

Also vertauschen in dieser Eichung der Impulsoperator und das Vektorpotential,

$$[\hat{p}, \underline{A}] = 0,$$

sich der Beitrag der kinetischen Energie im Hamiltonoperator vereinfacht:

$$(\hat{p} - e\underline{A})^2 = \hat{p}^2 + e^2 A^2 - 2e\underline{A}\hat{p}.$$

Weiter wollen wir annehmen, dass das Magnetfeld schwach ist. Dann ist mit Sicherheit der A^2 -Term vernachlässigbar¹³. Außerdem betrachten wir den Fall, dass dieses Feld räumlich homogen ist, und wir wählen das Koordinatensystem so, dass

$$\underline{B} = (0, 0, B),$$

gilt. Wir wählen nun das Vektorpotential in folgender Weise:

$$\underline{A} = \frac{1}{2}\underline{B} \times \underline{r} = \frac{1}{2}(-B \cdot y, B \cdot x, 0),$$

was gleichzeitig $\underline{B} = \text{rot } \underline{A}$ sowie $\text{div } \underline{A} = 0$ erfüllt¹⁴. Mit dieser Definition des Potentials folgt nun ein besonders einfaches Ergebnis:

$$\underline{A}\hat{p} = \frac{1}{2}\underline{B} \times \underline{r}\hat{p} = \frac{1}{2}\underline{B}\underline{r} \times \hat{p} = \frac{1}{2}\underline{B}\hat{L}, \quad (6.49)$$

wobei die Eigenschaft des Spatproduktes benutzt wurde. Damit wird die Pauligleichung zu

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left[\left(\frac{\hat{p}^2}{2M} + V \right) \hat{1}_s - \underbrace{\frac{e}{2M}\underline{B}(\hat{\underline{L}}\hat{1}_s + g_s\hat{s})}_{\Delta\hat{H}_B} \right] \Phi. \quad (6.50)$$

Das Magnetfeld koppelt also an das Gesamt-Magnetmoment $\underline{m}_{\text{tot}}$, wobei

$$\Delta\hat{H}_B = -\hat{\underline{m}}_{\text{tot}}\underline{B}, \quad (6.51)$$

hier eine Matrix im Spinraum ist, mit

$$\hat{\underline{m}}_{\text{tot}} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{\underline{L}}\hat{1}_s + g_s\hat{s}). \quad (6.52)$$

Aus Glg. (6.50) folgt die stationäre Pauligleichung

$$\left[\left(\frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\underline{r}) \right) \hat{1}_s - \frac{\mu_B}{\hbar} \underline{B} (\hat{\underline{L}}\hat{1}_s + g_s\hat{s}) \right] \Phi = E \cdot \Phi, \quad (6.53)$$

wobei wir den üblichen Lösungsansatz,

$$\Phi(\underline{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Phi(\underline{r}),$$

verwendet haben, der wie im feldfreien Fall erfolgreich ist.

¹³Das ist in vielen Fällen gegeben. Ausnahmen sind z.B. intensive Laserfelder, deren Wechselwirkung mit Materie anders behandelt werden muss.

¹⁴Es gibt auch noch weitere Möglichkeiten, $\underline{A}$ zu wählen, die wir später diskutieren werden.

Spezialfall: Betrachten wir nun Teilchen mit dem Spin $\frac{1}{2}$. Der Spinoperator $\hat{\underline{s}}$ wird dann zu:

$$\hat{\underline{s}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\underline{\sigma}},$$

so dass das Gesamt-Magnetmoment zu:

$$\hat{\underline{m}}_{\text{tot}} = \left(\hat{\underline{L}} \hat{1}_s + \frac{g_s}{2} \hbar \hat{\underline{\sigma}} \right) \frac{\mu_B}{\hbar},$$

wird. Für Elektronen gilt $g_s \approx 2$, und damit folgt:

$$\hat{\underline{m}}_{\text{tot}} = (\hat{\underline{L}} \hat{1}_s + 2\hat{\underline{s}}) \frac{\mu_B}{\hbar}.$$

Wir erkennen sofort, dass das Gesamt-Magnetmoment, das Bahndrehimpuls und Spin erzeugen, nicht parallel zum Gesamtdrehimpuls, $\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$, ist. Dies ist ein nicht-triviales Resultat, das aus den unterschiedlichen gyromagnetischen Faktoren beider Drehimpulse resultiert. Die Folge ist eine Spinpräzession (Rotation) um das Magnetfeld. Diese Nicht-Parallelität gilt nicht nur für Elektronen, wie man aus der allgemeinen Formel (6.52) ersehen kann.

6.6 Wasserstoff-Atom im Magnetfeld. Zeeman-Effekt

Wir nehmen wie bisher ein schwaches homogenes Magnetfeld in z -Richtung an,

$$\underline{B} = (0, 0, B_3),$$

und vernachlässigen die Spin-Bahn-Kopplung. Dies führt auf den *einfachen Zeemann-Effekt*. Die Lösung der Pauligleichung hatte die folgende Struktur: die Eigenfunktionen sind gemeinsame Eigenzustände von $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_3$, $\hat{s}^2$ und $\hat{s}_3$. Da sich der Gesamtspin $s = \frac{1}{2}$ des Elektrons nicht ändert, bezeichnen wir diese Zustände also mit:

$$|nlms_3\rangle.$$

Der Hamiltonoperator des Problems teilt sich in einen feldfreien Anteil, $\hat{H}_0$, und einen Feldanteil $\Delta\hat{H}_B$ auf,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \Delta\hat{H}_B,$$

mit:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{\hat{p}^2}{2M_r} + V(r), \\ \Delta\hat{H}_B &= -\frac{\mu_{B,e}}{\hbar} B_3 (\hat{L}_3 \hat{1}_s + g_s \hat{s}_3). \end{aligned}$$

Das Eigenwertproblem des Wasserstoff(ähnlichen)-Atoms (Ions, M_r ist die reduzierte Masse) im Magnetfeld wird also zu:

$$(\hat{H}_0 + \Delta\hat{H}_B) |nlms_3\rangle = E_{nlms_3} |nlms_3\rangle,$$

wobei der feldfreie Anteil

$$\hat{H}_0 |nlms_3\rangle = E_n |nlms_3\rangle,$$

uns bereits bekannt ist. Beim zweiten Teil kennt man die Wirkung des $\hat{L}_3$ -Operators, und aus Analogie kennt man auch den Beitrag von $\hat{s}_3$. Nach Wirkung auf die Eigenfunktion kann der Operator durch den entsprechenden Eigenwert ersetzt werden:

$$\Delta \hat{H}_B |nlms_3\rangle = +\mu_B B_3 (m + g_s s_3) |nlms_3\rangle.$$

Es gilt also:

$$\begin{aligned} E_{nlms_3} &= E_n + \mu_B B_3 (m + g_s s_3) \\ &\approx E_n + \frac{e_0 \hbar}{2m_e} B_3 (m + 2s_3) \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile wurde für das Elektron $g_{s,e} = 2$ eingesetzt. Der Eigenwert der z -Komponente des Spins, s_3 , kann hier die Werte $s_3 = \pm \frac{1}{2}$ annehmen, so dass der Spin-Beitrag (in der Klammer) ganzzahlige Werte annimmt, so wie der des Bahndrehimpulses. Eine wichtige hier zu definierende Größe ist die Larmorfrequenz:

$$\omega_L = \frac{e_0}{m_e} B$$

Für einen besonders einfachen Aufschrieb definieren wir noch $\bar{\omega}_L = \frac{\omega_L}{2}$. Das Magnetfeld bewirkt also eine Verschiebung der feldfreien Energie-Eigenwerte E_n durch die folgenden zwei Beiträge:

1. Der erste Beitrag ist die $\hat{L}_z$ - B -Kopplung:

$$\Delta E_m = \frac{e_0 \hbar}{2m_e} B_3 \cdot m = \hbar \bar{\omega}_L \cdot m = \mu_B B_3 m.$$

2. Außerdem gibt es noch einen Beitrag durch die $\hat{s}_3$ - B -Kopplung,

$$\delta E_{s_3} = \frac{e_0 \hbar}{2m_e} B_3 2s_3 = \hbar \bar{\omega}_L 2s_3 = \mu_B B_3 2s_3,$$

wobei gilt $-l \leq m \leq l$ und $-\frac{1}{2} \leq s_3 \leq \frac{1}{2}$.

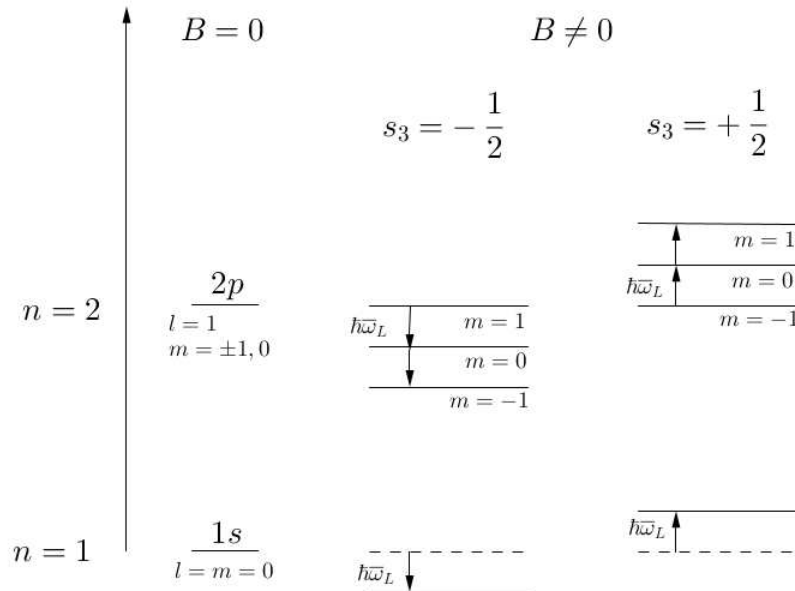


Abbildung 6.3: Ist ein äußeres Magnetfeld angelegt, so wird die m -Entartung der Zustände (teilweise) aufgehoben. Jede dieser Komponenten wird noch um den Spinbeitrag verschoben. Es ergeben sich die oben abgebildeten Energieniveaus. Für $n = 2$ ist der $2s$ -Zustand nicht angegeben (er verhält sich wie das $1s$ -Niveau), da vor allem der strahlende Übergang zwischen den Niveaus interessiert und $\Delta l = 0$ nicht möglich ist.

Für die Aufspaltung halten wir fest:

- Die s -Niveaus spalten zweifach auf. Dies ist im Einklang mit dem Stern-Gerlach-Versuch.
- Die p -Niveaus spalten fünffach auf. Hierbei erhält man noch eine zweifache Entartung bei $s_3 = \frac{1}{2}$, $m = -1$ und $s_3 = -\frac{1}{2}$, $m = +1$.

Ohne Spin haben wir nur $2l+1$ verschiedene Energieniveaus zu einem fixiertem n . Berücksichtigt man, dass mit Spin das mittlere Energieniveau immer entartet ist, so haben wir mit Spin eine $(2l+1)(2s+1) - 1$ fache Entartung, für alle Zustände mit $l \geq 1$. Die Niveau-Aufspaltung ist hierbei äquidistant und proportional zur Magnetfeldstärke,

$$\hbar\bar{\omega}_L \propto B.$$

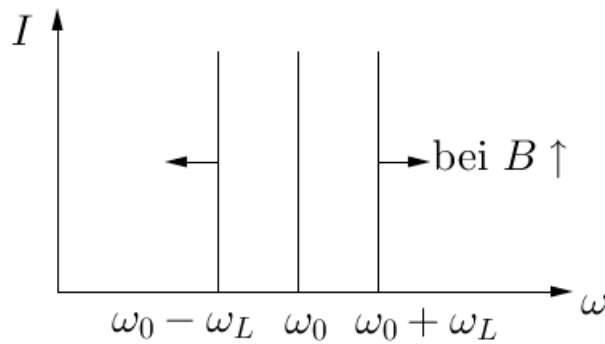


Abbildung 6.4: Dipolerlaubte Übergänge zwischen dem $2p$ -Niveau und dem $1s$ -Niveau. Analoges Verhalten ergibt sich für andere p - und s -Zustände: der Frequenzabstand wächst linear mit B .

In obiger Abbildung ist das Linienspektrum für den Übergang von $2p \rightarrow 1s$ dargestellt. Ohne äußeres Magnetfeld erhält man nur 1 Linie bei ω_0 mit

$$\hbar\omega_0 = E_2 - E_1 = \frac{3}{4}E_R$$

Die Photonenenergie ist allgemein (vergleiche Abschnitt 5.6):

$$\hbar\omega_{k'k} = E_{k'} - E_k$$

Hierbei nehmen wir eine schwache Kopplung von Licht und Spin an (das ist i.a. sehr gut gerechtfertigt), das Photon ändert also den Spin des Elektrons nicht

$$\Delta s_3 = s'_3 - s_3 \approx 0,$$

die Auswahlregeln bleiben also im Magnetfeld unverändert¹⁵, und wir erhalten hier:

$$\hbar\omega_{kk'} = \underbrace{E_{n'l'} - E_{nl}}_{\hbar\omega_0 \quad \Delta l = \pm 1} + \hbar\bar{\omega}_L \underbrace{(m' - m)}_{\Delta m = 0, \pm 1}$$

Für die Untersuchung dieses Effekts erhielten P. Zeeman und H.A. Lorentz 1902 den Nobelpreis.

Aufgabe: Man zeichne die Energien der Lyman- und Balmererien als Funktion der Magnetfeldstärke.

¹⁵Daher ist auch eine klassische (ohne Spin) Erklärung des Spektrums möglich, wie sie bereits von H.A. Lorentz gegeben wurde.

Wellenfunktionen: Nun ist nur noch zu klären, wie die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms mit Spin aussehen. Sei zunächst $s_3 = +\frac{1}{2}$.

$$\left| nlm \frac{1}{2} \right\rangle = \Phi_{nlm\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}$$

und analog für $s_3 = -\frac{1}{2}$:

$$\left| nlm - \frac{1}{2} \right\rangle = \Phi_{nlm-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

Die Normierung erfolgt für die Zustände mit spin up durch:

$$\int (\psi_{nlm}^*(\underline{r}), 0) \begin{pmatrix} \psi_{nlm}(\underline{r}) \\ 0 \end{pmatrix} d^3r = \int |\psi_{nlm}(\underline{r})|^2 d^3r = 1,$$

und analog für spin down.

6.7 Freies Teilchen mit Spin im Magnetfeld. Landau-Niveaus

In diesem Abschnitt betrachten wir ein freies Elektron in einem homogenen zeitunabhängigen Magnetfeld, wobei das *Magnetfeld beliebig stark* sein kann. Die Lösung der Pauli-Gleichung erfolgte 1930 durch Lew D. Landau. Dieses Resultat hat vielfältige Anwendungen, vor allem in der Festkörperphysik und Nanotechnologie (z.B. quantum wells, quantum dots, Quanten-Hall-Effekt etc.) gefunden.

Klassisches Verhalten: Auf das Elektron wirkt die Lorentzkraft $\underline{F}_L$ mit (SI-Einheiten):

$$M\dot{\underline{v}} = \underline{F}_L = e \underline{v} \times \underline{B}.$$

Die auf das Elektron wirkende Beschleunigung ist also senkrecht zu seiner Geschwindigkeit und zum Magnetfeld. Es resultiert also eine Kreisbewegung um die Richtung des Magnetfeldes. Zusätzlich kann das Elektron noch eine freie Bewegung parallel zur Magnetfeldrichtung haben (die Lorentzkraft ist gleich Null). Daraus ergibt sich eine Spiralbahn mit dem Larmor-Radius:

$$r_L = \frac{v_{\perp}}{\omega_L}$$

Hierbei ist ω_L die uns schon vertraute Larmor-Frequenz:

$$\omega_L = \frac{|e|\hbar B}{M}$$

Quantenmechanische Lösung: Für die Lösung wählen wir die Orientierung:

$$\underline{B} = (0, 0, B).$$

Für eine einfache Lösung wählen wir hier das Vektorpotential zu

$$\underline{A} = (0, x \cdot B, 0),$$

was offensichtlich rot $\underline{A} = \underline{B}$ erfüllt, allerdings ist dies eine unsymmetrische Definition (anders als wir es beim Zeeman-Effekt getan hatten)¹⁶. Das Eigenwert-Problem wird zu:

$$\hat{H}_p \Phi = E \Phi,$$

wobei $\hat{H}_p$ der Pauli-Hamiltonian ist:

$$\hat{H}_p = \frac{1}{2m_e} [\hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y + e_0 B \cdot \hat{x})^2 + \hat{p}_z^2] + \mu_B B \hat{\sigma}_z$$

Dies haben wir für das Elektron aufgeschrieben ($e = -e_0$, $M \rightarrow m_e$).

Struktur der Lösung:

1. Zunächst stellen wir fest, dass $\hat{H}_p$ unabhängig von y und z ist. Damit gilt:

$$[\hat{p}_y, \hat{H}_p] = [\hat{p}_z, \hat{H}_p] = 0$$

2. Außerdem ist das Magnetfeld ortsunabhängig. Hieraus folgt:

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{H}_p] = 0$$

Es sind daher p_y, p_z, s_z Erhaltungsgrößen (Integrale der Bewegung). Die Operatoren $\hat{H}_p, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{\sigma}_z$ besitzen also die gemeinsamen Eigenfunktionen

$$|E p_y p_z \sigma_z\rangle,$$

mit der Abkürzung für den Eigenwert von $\hat{s}_z$ (Eigenwert der Pauli-Matrix $\hat{\sigma}_z$) $2s_3 = \sigma_z = \pm 1$.

Ansatz in Orts-Spin-Darstellung: Wir setzen die Lösung als zweikomponentigen Spinor Φ an:

$$\Phi_\alpha(x, y, z) = e^{\frac{i}{\hbar}(y \cdot p_y + z \cdot p_z)} \cdot \chi_{\sigma_z} \cdot f_\alpha(x)$$

Hierbei ist $\alpha = \{p_y, p_z, \sigma_z, E\}$ ein Multiindex, stellvertretend für alle Quantenzahlen. Die Basis-Vektoren in der Spin-Darstellung waren:

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Setzt man dies mit obigem Ansatz in die Pauligleichung ein, so erhält man:

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m_e} + \frac{1}{2m_e} (p_y + e_0 B \cdot x)^2 \right] f_\alpha(x) = \underbrace{\left(E - \frac{p_z^2}{2m_e} - \mu_B \sigma_z \cdot B \right)}_{=\tilde{E}} f_\alpha(x)$$

Man führt jetzt folgende Abkürzungen ein:

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{e_0} \frac{p_y}{B} = r_L \\ \tilde{x} &= x + a \\ \omega_L &= \frac{e_0 B}{m_e} = \frac{2\mu_B}{\hbar} \end{aligned}$$

¹⁶Die folgende Rechnung ist auch mit der vorigen Wahl von $\underline{A}$ möglich.

Damit wird die obige Gleichung zu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} m_e \omega_L^2 \tilde{x}^2 \right] f_{\tilde{E}}(\tilde{x}) = \tilde{E} f_{\tilde{E}}(\tilde{x}),$$

was einem eindimensionalen harmonischen Oszillator entspricht. Die Energieeigenwerte für das Problem kennen wir schon, mit $n = 0, 1, \dots$ werden diese zu:

$$\tilde{E}_n = \hbar \omega_L \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Daraus ergeben sich die ursprünglichen Energie-Eigenwerte des Hamiltonoperators, E_{n,p_z,σ_z} , zu:

$$E_{n,p_z,\sigma_z} = \mu_B B (2n + 1 + \sigma_z) + \frac{p_z^2}{2m_e}. \quad (6.54)$$

Diese Energien sind die sogenannten **Landau-Niveaus**. Die Energie $\frac{p_z^2}{2m_e}$ beschreibt dabei die freie Bewegung des Elektrons parallel zu $\underline{B}$, die nicht quantisiert ist und beliebige kontinuierliche Werte haben kann. Der Anteil $\mu_B B (2n + 1 + \sigma_z)$ ist die quantisierte Energie in der Ebene senkrecht zur Magnetfeldorientierung. Für jedes n sind die Eigenfunktionen mit den Quantenzahlen $(n, \sigma_z = +1)$ und $(n + 1, \sigma_z = -1)$ entartet.

Eigenfunktionen: In Ortsdarstellung lauten die Eigenfunktionen des freien Elektrons im Magnetfeld analog zu denen des harmonischen Oszillators:

$$f_n(\tilde{x}) = c_n e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{x}}{\tilde{x}_0} \right)^2} H_n \left(\frac{\tilde{x}}{\tilde{x}_0} \right),$$

und auch die Definition von $\tilde{x}_0$ ist analog zum harmonischen Oszillator:

$$\tilde{x}_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega_L}}.$$

Die räumliche Ausdehnung der Wellenfunktion ist also proportional zu $\tilde{x}_0$ und damit proportionale zu $\frac{1}{\sqrt{B}}$. In der Klassik war das Elektron auf einer Zyklotronbahn um die Magnetfeldlinien mit dem Radius $r_L = \frac{v_{\perp}}{\omega_L}$ scharf lokalisiert. In der Quantenmechanik ist das Elektron dagegen „gefangen“ in einem „magnetischen Fallenpotential“, was eine endliche Ausdehnung gestattet,

$$V_B = \frac{m_e}{2} \omega_L^2 \tilde{x}^2$$

Das Elektron ist mit gegebenem p_y lokalisiert bei $x = -a = -c p_y / (e_0 B) = r_L$, wenn man $v_{\perp} = p_y / m_e$ einsetzt.

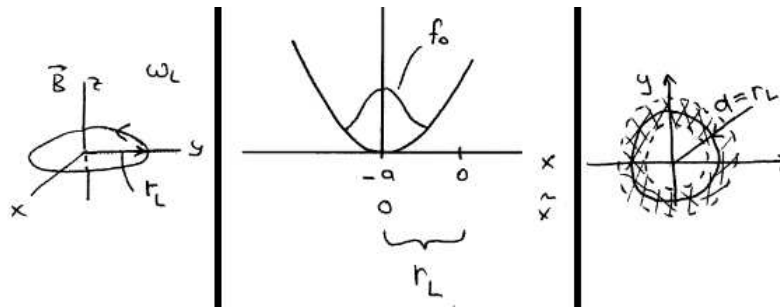


Abbildung 6.5: Links: Die klassische Zyklotronbahn mit Radius r_L . Mitte: Das Potential des Magnetfelds mit Mittelpunkt bei $-a = r_L$. Rechts: Das Elektron ist um die klassische Larmorbahn herum lokalisiert.

Anmerkung: In den obigen Gleichungen scheint es so, als sei die Lösung nicht symmetrisch bezüglich x und y . Dies ist nicht der Fall, sondern liegt nur an unserer Definition des Vektorpotentials $\underline{A}$. Siehe hierzu [Landau and Lifshitz, 1981].

Aufgabe: Man löse diese Aufgabe unter Verwendung der symmetrischen Form des Vektorpotentials (vgl. Zeeman-Effekt) und diskutiere die Wellenfunktionen.

6.8 Dynamik des Spins. Spinpräzession

Wir kehren nun zur Pauligleichung mit voller Zeitabhängigkeit zurück und wollen untersuchen, wie sich die Spin-Wellenfunktion mit der Zeit entwickelt. Die Pauligleichung war

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\underline{r}, t) = \hat{H}_p \Phi(\underline{r}, t), \quad (6.55)$$

mit $\hat{H}_p = \hat{H}_p^0 + \Delta \hat{H}_S$, wobei $\hat{H}_p^0$ Spin-unabhängig ist. Im homogenen Magnetfeld ($\nabla B = 0$) gilt

$$[\hat{H}_p^0, \Delta \hat{H}_S] = 0,$$

und es lässt sich also wieder ein Separationsansatz für Φ machen:

$$\Phi(\underline{r}, t) = \psi^0(\underline{r}, t) \cdot \chi(t),$$

wobei beide Funktionen zeitabhängig sind und der Ortsteil die folgende Gleichung erfüllt:

$$i\hbar \frac{\partial \psi^0}{\partial t} = \hat{H}_p^0 \psi^0. \quad (6.56)$$

Setzen wir diesen Ansatz in die Pauligleichung (6.55) ein, so erhalten wir:

$$i\hbar \chi \dot{\psi}^0 + i\hbar \psi^0 \dot{\chi} = (\hat{H}_p^0 + \Delta \hat{H}_S) \psi^0 \cdot \chi \quad (6.57)$$

$$i\hbar \psi^0 \dot{\chi} = \Delta \hat{H}_S \psi^0 \cdot \chi. \quad (6.58)$$

Nach Kürzen erhält man die gesuchte Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt} = \Delta \hat{H}_S \cdot \chi(t), \quad (6.59)$$

mit der Anfangsbedingung:

$$\chi(0) = \chi_0.$$

Teilchen mit Spin 1/2:

Für den wichtigen Fall der Elektronen ist die Funktion $\chi(t)$ ein zweikomponentiger Spinor, dessen Komponenten jetzt zeitabhängig sind:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix} = \chi_1(t) \cdot \chi_+ + \chi_2(t) \cdot \chi_-.$$

Hierbei sind χ_+ und χ_- die (zeitunabhängigen) Basiszustände (2-zeilige Spalten-Spinoren), und die adjungierten Zustände sind entsprechend Zeilenvektoren: $\chi_+^\dagger = (1, 0)$ und $\chi_-^\dagger = (0, 1)$. Die Normierung erfordert also – für alle Zeiten:

$$1 = \|\chi(t)\|^2 = |\chi_1(t)|^2 + |\chi_2(t)|^2.$$

Für die Lösung von Gleichung (6.59) benutzen wir folgenden Ansatz:

$$\chi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \Delta \hat{H}_S(t')} \chi(0). \quad (6.60)$$

Der Exponentialterm ist ein Operator in $\mathcal{H}_s$, also im Spinraum eine 2×2 -Matrix, der auf den Anfangs-Spinor wirkt. Wir erhalten diese Wirkung, wie üblich, durch eine Taylor-Entwicklung. Dabei ist

$$\Delta \hat{H}_S = \underbrace{-\frac{e}{2M} g_s \frac{\hbar}{2}}_{=\tilde{\mu}_B} \hat{\sigma} \cdot \underline{B}(t).$$

Weiter definieren wir eine effektive Frequenz (in Analogie zum Fall eines zeitunabhängigen Feldes):

$$\hbar \tilde{\Omega} t = \tilde{\mu}_B \int_0^t B(t') dt'.$$

Beispiel: Nun werden die vorigen Ergebnisse am Beispiel eines homogenen aber zeitlich veränderlichen Magnetfeldes

$$\underline{B}(t) = \{0, 0, B(t)\}$$

besprochen.

1. Aus der allgemeinen Lösung (6.60) folgt mit der Eigenschaft 8 der Spinmatrizen:

$$e^{-i\varphi \hat{\sigma}_z} = \hat{1} \cos \varphi - i \hat{\sigma}_z \sin \varphi$$

$$\chi(t) = \left[\hat{1} \cos \tilde{\Omega} t - i \hat{\sigma}_z \sin \tilde{\Omega} t \right] \chi_0$$

2. Eine alternative Lösung kann durch den Übergang zu den Spinorkomponenten in (6.59) erfolgen:

$$i\hbar \frac{d\chi_1}{dt} = \tilde{\mu}_B B(t) [\hat{\sigma}_z \chi(t)]_1 = \tilde{\mu}_B B(t) \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \right]_1 = \tilde{\mu}_B B(t) \chi_1(t),$$

wobei der Subskript “1” die erste Zeile des Matrixprodukts bezeichnet. Analog erhält man die zweite Gleichung zu:

$$i\hbar \frac{d\chi_2}{dt} = -\tilde{\mu}_B B(t) \chi_2(t)$$

Beide Gleichungen lassen sich leicht lösen durch:

$$\chi_1(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{\mu}_B \int_0^t dt' B(t')} \chi_1(0) = e^{-i\tilde{\Omega}(t) \cdot t} \chi_1(0), \quad (6.61)$$

$$\chi_2(t) = e^{+i\tilde{\Omega}(t) \cdot t} \chi_2(0). \quad (6.62)$$

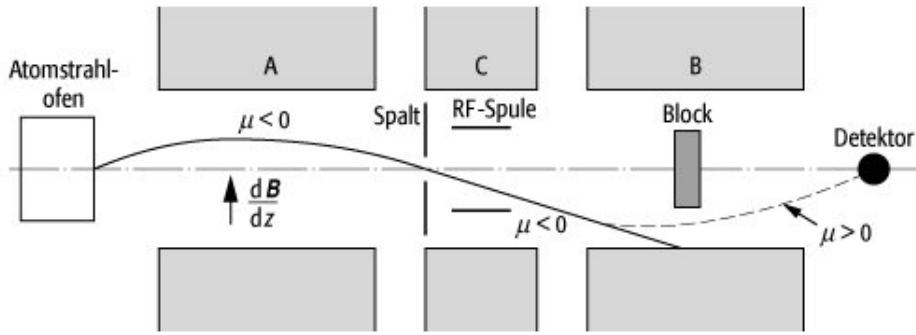


Abbildung 6.6: Atome aus einem Atomstrahl-ofen werden in einem ersten inhomogenen, permanenten Magnetfeld abgelenkt und treten dann in ein Radiofrequenz-Wechselfeld ein, das einem homogenen, permanenten Feld überlagert ist. Stimmt die Frequenz dieses Wechselfeldes mit der Frequenz eines Übergangs zwischen magnetischen Unterzuständen überein, so können Übergänge induziert werden, die die Richtung des magnetischen Moments des Atoms ändern. Atome, die einen solchen Übergang vollziehen, können durch ein zweites inhomogenes Magnetfeld selektiert werden. Diese Atome gelangen zum Detektor; diejenigen, die keinen Übergang machen, werden in die Gegenrichtung abgelenkt. Es ist also möglich, durch Verändern der Radiofrequenz ein Spektrum magnetischer Unterzustände zu messen. In der Abbildung bezeichnet μ das Magnetmoment. Wie beim Stern-Gerlach-Versuch ist die Kraft auf die Atome quantisiert, $\mathbf{F} = \nabla(\mu \cdot \mathbf{B})$. Quelle: Spektrum der Wissenschaft

Nun sind die zeitabhängigen Erwartungswerte der Spinoperatoren zu berechnen, da sie die relevanten Messgrößen darstellen:

$$\langle \hat{s} \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger(t) \hat{\sigma} \chi(t),$$

wobei der Operator $\hat{\sigma}$ von Spinzuständen eingerahmt wird. Wir führen die Berechnung komponentenweise aus und illustrieren das für $\hat{s}_z$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{s}_z \rangle(t) &= \frac{\hbar}{2} (\chi_1^*, \chi_2^*(t)) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} (|\chi_1(t)|^2 - |\chi_2(t)|^2) = \frac{\hbar}{2} (|\chi_{10}|^2 - |\chi_{20}|^2) \\ &= \langle \hat{s}_z \rangle(0), \end{aligned}$$

wobei wir die Resultate (6.61) und (6.62) verwendet haben. Die Spinkomponente parallel zum Magnetfeld ist also zeitlich konstant. Die Erwartungswerte $\langle \hat{s}_x \rangle$ und $\langle \hat{s}_y \rangle$ berechnen sich analog. Man findet leicht, dass sie nicht konstant sind, sondern um die Orientierung des Magnetfeldes rotieren, mit der Frequenz $\tilde{\Omega} = g_s \omega_L$.

Diese Resultate sind für Elektronen, z.B. in Halbleitern, sehr gut bestätigt. Die Spindynamik lässt sich aber auch für andere Elementarteilchen bzw. Mehrteilchen-Systeme untersuchen. Insbesondere lässt sich aus der Rotationsgeschwindigkeit der Wert des Spins des betreffenden Teilchens bestimmen, ein Beispiel ist der Spin von Atomkernen.

Spinresonanz von Atomkernen.

Die Messung des Kernspins erfolgte erstmals 1933, durch I. Rabi, wofür er 1944 den Nobelpreis erhielt. Die Idee war, eine Überlagerung von B_z und einem rotierenden dazu senkrechten Feld $\underline{B}_\perp$ zu erzeugen (s. Abb. 6.6):

$$\underline{B} = (B_0 \cos \omega_0 t, B_0 \sin \omega_0 t, B_z),$$

wobei $B_z \gg B_0$ gelten soll. Das senkrechte Feld dreht s_z nach einer Zeit $t_F(\omega_L, \omega_0, m_s)$. Dies nennt man einen “Spin flip” oder „Rabiflop“. Hieraus ist die Bestimmung von m_s (und damit von g_s für das jeweilige Material) möglich. Man bekommt eine Resonanz bei $\omega_0 = g_s \cdot \omega_L$. Dies ist die Grundlage für die Kernspinresonanz (NMR), die die Wasserstoff-Konzentration in organischer Materie messen kann. Durch tomographische Verfahren erhält man in einem inhomogenen Feld $B(\underline{r})$ darüber hinaus eine 3D-Auflösung,

$$\tilde{\Omega} \longrightarrow \tilde{\Omega}(\underline{r}) = \frac{\mu_B g_s}{\hbar} B(\underline{r}),$$

wodurch man orts aufgelöst m_s und damit die Konzentration $n(r)$ messen kann. Dies gelang 1973 experimentell dem Chemiker P. Lauterbur und dem Physiker P. Mansfield, wofür sie 2003 den Nobelpreis für Medizin erhielten. Mehr Informationen findet man in Ref. [Greiner, 1992].

6.9 Elektroneninterferenz im elektromagnetischen Feld. Aharonov-Bohm-Effekt. Flussquantisierung

Diser Abschnitt ist noch im Aufbau

Wir gehen aus vom Pauli-Hamiltonian für ein freies Elektron im stationären Magnetfeld,

$$\hat{H}_p^0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e \vec{A} \right)^2 + e\varphi + \Delta \hat{H}_s. \quad (6.63)$$

Wir betrachten jetzt den Fall, dass im Raumgebiet V gelten soll $\vec{B} = \text{rot} \mathbf{A} = 0$. Daraus folgt, dass sich $\mathbf{A}$ durch eine skalare Funktion χ ausdrücken lässt, $\mathbf{A} = \nabla \chi$, da $\text{rot} \nabla \chi \equiv 0$.

Nun fragen wir, ob sich durch die Wahl der Eichung Potentiale $\vec{A}$ und $\tilde{\phi}$ finden lassen, so dass $\hat{H}_p^0$ unabhängig vom Magnetfeld wird, wodurch die mathematische Beschreibung erheblich vereinfacht würde. Der Spinbeitrag spielt dabei keine Rolle und wird im Folgenden weggelassen. Gesucht sind also ein $\vec{A}$ und $\tilde{\phi}$ mit der Eigenschaft,

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \vec{A} + \nabla \chi_E = \nabla \chi + \nabla \chi_E \equiv 0 \\ \tilde{\phi} &= \varphi - \frac{d\chi_E}{dt} \equiv 0. \end{aligned}$$

Die Lösung für die gesuchte Eichtransformation ist also $\chi_E(\vec{r}, t) = -\chi(\vec{r}, t)$, und kann durch das Vektorpotential ausgedrückt werden:

$$\chi_E(r) = - \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} d\mathbf{s} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{s}), \quad (6.64)$$

wobei $\mathbf{r}_0$ ein beliebiger Anfangspunkt ist. Weiter können wir annehmen, dass $\frac{d\chi_E}{dt} = 0$ ist und setzen $\varphi = \tilde{\phi} = 0$. Nun verändert sich der Hamiltonian und die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \hat{H}_p^0 &\rightarrow \tilde{H}_p^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \\ \psi(\vec{r}) &\rightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi_E(\vec{r})} \end{aligned} \quad (6.65)$$

Damit ist der gesamte Hamiltonian unabhängig vom elektromagnetischen Feld. Dieses bleibt aber präsent im Phasenfaktor der Wellenfunktion. Nun könnte man vermuten, dass dieser Phasenfaktor ohnehin irrelevant ist, aber dem ist nicht so. Natürlich entfällt der Phasenfaktor

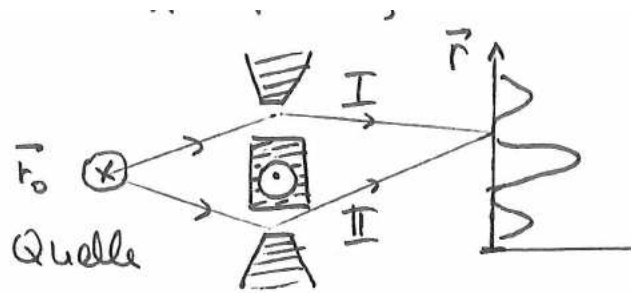


Abbildung 6.7: Illustration der Elektroneninterferenz beim Aharonov-Bohm-Effekt. Im Punkt $\mathbf{r}_0$ wird der Elektronenstrahl in zwei Bestandteile getrennt, die um den mittleren Bereich herumgehen (im schraffierten Bereich kann ein von 0 verschiedenes Magnetfeld vorliegen, im Bereich der Elektronenbahnen verschwindet es) und sich im Punkt $\mathbf{r}$ wieder vereinigen. Das Interferenzmuster wird auf einem Schirm detektiert, und seine Abhängigkeit vom Endpunkt $\mathbf{r}$ ist rechts skizziert.

bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\rho}(\mathbf{r})$, aber es lassen sich auch andere Observable finden, die von der Phase der Wellenfunktion abhängen. Das Standard-Beispiel ist ein Interferenz-Experiment, bei dem die Elektronen-“Bahn” aufgeteilt wird in zwei unterschiedliche Wege. Am Ende werden beide Beiträge einander wieder überlagert. Für das aktuelle System geht diese Idee zurück auf Y. Aharonov und D. Bohm¹⁷, die wir kurz erläutern.

Aharonv-Bohm-Effekt.

Aufgabe: Man finde die $\mathbf{r}$ -Abhängigkeit des Interferenzsignals und untersuche dessen Abhängigkeit von $\mathbf{B}$. Hinweis: man verwende den Stokeschen Satz.

6.10 Addition von Drehimpulsen in der Quantenmechanik. Spin-Bahn-Kopplung

Abschnitt im Aufbau

Abschließend machen wir noch ein paar Bemerkungen zur Addition von Drehimpulsen. Ein wichtiges Beispiel ist der Gesamtdrehimpuls eines Teilchens, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$, der für die korrekte Beschreibung von Atomen von zentraler Bedeutung ist (Spin-Bahn-Kopplung bzw. Engl. Spin-orbit coupling). Ein anderes Beispiel ist der Gesamtspin mehrerer Teilchen. Dies tritt bereits beim einfachsten Atom mit mehr als einem Elektron – dem Heliumatom – auf. Die quantenmechanische Addition der Elektronenspins führt dann auf die Singlet- bzw. Triplett-Zustände.

¹⁷Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959)