}{\omega_c} \hat{e} \times (\hat{e} \times \vec{v}_0) \sin \omega_c t + \frac{1}{\omega_c} \hat{e} \times \vec{v}_0 \cos \omega_c t, \quad (9.33)$$

wobei die letzten beiden Terme eine Rotation um die Magnetfeldachse beschreiben. Der Ortsoperator im Heisenberg-Bild durchläuft also eine Spiralbahn auf der Oberfläche eines Zylinders mit Symmetrieachse in $\vec{B}$ -Richtung durch $\vec{X}$ mit Radius

$$r = \frac{1}{\omega_c} |\hat{e} \times \langle \vec{v}_0 \rangle|. \quad (9.34)$$

Sei man $\vec{B} = B \hat{e}_3 = (0, 0, B)$. Dann ist

die Bewegung des Elektrons entlang $\hat{e}_3$ eine freie Bewegung, da $\dot{\pi}_3 = 0$. Betrachten wir im Folgenden daher die nicht-triviale Bewegung in der 12-Ebene, in der sich $\vec{x}(t)$ aus (9.33) reduziert auf

$$\vec{x}_\perp(t) = \vec{x}_\perp + \frac{1}{\mu\omega_c} \begin{pmatrix} \sin\omega_c t & \cos\omega_c t \\ -\cos\omega_c t & \sin\omega_c t \end{pmatrix} \vec{\pi}_\perp(0), \quad (9.35)$$

$$\vec{x}_\perp = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \text{ etc.}$$

Der Schwerpunkt der Kreisbewegung $\vec{x}_\perp$ ist bei $t=0$:

$$\vec{x}_\perp = \vec{x}_\perp(0) - \frac{1}{\mu\omega_c} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \vec{\pi}_\perp(0)$$

verknüpft mit $\vec{x}_\perp$ und $\vec{\pi}_\perp$ zum Zeitpunkt $t=0$. Die Algebra von $\vec{x}_\perp$ und $\vec{\pi}_\perp$ lautet $(\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix})$

$$[\pi_i, \pi_j] = \frac{i\hbar}{c} \varepsilon_{ijk} B_k = \frac{\hbar}{i} \mu\omega_c \varepsilon_{ij}, \quad i, j = 1, 2 \quad (9.36)$$

$$[x_i, x_j] = -\frac{1}{\mu\omega_c} [x_i(0), \varepsilon_{jkn} \pi_n(0)] - \frac{1}{\mu\omega_c} [\varepsilon_{ikn} \pi_n, x_j]$$

$$= -\frac{1}{\mu\omega_c} \varepsilon_{jkn} i\hbar \delta_{in} - \frac{1}{\mu\omega_c} \varepsilon_{ikn} (-i\hbar) \delta_{nj}$$

$$= \frac{i\hbar}{\mu\omega_c} \varepsilon_{ij} \quad (9.37)$$

sowie

$$\underline{[\pi_i, X_j]} = [\pi_i, X_j] - \frac{1}{\mu\omega_c} [\pi_i, \varepsilon_{jkl} \pi_k]$$

$$= -i\hbar \delta_{ij} - \frac{1}{\mu\omega_c} \varepsilon_{jkl} \frac{ie\hbar}{c} \underbrace{\varepsilon_{ikl} B_l}_{= \varepsilon_{ik} B}$$

$$\omega_c = \frac{e_0 B}{\mu c}$$

$$= -i\hbar \delta_{ij} + i\hbar \underbrace{\varepsilon_{jkl} \varepsilon_{ikl}}_{= \delta_{ij}} = \underline{\underline{0}} \quad (9.38)$$

Hierbei beziehen sich die Operatoren alle auf $t=0$

(die Berechnung von Kommutatoren von Operatoren zu verschiedenen Zeiten ist im Allgemeinen schwieriger.)

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

$$\Rightarrow [H_{\perp}, \vec{X}_{\perp}] = 0 \quad (9.39)$$

Es folgt das $\vec{X}_{\perp}$ eine Bewegungskonstante ist.

Interessanterweise erfüllen π_1 und π_2 eine ähnliche Algebra wie der harmonische Oszillator. Wir

erwarten also, dass $H_{\perp}$ sich mit HO Techniken

Lösen lassen sollte, d.h. die Leiteroperatoren

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega_c}} (\pi_1 - i\pi_2), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega_c}} (\pi_1 + i\pi_2) \quad (9.40)$$

erfüllen wegen (9.36) die Kommutatorregel

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad \text{und} \quad [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0. \quad (9.41)$$

Analog schreibt sich der Hamilton-Operator

$$H_\perp = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \quad (9.42)$$

so dass wir die Energieeigenwerte ablesen können

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

Diese Niveaus nennt man in diesem Kontext

Landau-Niveaus. Die Eigenfunktionen sind

damit

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} |0\rangle, \quad a|0\rangle = 0. \quad (9.43)$$

In der Ortsdarstellung gilt mit $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$

$$\pi_1 \triangleq \frac{\hbar}{i} \partial_1 - \frac{\mu\omega_c}{2} x_2', \quad \pi_2 \triangleq \frac{\hbar}{i} \partial_2 + \frac{\mu\omega_c}{2} x_1'. \quad (9.44)$$

In diesem Zusammenhang sind die komplexen Linearkombinationen

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1' + i x_2') \quad \partial_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (\partial_1 - i \partial_2) \quad (9.45)$$

$$\left(\text{so dass } \bar{z} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1' - i x_2') \quad \bar{\partial}_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (\partial_1 + i \partial_2) \right)$$

nützlich. Die Ortsdarstellung der Leiteroperatoren lautet damit

$$a = \frac{1}{2i} \left(\frac{\bar{z}}{r_0} + 2r_0 \partial_z \right), \quad a^\dagger = \frac{i}{2} \left(\frac{z}{r_0} - 2r_0 \bar{\partial}_z \right), \quad (9.46)$$

wobei wir wieder die charakteristische Längenskala r_0 eingeführt haben,

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu \omega_c}}. \quad (9.47)$$

In diesem Zusammenhang wird sie als magnetische Länge bezeichnet.

Anders als beim harmonischen Oszillator werden die Leiteroperatoren nicht über $\mathbb{R}$ ($x' \in \mathbb{R}$, $\partial_{x'}$) dargestellt, sondern über $(x_1', x_2') \in \mathbb{R}^2$.

Dadurch geht die Eindeutigkeit der Lösung der DGL. für den Grundzustand verloren:

$$a|0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{\bar{z}}{\kappa_0} + 2\kappa_0 \partial_{\bar{z}} \right) \psi_0(z, \bar{z}) = 0. \quad (9.48)$$

Die Menge der Grundzustandslösungen lässt sich schreiben als

$$\psi_0(z, \bar{z}) = f(\bar{z}) e^{-\frac{z\bar{z}}{2\kappa_0^2}}. \quad (9.49)$$

Die hochgradige Entartung des Grundzustandes zeigt sich in der Unbestimmtheit von $f(\bar{z})$.

Neben der Energie, die allein aus der Algebra der π_i bestimmt ist, gibt es allerdings noch weitere kompatible Observable, mit denen die Zustände charakterisiert werden können. Insbesondere ist $\vec{X}_\perp$ kompatibel mit H , vgl. (9.39). Da jedoch

$$[X_i, X_j] = \frac{i\hbar}{\mu\omega_c} \varepsilon_{ij} = i\kappa_0^2 \varepsilon_{ij} \quad (9.50)$$

können die beiden Schwerpunktkoordinaten nicht gleichzeitig scharf gemessen werden. Wir wählen daher

den (Abstand)² vom Ursprung als Observable:

$$\begin{aligned} \overline{X}_\perp^2 &= X_1^2 + X_2^2 = 2 \frac{1}{\sqrt{2}} (X_1 - i X_2) \frac{1}{\sqrt{2}} (X_1 + i X_2) - i \underbrace{[X_1, X_2]}_{\substack{= i \pi_0^2 \\ (9.50)}} \\ &= : 2 \pi_0^2 b^\dagger b + \pi_0^2 = 2 \pi_0^2 (b^\dagger b + \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (9.51)$$

Hier haben wir einen weiteren Satz Leiteroperatoren

$$b = \frac{1}{\sqrt{2} \pi_0} (X_1 + i X_2), \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2} \pi_0} (X_1 - i X_2)$$

mit $[b, b^\dagger] = 1$ (9.52)

eingeführt. In der komplexen Koordinatendarstellung im Ortsraum lauten diese

$$b \hat{=} \frac{1}{2} \left(\frac{z}{\pi_0} + 2 \pi_0 \bar{\partial}_z \right), \quad b^\dagger \hat{=} \frac{1}{2} \left(\frac{\bar{z}}{\pi_0} - 2 \pi_0 \partial_z \right). \quad (9.53)$$

Da Schwerpunkt und kinetischer Impuls vertauschen,

$[X_i, \pi_j] = 0$, vertauschen auch $b, b^\dagger$ jeweils mit

$a, a^\dagger$.

Da die b und $b^\dagger$ Operatoren wiederum eine Harmonische-Oszillator-Algebra bilden, lauten die Eigenwerte des Abstandsquadrats vom Ursprung

$$(\bar{X}_\perp^2)' = 2\alpha_0^2 \left(m + \frac{1}{2}\right), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (9.54)$$

Da der minimale Abstand $(\bar{X}_\perp^2)'_{\min} = \alpha_0^2$ ist, muss b den entsprechenden Zustand annihilieren. Für einen solchen Zustand beliebige Energie gilt

$$0 = b |m\rangle \sim b (a^\dagger)^m |0\rangle = (a^\dagger)^m b |0\rangle$$

$$\Rightarrow \text{Ortsraum: } 0 = (a^\dagger)^m b \psi_0(z, \bar{z})$$

$$\begin{aligned} &= (a^\dagger)^m \frac{1}{2} \left(\frac{z}{\alpha_0} + 2\alpha_0 \bar{\partial}_z \right) f(\bar{z}) e^{-\frac{z\bar{z}}{2\alpha_0^2}} \\ &= (a^\dagger)^m \frac{1}{2} 2\alpha_0 e^{-\frac{z\bar{z}}{2\alpha_0^2}} \bar{\partial}_z f(\bar{z}) \end{aligned} \quad (9.55)$$

Weil der Vorfaktor nicht verschwindet, muss für die Zustände mit minimalem Abstand vom Ursprung

$$\text{gilt: } \bar{\partial}_z f(\bar{z}) = 0 \Rightarrow f(\bar{z}) = \text{const.} \quad (9.56)$$

Der normierte Grundzustand mit minimalem $(\vec{X}_\perp^2)_{\min} = \alpha_0^2$ schreibt sich folglich

$$\begin{aligned} \underline{\psi_{0,0}} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \alpha_0} e^{-\frac{z\bar{z}}{2\alpha_0^2}} & z\bar{z} &= \frac{1}{2} (x_1'^2 + x_2'^2) = \frac{r^2}{2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \alpha_0} e^{-\frac{r^2}{4\alpha_0^2}}. & & \end{aligned} \quad (9.57)$$

Die angeregten Zustände mit minimalem $\vec{X}_\perp^2$ werden durch die $a^\dagger$ -Aufsteigeoperatoren erzeugt,

$$\psi_{n,0} = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{iz}{\alpha_0}\right)^n \psi_{0,0}. \quad (9.58)$$

Aus diesen erhalten wir durch Anwendung von $b^\dagger$ die Zustände mit größerem Abstandsquadrat:

$$\psi_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{m!}} (b^\dagger)^m \psi_{n,0}. \quad (9.59)$$

Bzw. in Bracket-Notation lautet die Lösung des Eigenwertproblems

$$\begin{aligned} H |n,m\rangle &= \hbar \omega_c \left(m + \frac{1}{2}\right) |n,m\rangle \\ \vec{X}_\perp^2 |n,m\rangle &= 2\alpha_0^2 \left(m + \frac{1}{2}\right) |n,m\rangle, \end{aligned} \quad (9.60)$$

wobei n die Quantenzahl der Energie und m die Quantenzahl des Schwerpunktabstandsquadrat vom Ursprung ist. Die Zustände im Ortsraum sind allgemein von der Form

$$\psi_{n,m} = P_{n,m}(z, \bar{z}) e^{-\frac{r^2}{4ns^2}}, \quad (9.61)$$

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

9.4 Wasserstoffatom im Magnetfeld

Das Wasserstoffatom im Magnetfeld wird durch den 1-Elektronoperator
Hamilton

$$H = \frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r) \quad (9.62)$$

$$\cong -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + \frac{ie\hbar}{2\mu c} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) + \frac{ie\hbar}{\mu c} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \frac{e^2}{2\mu c^2} \vec{A}^2 + V(r)$$

beschrieben, wobei wir in der zweiten Zeile die Ortsdarstellung verwendet haben.

Im Folgenden sei $\vec{B} = (0, 0, B_3)$ konstant und richte in z -Richtung. Wir wählen die Eichung

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \Rightarrow \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = B \hat{e}_3, \quad (9.63)$$

in der gilt:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \partial_i B_j x_k = 0 \\ \vec{A} \cdot \vec{\nabla} &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} B_j x_k \partial_i \triangleq \frac{i}{2\hbar} \vec{B} \cdot \vec{L} \\ \vec{A}^2 &= \frac{1}{4} (\vec{B} \times \vec{r})^2 = \frac{1}{4} (\vec{r}^2 \vec{B}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2) = \frac{1}{4} B^2 (x^2 + y^2). \end{aligned} \quad (9.64)$$

Damit lautet der Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + V(r) - \frac{e}{2\mu c} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2 B^2}{8\mu c} (x^2 + y^2). \quad (9.65)$$

Der Term $\sim \vec{B} \cdot \vec{L}$ kann bei paralleler Einstellung des Bahndrehimpulses zum Magnetfeld die Energie absenken, d.h. das Atom erfährt eine zum Feld hinziehende Kraft, so dass $\sim \vec{B} \cdot \vec{L}$ zum Paramagnetismus beiträgt. Der Term $\sim B^2(x^2 + y^2)$ erhöht die Energie, trägt also zum Diamagnetismus bei.

Die relative Größe der beiden Terme lässt sich abschätzen. Im Sinne der Störungstheorie betrachten wir das Verhältnis der Erwartungswerte, wobei wir $\langle x^2 + y^2 \rangle \sim a^2$ [(Bohr-Radius)²] abschätzen:
 $e = -e_0 < 0$

$$\frac{\left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \langle x^2 + y^2 \rangle B^2 \right)}{-\frac{e}{2\pi\epsilon_0} \langle L_z \rangle B} \sim \frac{e_0}{4c} \frac{a^2 B^2}{\hbar B} = \frac{\alpha}{4} \frac{B}{e_0/a^2} \quad (9.66)$$

$$\approx 1.1 \cdot 10^{-6} \frac{B}{[\text{Tesla}]}$$

wobei wir die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante α benutzt haben,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (9.67)$$

Für Labormagnetfeldstärken $B \leq 100$ Tesla

ist der diamagnetische Beitrag vernachlässigbar.

In der Astrophysik können die diamagnetischen Terme durchaus relevant werden. Magnetosphären von Neutronensternen zeigen durchaus Feldstärken von $\sim 10^8$ Tesla. Im Extremfall spekuliert man über $\sim 10^{12}$ Tesla bei sogenannten "Magnetars".

Im Folgenden vernachlässigen wir den diamagnetischen Beitrag und betrachten für Laborfelder den Hamilton-Operator

$$H = H_c - \frac{e}{2\mu c} B L_z \quad \text{mit dem} \quad (9.68)$$

Coulomb-Hamilton-Operator

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 - \frac{e^2}{r} . \quad (9.69)$$

Da $[H_c, L_z] = 0$ gibt es eine simultane Eigenbasis, die den Eigenfunktionen des Wasserstoffproblems entspricht:

$$H |n l m\rangle = (E_n + \mu_B B_m) |n l m\rangle \quad (9.70)$$

mit den üblichen Energieniveaus E_n der Balmer-Formel und dem Bohrschen Magneton

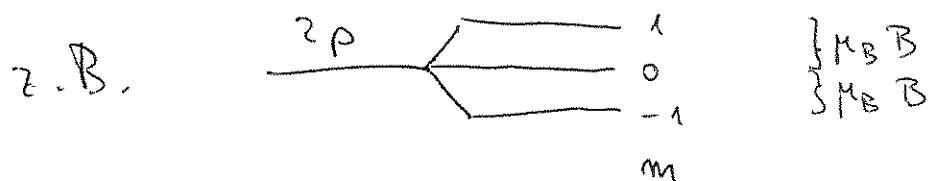
$$\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2\mu c} . \quad (9.71)$$

Die Eigenwerte des Hamilton-Operators (9.68) sind also

$$E_{nlm} = -\frac{\mu e_0^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} + \mu_B B_m . \quad (9.72)$$

Die Zustände mit und ohne Magnetfeld sind also identisch, haben aber verschobene Eigenwerte

Die $2l+1$ fache Entartung des Spektrums wird durch eine äquidistante Aufspaltung aufgehoben. Dies ist der normale Zeemann-Effekt



Um die im experiment tatsächlich gemessene Aufspaltung zu verstehen, muss allerdings der Spin des Elektrons berücksichtigt werden.

Der obige paramagnetische Effekt lässt sich interpretieren als Kopplung des mit dem Bahndrehimpuls des Elektrons einhergehenden ~~Orbit~~ magnetischen Moments

$$\mu_{\text{Bahn}} = \frac{e}{2mc} \vec{L} \quad (9.73)$$

aus Magnetfeld mit Wechselwirkungs-Hamilton-Operator

$$H = - \vec{\mu}_{\text{Boltz}} \cdot \vec{B} . \quad (9.74)$$

Beim Stern-Gerlach-Experiment haben wir einen ähnlichen Effekt vermöge des Eigendrehimpulses, d.h. des Spins, des Elektrons kennengelernt.

$$H = - \vec{\mu}_{\text{spin}} \cdot \vec{B} \quad (9.75)$$

mit

$$\vec{\mu}_{\text{spin}} = \frac{e}{2mc} g \vec{S} . \quad (9.76)$$

Hierbei bezeichnet g den Landé-Faktor

mit

$$g_{\text{Elektron}} \approx 2 . \quad (9.77)$$

Dies ist doppelt so groß, wie man es für eine klassische rotierende Ladungsverteilung erwarten würde. Allerdings wird $g=2$ durch die Dirac

Gleichung (d.h. also durch eine relativistische Spinor-Gleichung) vorhergesagt. Quantenelektrodynamische Fluktuationen führen darüber hinaus zu Korrekturen und damit zu kleinen Abweichungen vom Wert $g=2$.

Einschließlich der Spin-Feld-Kopplung (9.76) lässt sich das Wasserstoffatom im Labormagnetfeldern durch den Hamilton-Operator

$$H = H_c - \frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot (\vec{L} + g\vec{S}) \quad (9.78)$$

beschreiben. $\vec{S}$ wirkt nun auf den Spinzustandsraum aufgespannt durch $|S_z = \pm \frac{1}{2}\rangle$. Der gesamte Zustandsraum ist daher das direkte Produkt aus $L_2(\mathbb{R}^3)$ für die Zustände des spinlosen Wasserstoffproblems und dem $\mathbb{C}^2$ für die Spinzustände:

$$|n\ell m S_z\rangle = |n\ell m\rangle \otimes |S_z\rangle \quad (9.79)$$

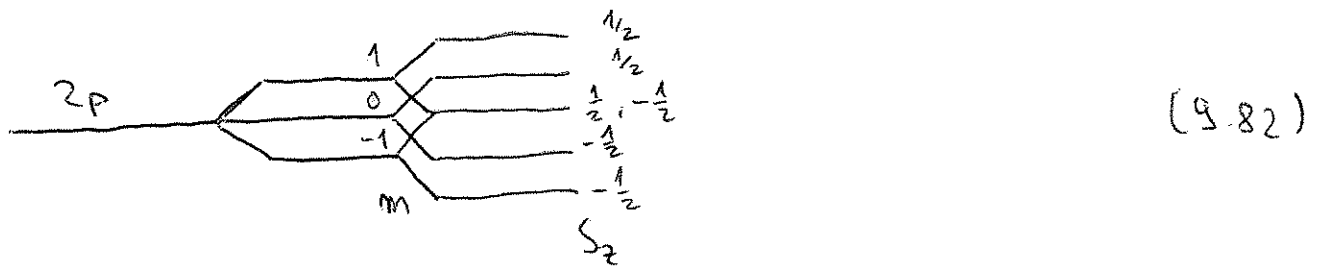
Diese Basis diagonalisiert den Hamilton-Operator

$$H |n l m S_z\rangle = E_{nlm S_z} |n l m S_z\rangle \quad (9.80)$$

mit

$$E_{nlm S_z} = - \frac{\mu_0^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} + \mu_B B \left(m + g \frac{S_z}{\hbar} \right) \quad (9.81)$$

Mit $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ und $g \approx 2$ ergibt sich folgendes Term schema, z.B. für $2p$:



d.h. für z.B. $l=1$ findet man $2 \cdot \uparrow \cdot (2l+1) = 6$ Zustände, wovon zwei Zustände ^{Spin} miteinander entartet sind; $(m, S_z) = (-1, \frac{\hbar}{2})$ und $(1, -\frac{\hbar}{2})$ haben dieselbe Energie.

Dieses Term schema entspricht in der Tat den experimentellen Befunden für Magnetfelder größer als $B \geq 10$ Tesla. Diese Aufspaltung wird als

Paschen - Back - Effekt bezeichnet. Für kleine Magnetfelder muss noch der relativistische Effekt der Spin - Bahn - Kopplung berücksichtigt werden, der an dieser Stelle nicht mehr besprochen werden soll.

Gleichung (d.h. also durch eine relativistische Spinor-Gleichung) vorhergesagt. Quantenelektrodynamische Fluktuationen führen darüber hinaus zu Korrekturen und damit zu kleinen Abweichungen vom Wert $g=2$.

Einschließlich der Spin-Feld-Kopplung (9.76) lässt sich das Wasserstoffatom im Labormagnetfeldern durch den Hamilton-Operator

$$H = H_c - \frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot (\vec{L} + g\vec{S}) \quad (9.78)$$

beschreiben. $\vec{S}$ wirkt nun auf den Spinzustandsraum aufgespannt durch $|S_z = \pm \frac{1}{2}\rangle$. Der gesamte Zustandsraum ist daher das direkte Produkt aus $L_2(\mathbb{R}^3)$ für die Zustände des spinlosen Wasserstoffproblems und dem $\mathbb{C}^2$ für die Spinzustände:

$$|n l m S_z\rangle = |n l m\rangle \otimes |S_z\rangle \quad (9.79)$$

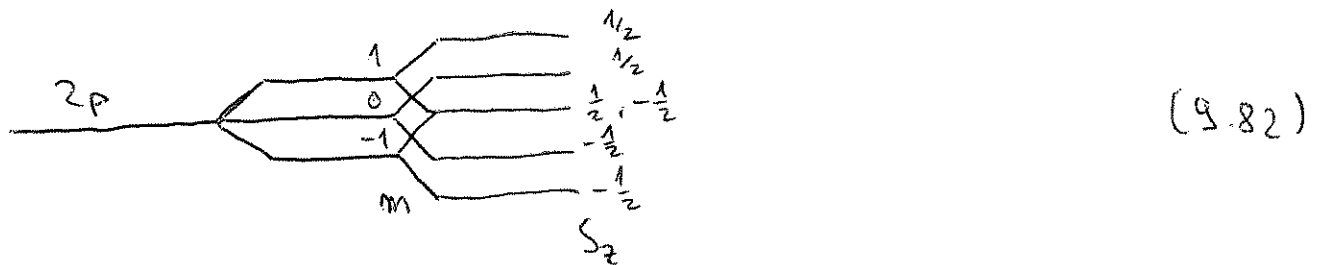
Diese Basis diagonalisiert den Hamilton-Operator

$$H |l m l m S_z\rangle = E_{nlm S_z} |l m l m S_z\rangle \quad (9.80)$$

mit

$$E_{nlm S_z} = -\frac{\mu_B^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} + \mu_B B \left(m + g \frac{S_z}{\hbar} \right) \quad (9.81)$$

Mit $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ und $g \approx 2$ ergibt sich folgendes Term schema, z.B. für $2p$:



d.h. für z.B. $l=1$ findet man $\underset{\uparrow}{2} - (2l+1) = 6$ Zustände, wovon zwei Zustände ^{Spin} miteinander entartet sind; $(m, S_z) = (-1, \frac{\hbar}{2})$ und $(1, -\frac{\hbar}{2})$ haben dieselbe Energie.

Dieses Term schema entspricht in der Tat den experimentellen Befunden für Magnetfelder größer als $B \geq 10$ Tesla. Diese Aufspaltung wird als

Paschen - Back - Effekt bezeichnet. Für kleine Magnetfelder muss noch der relativistische Effekt der Spin - Bahn - Kopplung berücksichtigt werden, der an dieser Stelle nicht mehr besprochen werden soll.