Teilchen im elektromagnetischen Feld

1) Hamiltonoperator

Elektromagnetisches Feld $\vec{E}, \vec{B}$ wird beschrieben durch Potentiale $\phi(\vec{x},t)$, $\vec{A}(\vec{x},t)$:

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} .$$

Betrachte dann Bewegung eines Teilchens der Masse m und Ladung e in diesem Feld.

Hamilton-Funktion ist klassisch

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\phi ,$$

wobei $\vec{p}$ kanonischer Impuls.

(Diese Hamilton-Fkt. führt auf die bekannte Lorentzkraft.)

Gemäß Korrespondenzprinzip erhält man den q.m. Hamiltonoperator durch Ersetzung

$$\vec{x} \longrightarrow \vec{Q} \quad \text{Ortsoperator}$$

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{P} \quad \text{Impulsoperator.}$$

Wir haben also als Hamilton-Operator

$$\mathbb{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{\Pi} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{Q},t)\right)^2 + e\,\phi(\vec{Q},t)$$

und die zugehörige zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \mathbb{H}\,|\psi\rangle .$$

Das ergibt in Ortsdarstellung

$$H(\vec{A},\phi) = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t)\right)^2 + e\,\phi(\vec{x},t) \qquad (1)$$

Die Größe $(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})$ nennt man oft den "kinetischen Impuls",

$$\vec{\Pi} = m\dot{\vec{x}} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} .$$

Beachte, daß die Komponenten des entsprechenden kinetischen Impuls-Operators

$$\vec{\Pi} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t) \qquad \text{(in Ortsdarst.)}$$

nicht miteinander vertauschen:

$$[\Pi_i, \Pi_j] = i\hbar \frac{e}{c}\,\varepsilon_{ijk} B_k .$$

2) Eichinvarianz

In klassischer Elektrodynamik sind die Potentiale nur Hilfsgrößen. Für jede Funktion $\Lambda(\vec{x},t)$ ergeben sich aus den umgeeichten Potentiale

$$\left.\begin{aligned} \vec{A}' &= \vec{A} - \nabla\Lambda \,, \\ \phi' &= \phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \end{aligned}\right\} \quad (2)$$

dieselben beobachtbaren Felder $\vec{E}, \vec{B}$.

Hier treten die Potentiale aber direkt im Hamiltonoperator (und damit in der Schrödingergleichung) auf!

Die Eichtransformation (2) kann aber durch eine entsprechende Phasentransformation der Wellenfunktion kompensiert werden.

Es gilt:

Die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H(\vec{A}, \phi)\, \psi$$

mit dem Hamiltonoperator (1) behält bei Umeichung der Potentiale nach (2) und der Phasentransformation der Wellenfunktion

$$\psi'(\vec{x},t) = \exp\left[-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x},t)\right]\psi(\vec{x},t) \qquad (3)$$

ihre Form, d.h.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi' = H(\vec{A}', \phi')\,\psi' . \qquad (4)$$

Beweis:

Betrachte linke Seite von (4) (mit (3)):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi' = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right) i\hbar\left[-\frac{ie}{\hbar c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi + \frac{\partial\psi}{\partial t}\right]$$

Für die rechte Seite berechne zunächst

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}'\right)\exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right)\psi =$$

$$= \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right)\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi$$

woraus folgt

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}'\right)^2 \psi' =$$

$$= \frac{1}{2m} \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right)\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \psi \, .$$

Damit wird (4) zu

$$\exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right) i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} + \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right)\frac{e}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi$$

$$= \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right)\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi$$

$$+ \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right)\left[e\phi + \frac{e}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right]\psi \, ,$$

was äquivalent ist zu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi + e\phi\psi \, ,$$

d.h. zur Schrödingergl. für die ursprünglichen Potentiale.

□

Beachte: die Phase der transformierten Wellenfunktion ψ' ist <u>nicht meßbar</u>! (Wahrscheinlichkeitsdichte $\sim |\psi|^2$).

Man kann auch umgekehrt vorgehen:

Bei elektrisch geladenen Teilchen ändern sich die beobachtbaren Größen nicht, wenn man "global umeicht",

$$\psi \to e^{i\alpha}\psi \qquad \text{mit} \quad \alpha \in \mathbb{R} .$$

Bei ausgedehnten Systemen bedingt dies einen "Fernparallelismus" (H. Weyl).
Sein Vorschlag: Fordere lokale Eichinvarianz (3). Dann muß es Potentiale $\vec{A}, \phi$ geben, die wie in (1) im Hamilton-operator stehen und nach (2) umgeeicht werden.

Dieses Eichprinzip bildet die Grundlage der wichtigsten fundamentalen Theorien der heutigen Physik. Beispiele sind:
Elektrodynamik (bzw. QED),
elektroschwache Theorie, QCD,
allgemeine Relativitätstheorie.

3) <u>Aharonov - Bohm - Effekt</u> –

Effekte von $\vec{A}$ im magnetfeldfreien Raum

Auch wenn Teilchen sich nur im magnetfeldfreien Raum bewegen, können Effekte durch $\vec{A}$ auftreten – falls das Gebiet, in dem die Teilchen sich bewegen, nicht einfach zusammenhängend ist.

Betrachte eine Spule entlang der z-Achse, unendlich lang mit Radius R_S. Innerhalb der Spule ist Magnetfeld konstant,
$\vec{B} = (0,0,B)$. Außerhalb der Spule ist das Magnetfeld null, $\vec{B} = 0$.
Das zugehörige Vektorpotential $\vec{A}$ muß aber auch außerhalb der Spule von null verschieden sein! Betrachte hierzu Linienintegral entlang Kreis mit Radius $R > R_S$ in x-y-Ebene, der Spule umschließt.

Für das Linienintegral gilt (Stokes)

$$\oint \vec{A}(\vec{x}'(s))\,\vec{ds} = \int_F (\nabla \times \vec{A})\,dx\,dy$$

mit

$F: \; x^2 + y^2 \leq R^2$.

Da $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$ also

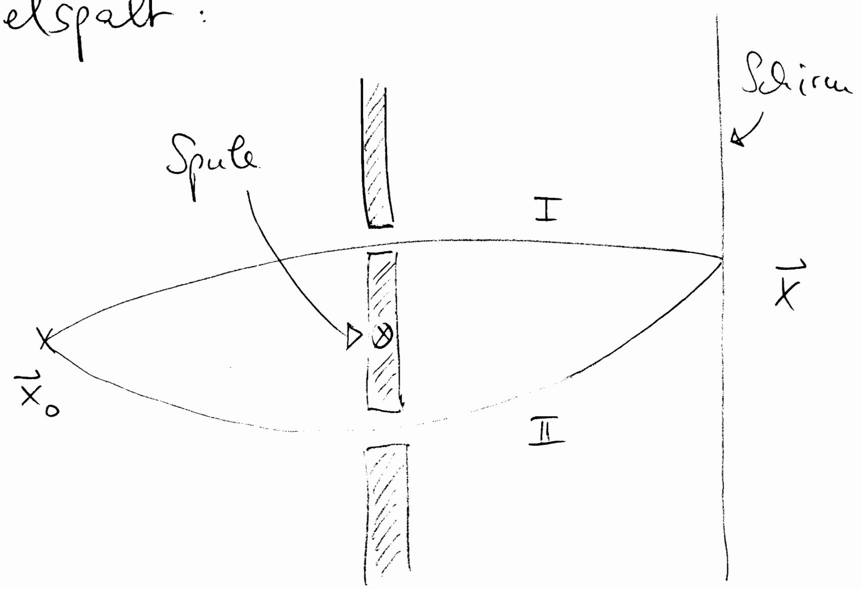
weil Weg Spule umschließt

$$\oint \vec{A}(\vec{x}'(s))\,\vec{ds} = \int_F B\,dx_1 dx_2 = \phi_m \neq 0$$

wobei ϕ_m der magnetische Fluß durch F ist.

<u>Aharonov - Bohm</u> - Effekt (s.a. Übungen)

Betrachte folgende Versuchsanordnung mit Doppelspalt:



Sei $\psi^I(\vec{x},t)$ Lösung der Schrödingergl., die Elektronenstrahl entlang Pfad I beschreibt.

Die Lösung bei eingeschaltetem Feld hängt mit der Lösung bei ausgeschaltetem Feld zusammen: (→ Übung)

$$\psi_B^I(\vec{x}) = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})\right)\psi_{B=0}^I(\vec{x})$$

mit

$$\Lambda_I(\vec{x}) = \int_{I(\vec{x}_0,\vec{x})} \vec{A}(\vec{x}'(s))\,\vec{ds}$$

← Linienintegral entlang Weg I,

d.h.

$$\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})\right)^2 \exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})\right]\psi_{B=0}^I =$$

$$= \exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x})\right](-i\hbar\nabla)^2\psi_{B=0}^I ,$$

wenn also $\psi_{B=0}^I$ Lösung der Schrödingergl. ohne Feld, so ist ψ_B^I Lösung mit Feld. Analog erhält man Lösung für Pfad II.

Wenn bei ausgeschaltetem Feld an der Stelle $\vec{x}$ (zum Beispiel) Auslöschung vorliegt, bekommen die Wege I und II bei eingeschaltetem Feld <u>zusätzliche Phasendifferenz</u>,

$$\frac{ie}{\hbar c}\Lambda_I(\vec{x}) - \frac{ie}{\hbar c}\Lambda_{II}(\vec{x}) = \frac{ie}{\hbar c}\oint \vec{A}(\vec{x}'(s))\,\vec{ds}$$
$$= \frac{ie}{\hbar c}\int B\, dx_1\, dx_2$$
$$= \frac{ie}{\hbar c}\,\Phi_m$$

magn. Fluß durch Querschnitt d. Spule

weil der aus I und II zusammengesetzte Weg die Spule umschließt.
→ Das Interferenzmuster ändert sich!

Beachte: Die Elektronen bewegen sich ausschließlich im magnetfeldfreien Raum, wo $\vec{B} = 0$ (aber $\vec{A} \neq 0$)!

Dennoch hängt die (meßbare) Phasenverschiebung nicht von $\vec{A}$ selbst ab, sondern vom meßbaren Fluß des Magnetfelds durch die von I und II eingeschlossene Fläche!

Dieses Prinzip findet Anwendung in SQUIDs ("superconducting quantum interference device) zur Messung kleiner Magnetfelder.
→ sehr empfindlich!, typische Einheit $\frac{\hbar c}{e_0} = 0.66 \cdot 10^{-7}\,\mathrm{G\,cm^2}$

4) Elimination des Potentials, konstantes Magnetfeld

Es ist immer möglich, das Potential $\vec{A}$ aus dem Hamiltonoperator zu eliminieren. Wir wollen dies hier für ein konstantes Magnetfeld $\vec{B}$ betrachten.

Wir wählen die sog. "Koordinateneichung"

$$\vec{x} \cdot \vec{A} = 0 \quad , \quad \vec{A}(\vec{0}) = 0 .$$

Für statisches Feld gilt

$$\vec{A}(\vec{x}) = \int_0^1 d\lambda \, \lambda \left[\vec{B}(\lambda \vec{x}) \times \vec{x} \right] ,$$

wie man explizit nachrechnet.

Dieser Zusammenhang ist nicht-lokal, d.h. $\vec{B}$ muß auf gesamten Strahl von $\vec{0}$ nach $\vec{x}$ bekannt sein, um $\vec{A}(\vec{x})$ zu erhalten.

Für konstantes Magnetfeld vereinfacht sich das Integral zu

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{2} \left(\vec{B} \times \vec{x} \right)$$

Damit (und mit $\phi = 0$) wird der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{2c}(\vec{B}\times\vec{x})\right)^2$$

$$= \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\nabla^2 - 2(-i\hbar)\frac{e}{2c}(\vec{B}\times\vec{x})\cdot\nabla + \left(\frac{e}{2c}\right)^2|\vec{B}\times\vec{x}|^2\right)$$

wobei $\nabla\cdot[\vec{B}\times\vec{x}] = 0$ benutzt wurde.

Es ist

$$-i\hbar\,[\vec{B}\times\vec{x}]\cdot\nabla = -i\hbar\sum_{j,k,l}\varepsilon_{jkl}B_j x_k \partial_l$$

$$= -i\hbar\,\vec{B}\cdot(\vec{x}\times\nabla)$$

$$= \vec{B}\cdot\vec{L}$$

und damit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{2mc}\vec{B}\cdot\vec{L} + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{2c}\right)^2|\vec{B}\times\vec{x}|^2 .$$

Für $\vec{B} = (0,0,B)$ also

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{2mc}B\vec{L}_3 + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{2c}\right)^2 B^2(x_1^2+x_2^2)$$

Unter Laborbedingungen ist im Atom oft $\frac{1}{2m}\left(\frac{e}{2c}\right)^2|\vec{B}\times\vec{x}|^2 \ll \frac{e}{mc}B\hbar$ und damit vernachlässigbar. Ausnahme: starke Felder, oder wenn $\langle L_3\rangle = 0$.

Der zweite Term, $-\frac{e}{2mc}\vec{L}\cdot\vec{B}$, trägt zum Paramagnetismus bei. Der dritte Term, $\frac{1}{2m}\left(\frac{e}{2c}\right)^2|\vec{B}\times\vec{x}|^2$, ergibt den Diamagnetismus.

5) Zeeman - Effekt (s. a. Übungen)

Für ein Wasserstoffatom im (schwachen) Magnetfeld erhalten wir also den Hamiltonoperator

$$H = H_0 - \frac{e}{2m_0 c}\vec{B}\cdot\vec{L} ,$$

← Masse m_0, um Verwechslung mit L_z-Quantenzahl zu vermeiden

wobei H_0 der Hamiltonoperator für ein Elektron im Coulombpotential ist,

$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e_0^2}{r}$.

Wir wollen hier den Spin des Elektrons vernachlässigen (→ "normaler" Zeeman-Effekt).

Man findet, daß die Coulomb-Wellenfunktionen auch Eigenfunktionen zu H sind,

$$H\psi_{nlm} = \left(-\frac{R_y}{n^2} - \frac{e\hbar B}{2m_0 c}m\right)\psi_{nlm} .$$

$\omega_L = -\frac{eB}{2m_0 c} = \frac{e_0 B}{2m_0 c}$ heißt Larmor-Frequenz.

6) Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen im Magnetfeld

Wir hatten gesehen, daß der Drehimpuls $\vec{L}$ eines Teilchens zu einem magnetischen Moment führt,

$$\vec{\mu}_L = \frac{e}{2mc}\vec{L},$$

das an das Magnetfeld koppelt,

$$H = \frac{e}{2mc}\vec{L}\cdot\vec{B} = \vec{\mu}_L\cdot\vec{B}.$$

In ähnlicher Weise führt auch der Spin $\vec{S}$ zu einem magnetischen Moment,

$$\vec{\mu}_S = g\,\frac{e}{2mc}\vec{S},$$

worin $\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$, und einer entsprechenden Kopplung ans Magnetfeld,

$$H = g\,\frac{e}{2mc}\vec{S}\cdot\vec{B} = \vec{\mu}_S\cdot\vec{B}.$$

Es gibt aber a priori keinen Grund, daß die Kopplung dieselbe Stärke hat wie beim Drehimpuls – daher der Faktor g, genannt <u>gyromagnetischer Faktor</u> oder <u>Landé-Faktor</u>.

Experimentell findet man für das <u>Elektron</u> $g_e \simeq 2$. Es gab nutzlose Versuche, $g_e = 2$ klassisch durch eine Ladungsverteilung im Elektron zu erhalten. Die richtige Erklärung erhält man aus der relativistischen Gleichung für das Elektron (<u>Dirac-Gleichung</u>), woraus $g_e = 2$ folgt.

QED-Korrekturen ergeben dann

$$g_e = 2\left(1 + \frac{\alpha}{\pi} - \ldots \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 + \ldots\right)$$

$$= 2.0023\ldots$$

Dieser Wert ist theoretisch sehr genau berechnet und stimmt mit dem Experiment überein. (→ genaueste Überprüfung der QED.

Für das <u>Proton</u> ist das magnetische Moment analog

$$\vec{\mu}_s^{\,p} = g_p \frac{+e_0}{2m_p c} \vec{S}$$

und man würde naiv $g_p = 2$ erwarten. Experimentell ist aber $g_p \simeq 2.8\, g_e$,

→ Proton ist nicht elementar!

Die Größe $\frac{e_0 \hbar}{2mc}$ heißt Magneton.

Für $m = m_e$ erhält man das sog.

Bohrsche Magneton $\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e c}$,

für $m = m_p$ das sog. Kernmagneton μ_K.

H-Atom im Magnetfeld mit Spin

Betrachte H-Atom im Magnetfeld (s.o., → Zeeman-Effekt), jetzt berücksichtige aber den Spin.

Wir vernachlässigen den diamagnetischen Term ($\sim B^2(x_1^2 + x_2^2)$, s.o). Dann erhält man für die Radialwellenfunktion den Hamiltonoperator

$$H(B) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right) + \frac{1}{2m_0 r^2} \vec{L}^2 + V(r) \right)$$

$$+ \frac{e_0}{2m_0 c} B \left(L_3 + g_e S_3 \right),$$

der mit $\vec{L}^2, \vec{S}^2, L_3, S_3$ vertauscht.

Sei dann

$$R_{E,lm}(r)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi)\, |\chi_s\rangle$$

Eigenzustand d. H-Atoms ohne Magnetfeld.

d.h.

$$H(B)\big|_{B=0} R_{E,lm} Y_l^m |\chi_s\rangle = E\, R_{E,lm} Y_l^m |\chi_s\rangle$$

mit

$$S_3 |\chi_s\rangle = s |\chi_s\rangle \quad , \quad s = \pm \tfrac{1}{2} .$$

Dann ist mit Magnetfeld

$$H(B)\, R_{E,lm} Y_l^m |\chi_s\rangle =$$

$$= \left[H(B)\big|_{B=0} + \frac{e_0}{2m_0 c} B \left(L_3 + g_e S_3 \right) \right] R_{E,lm} Y_l^m |\chi_s\rangle$$

$$= \left[E + \frac{e_0}{2m_0 c} B \left(m + g_e s \right) \right] R_{E,lm} Y_l^m |\chi_s\rangle$$

→ Man erwartet also eine entsprechende Aufspaltung der Linien durch die Wechselwirkung des Spins mit dem Magnetfeld.

Dies wird experimentell gut bestätigt für <u>starke</u> Magnetfelder (→ <u>Paschen-Back</u>-Effekt).

Beachte: hier fehlt noch Spin-Bahn-Kopplung (wichtig bei schwachem Magnetfeld).