

# Elektronen im Magnetfeld

## Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie

Institut für theoretische Physik      Institut für Festkörpertheorie

Betreuer: Prof. Dr. Krüger

Mark Stringe

04. Dezember 2013

### Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Elektronen im periodischen Potential im Magnetfeld</b>	<b>1</b>
1.1	Bloch-Theorem . . . . .	1
1.2	Magnetischer Translationsoperator . . . . .	2
1.3	Hofstadter-Schmetterling . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Wasserstoff im starken Magnetfeld</b>	<b>5</b>
2.1	Motivation . . . . .	5
2.2	Lösungsmethode . . . . .	5
2.3	Diskussion . . . . .	5

# 1 Elektronen im periodischen Potential im Magnetfeld

Im Folgenden sollen Elektronen in einem periodischen Potential, wie es sich zum Beispiel in einem Kristallgitter ergibt, betrachtet werden. Diese Elektronen sollen außerdem einem Magnetfeld ausgesetzt werden.

## 1.1 Bloch-Theorem

Gegeben sei ein periodisches Potential mit:  $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{a})$ . Der Hamilton-Operator für ein solches Potential ist allgemein gegeben mit:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\vec{r})$$

Dieser ist invariant unter Translationen um einen beliebigen (Gitter-)Vektor  $\vec{a}$ , sodass gilt:

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{a}}] = 0$$

Der Translationsoperator  $\hat{T}_{\vec{a}}$  sei definiert durch:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{a}}(\hat{H}\psi(\vec{r})) &= \hat{H}(\vec{r} + \vec{a})\psi(\vec{r} + \vec{a}) \\ &= \hat{H}(\vec{r})\psi(\vec{r} + \vec{a}) \end{aligned}$$

Die Eigenwerte zur Eigenwertgleichung

$$\hat{T}_{\vec{a}} \psi = \lambda_{\vec{a}} \psi$$

des Translationsoperators erhält man durch das Hintereinanderanwenden von zwei verschiedenen Translationsoperatoren, da die Translationen um zwei bestimmte Vektoren  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  auch als eine Verschiebung um die Summe der beiden Vektoren dargestellt werden kann:

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\vec{a}_2} \hat{T}_{\vec{a}_1} \cdot \psi(\vec{r}) &= \psi(\vec{r} + \vec{a}_1 + \vec{a}_2) \\ &= \hat{T}_{\vec{a}_1 + \vec{a}_2} \cdot \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Woraus für die Eigenwerte mit obiger Eigenwertgleichung direkt folgt:

$$\lambda_{\vec{a}_1} \cdot \lambda_{\vec{a}_2} = \lambda_{\vec{a}_1 + \vec{a}_2}$$

Da die Wellenfunktion normierbar bleiben soll, muss  $|\lambda_{\vec{a}}|^2 = 1$  gelten. Die Eigenwertgleichung wird nun gelöst durch:

$$\lambda = e^{-i\gamma}$$

Insgesamt ergibt sich also in einem Kristall mit Gittervektor  $\vec{a}$  und reellem Vektor  $\vec{k}$ :

$$\hat{T}_{\vec{a}} \psi = e^{i\vec{k}\vec{a}} \psi$$

Wird  $\vec{k}$  bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung berücksichtigt, ergibt sich das **Bloch-Theorem**:

$$\hat{H} \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}} \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

mit

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k}\vec{a}} \cdot \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

## 1.2 Magnetischer Translationsoperator

Der Translationsoperator lässt sich für den Fall ohne Magnetfeld in folgender Form darstellen:

$$\hat{T}_{\vec{a}} = e^{i\frac{\vec{a}\cdot\hat{p}}{\hbar}}$$

Wirkt ein zusätzliches Magnetfeld auf das System, ergibt sich der Hamilton-Operator zu

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p} + e\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}),$$

wobei hinsichtlich einer Translation für das Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{r}) \neq \vec{A}(\vec{r} + \vec{a})$  gilt. Die Translationsinvarianz des Systems geht folglich verloren. Es erweist sich als sinnvoll, einen neuen Translationsoperator zu definieren. Für ein Magnetfeld mit  $A = \frac{1}{2}B \times r$  ergibt sich der magnetische Translations-Operator[6] wie folgt

$$\begin{aligned} \hat{T}_m(\vec{a}) &= \exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right)\vec{a} \cdot \left(\hat{p} + \frac{e}{2}(\vec{r} \times \vec{B})\right)\right] \\ &= \exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right)\vec{a} \cdot \hat{p}\right] \cdot \exp\left[\frac{i}{2} \cdot \underbrace{\left(\frac{e\vec{B}}{\hbar} \times \vec{a}\right)}_{=\vec{\beta}} \cdot \vec{r}\right], \end{aligned}$$

wobei  $\hat{H}$  und  $\hat{T}_m$  kommutieren:  $[\hat{T}_m, \hat{H}] = 0$ . Untereinander vertauschen diese Translationsoperatoren jedoch nicht. Wendet man sie hintereinander an ergibt sich:

$$\begin{aligned} \hat{T}_m(\vec{a}_2)\hat{T}_m(\vec{a}_1) &= \underbrace{e^{i\frac{\vec{\beta}\cdot(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{\hbar}}}_{\text{Phasenfaktor}} \cdot \hat{T}_m(\vec{a}_2 + \vec{a}_1) \\ &= e^{-\frac{i e}{\hbar} \Phi} \hat{T}_m(\vec{a}_2 + \vec{a}_1) \end{aligned}$$

Es ergibt sich somit ein *Phasenfaktor* in Abhängigkeit vom  $\frac{1}{2}$ -fachen Magnetischen Fluss durch die von den Vektoren  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$  aufgespannte Fläche:

$$\Phi = \frac{1}{2}\vec{B}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_1)$$

Um das Bloch-Theorem nun anwendbar zu machen, muss für den Phasenfaktor gelten:

$$1 = e^{-\frac{i e}{\hbar} \Phi}$$

Diese Bedingung ist genau dann erfüllt, wenn der Fluss  $\Phi$  ein ganzzahliges Vielfaches des *Magnetischen Flussquants*  $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e} \approx 4.14 \cdot 10^{-15} \text{Wb}$  ist. Das Verhältnis  $\frac{\Phi}{\Phi_0}$  muss in diesem Fall also rational sein. Dann ergibt sich eine Teilmenge kommutierender Magnetischer Translations-Operatoren.

## 1.3 Hofstadter-Schmetterling

Ein verdeutlichendes Beispiel ist gegeben durch das 2D-Energieband in einem quadratischen Gitter. Dies ist als Beispiel gegeben durch:

$$E(\vec{k}) = 2E_0[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$$

Hier ist direkt zu erkennen, dass die Energien in einem Intervall  $[-4, 4]E_0$  liegen. Mit der *Peierls-Substitution*

$$\hbar\vec{k} = \hat{p} + e\vec{A}$$

ergibt sich ein, das Magnetfeld berücksichtigender Hamilton-Operator:

$$E(\vec{k}) \rightarrow \hat{H}(\hat{p} + e\vec{A})$$

## Elektronen im periodischen Potential im Magnetfeld

---

Die zu lösende Schrödinger Gleichung ist:

$$\hat{H}(\hat{p} + e\vec{A}) \cdot \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}} \cdot \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Stellt man diese Gleichung jetzt für das Magnetfeld  $\vec{B} = B \cdot \hat{e}_z$  also  $\vec{A} = Bx \cdot \hat{e}_y$  explizit auf, ergibt sich die zu lösende Schrödinger Gleichung zu:

$$\underbrace{2E_0 \{ \cos[(p_x a)/\hbar] + \cos[(p_y + eBx)a/\hbar] \}}_{=\hat{H}(\hat{p}+e\vec{A})} \cdot \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E \cdot \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Umgeformt:

$$E_0 (e^{\frac{ip_x a}{\hbar}} + e^{-\frac{ip_x a}{\hbar}} + e^{\frac{ip_y a}{\hbar}} e^{\frac{ieBxa}{\hbar}} + e^{-\frac{ip_y a}{\hbar}} e^{-\frac{ieBxa}{\hbar}}) \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Translationen auf Wellenfunktionen angewandt:

$$E \cdot \varphi_{n,\vec{k}}(x, y) = E_0 (\varphi_{n,\vec{k}}(x+a, y) + \varphi_{n,\vec{k}}(x-a, y) + e^{i\frac{eBxa}{\hbar}} \varphi_{n,\vec{k}}(x, y+a) + e^{-i\frac{eBxa}{\hbar}} \varphi_{n,\vec{k}}(x, y-a))$$

Mit der Substitution

$$x = ma, \quad y = na$$

und dem Ansatz

$$\varphi_{n,\vec{k}}(ma, na) = e^{i\nu n} g(m),$$

wobei  $e^{i\nu n}$  einer ebenen Welle der Form  $e^{ik_y y}$  entspricht, ergibt sich die *Harper-Gleichung* mit  $\epsilon = \frac{E}{E_0}$ :

$$\epsilon \cdot g(m) = g(m+1) + g(m-1) + 2 \cos(2\pi m \cdot \underbrace{\frac{Ba^2}{2\pi\hbar}}_e - \nu) g(m)$$

$\underbrace{e}_{=\alpha}$

Hier sei erwähnt, dass gilt:

$$\alpha = \frac{Ba^2}{2\pi\hbar} = \frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{L}{N} \quad N, L \in \mathbb{Z}$$

Die *Harper-Gleichung* kann in Matrixschreibweise umgeformt werden:

$$\begin{pmatrix} g(m+1) \\ g(m) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \epsilon - 2 \cos(2\pi m \alpha - \nu) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=A(\alpha, m)} \begin{pmatrix} g(m) \\ g(m-1) \end{pmatrix}$$

Für einen beliebig gewählten Anfangsvektor  $\begin{pmatrix} g(1) \\ g(0) \end{pmatrix}$  generiert sukzessives  $m$ -faches Anwenden von A:  $\begin{pmatrix} g(m+1) \\ g(m) \end{pmatrix}$

Physikalische Bedingungen für die Matrix sind reelles  $\nu$  und  $\epsilon$  [6]. Die Wellenfunktion muss normierbar bleiben. Die Matrix ist also  $A(\alpha, m)$  periodisch mit  $N$ . Da die Eigenwerte von  $A(\alpha, m)$  nun kleiner eins sein müssen, ergibt sich folgende Bedingung:

$$Spur \left( \prod_{m=0}^N A(\alpha, m) \right) \leq 2$$

Hieraus ergibt sich ein Polynom in  $E$  vom Grad  $N$ . Die Energien werden durch die folgende Abbildung dargestellt.

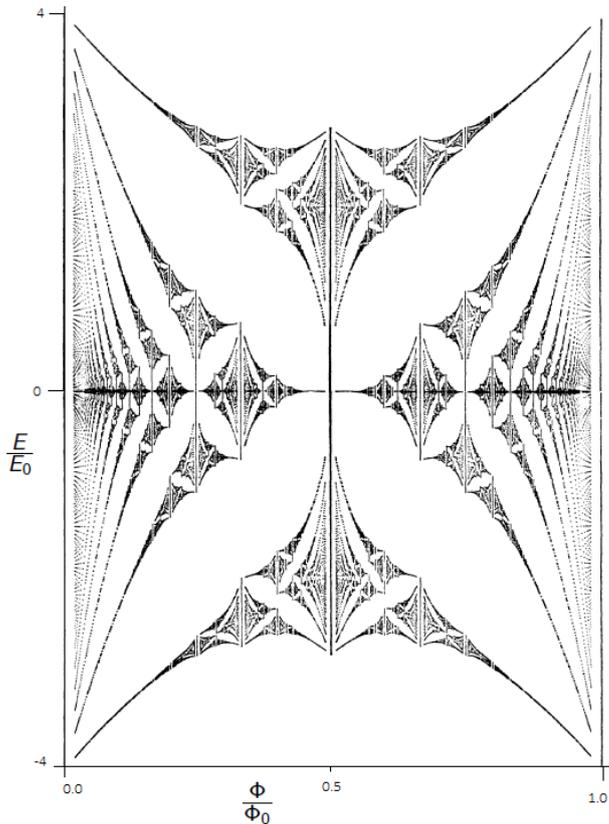


Abbildung 1: Hofstadter-Schmetterling. Energieniveaus von Bloch-Elektronen im Magnetfeld. Energie genormt auf  $E_0$  aufgetragen gegen das Verhältnis des magnetischen Flusses zum magnetischen Flussquantum.[10]

Die Stärke von Magnetfeldern, die im Labor erzeugt werden, ist nicht ausreichend, um für "gewöhnliche" Kristalle die oben gezeigten Phänomene abzubilden, da die Einheitszellen relativ klein sind und folglich der magnetische Fluss klein gegen das Flussquantum ist. In neueren Experimenten werden deshalb zwei Materialien mit leicht unterschiedlichen Gitterkonstanten aufeinander gelegt und um einen bestimmten Winkel  $\Theta$  verdreht, sodass Moiré-Strukturen entstehen, die ein Übergitter mit relativ großen Einheitszellen besitzen.

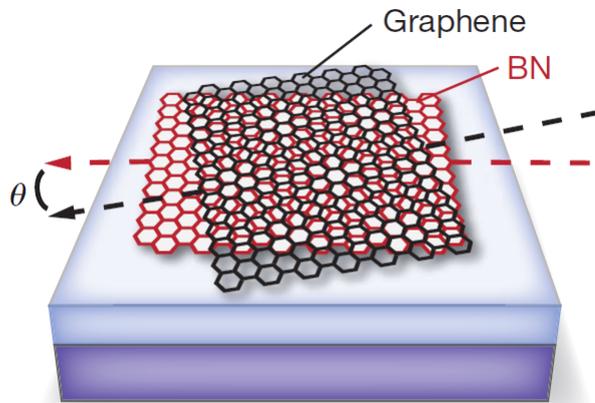


Abbildung 2: Moiré-Muster hBN und Graphen[7]

## 2 Wasserstoff im starken Magnetfeld

### 2.1 Motivation

Die Astrophysik liefert ein Beispiel dafür, dass sehr starken Magnetfeldern durchaus eine Bedeutung bei der quantenmechanischen Beschreibung von Systemen eingeräumt werden muss. Es lassen sich zum Beispiel Sterne (Weiße Zwergsterne, Neutronensterne) beobachten, deren magnetische Felder Feldstärken von  $10^3$  T -  $10^9$  T erreichen.

Von großen Magnetfeldern wird im Folgenden gesprochen, wenn  $B \gtrsim B_0 = 4,7 \cdot 10^5$  T ist.

### 2.2 Lösungsmethode

Angenommen sei ein Magnetfeld:  $\vec{B} = B \cdot \vec{e}_z$  und  $A = -\frac{1}{2}B \times r$  Berücksichtigt man das Vektorpotential nun im Hamilton-Operator, ergibt sich ohne Spin:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p} + e\vec{A})^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Mit dem Drehimpuls  $\vec{L} = -(\vec{p} \times \vec{r})$ , der Coulombbeziehung  $div\vec{A} = 0$  des Vektorpotentials und einigen Umformungen ergibt sich:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{eB}{2m_e} L_z + \frac{e^2 B^2}{8m_e} (x^2 + y^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Wobei dieser Hamilton-Operator ohne den  $B^2$ -Term die Schrödinger-Gleichung exakt löst. Für Magnetfelder mit  $B \lesssim B_0$  bietet sich ein kugelsymmetrischer Ansatz an:

$$\psi_m(r, \Theta, \varphi) = \sum_l f_l(r) \cdot Y_{lm}(\Theta, \varphi)$$

Werden die Magnetfelder stärker, das heißt gilt  $B \gtrsim B_0$ , so bietet sich ein zylindersymmetrischer Ansatz an:

$$\psi_m(\varrho, \varphi, z) = \sum_n g_n(z) \cdot \Phi_{nm}^{Lan}(\varrho, \varphi)$$

Bei Zweitem sind  $\Phi_{nm}^{Lan}(\varrho, \varphi)$  mit  $(n = 0, 1, 2, \dots)$  die Landauwellenfunktionen. Die Bewegung parallel zum Feld wird durch  $g_n(z)$  beschrieben. Für starke Magnetfelder liefert der zylindersymmetrische Ansatz nach Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung:

$$-Eg_n(z) - \frac{d^2}{dz^2}g_n(z) - \sum_{n'} V_{nn'm}(z) \cdot g_{n'}(z) = 0$$

mit dem Potential:

$$V_{nn'm}(z) = \int \varrho \cdot d\varrho d\varphi \cdot \Phi_{nm}(\varrho, \varphi) \frac{2}{\sqrt{\varrho^2 + z^2}} \Phi_{n'm}(\varrho, \varphi)$$

Dieses Problem kann nun numerisch gelöst werden.

### 2.3 Diskussion

Stellt man nun die Verschiebung bzw. Aufspaltung der Energieniveaus des Wasserstoffatoms dar, erhält man ein Schema wie in Abbildung 3.

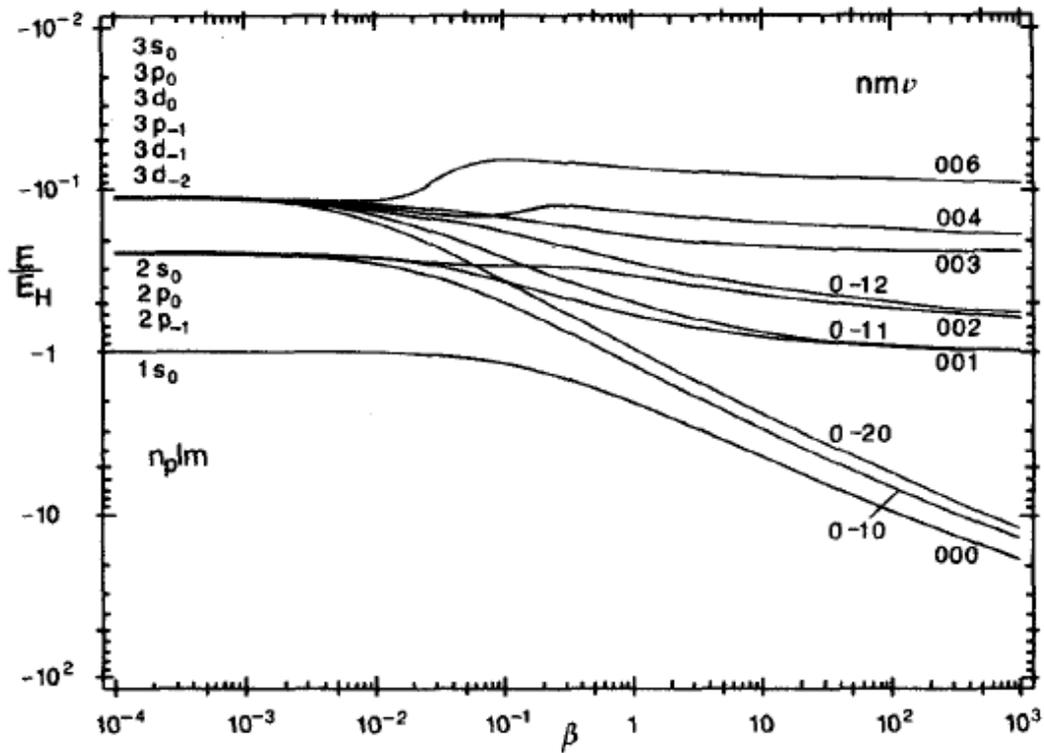


Abbildung 3: Energien von Wasserstoff-Zuständen auf die Rydberg-Energie  $E_H$  genormt.  $\beta = \frac{B}{B_0}$ . Links sind die üblichen Niveaus ohne Magnetfeld dargestellt. Landau-Quantenzahlen  $n, m, \nu$ , wobei  $\nu$  die Knoten des longitudinalen Teils ( $z$ -Komponente) der Wellenfunktion angibt. Energieniveaus mit  $m < 0$  werden abgesenkt. [3]

## Wasserstoff im starken Magnetfeld

Veränderungen der Atomstruktur lassen sich an folgender Abbildung erkennen.

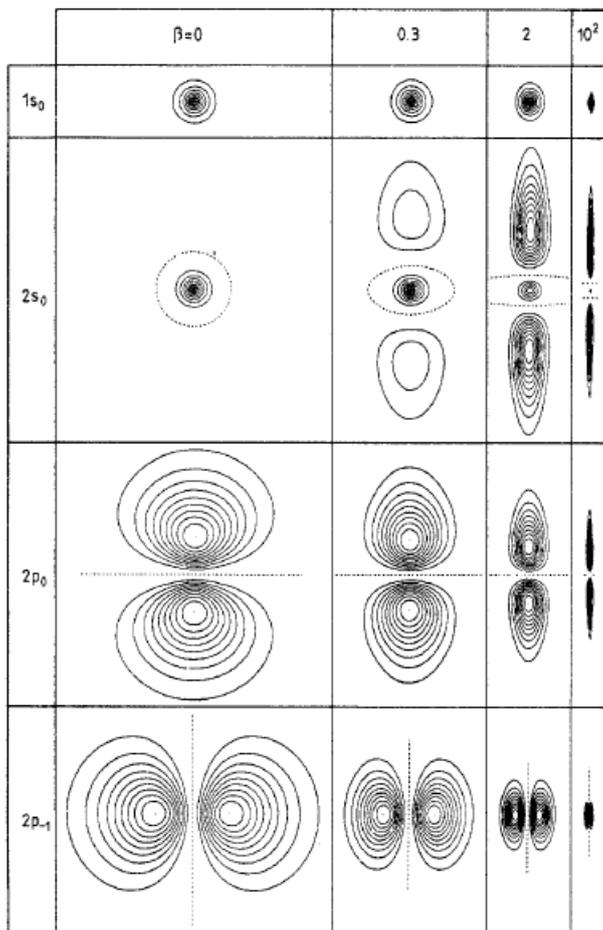


Abbildung 4: Linien konstanter Elektronen-Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der x-z-Ebene mit einem Magnetfeld in  $\vec{e}_z$ . Mit  $\beta = \frac{B}{B_0}$ . Die Orbitale werden mit steigendem  $\beta$  senkrecht zum Feld zunehmend eingeschnürt. [3]

### Literatur

- [1] D. Weiss, *Nature Physics* 9, 395 (2013)
- [2] H. Conradi, Zusammenfassung eines Seminarvortrags über Elektronen im Magnetfeld, Münster (2013)
- [3] H. Ruder, *Phys. Bl.* 39, 183 (1983)
- [4] W. Rösner et al., *Phys. Rev.* A28, 2071 (1983)
- [5] W. Rösner et al., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 17, 29 (1984)
- [6] J. Callaway, "Quantum Theory of the Solid State", 2nd Edition, Academic Press (Boston 1991)
- [7] C.R. Dean et al., *Nature* 497, 598 (2013)
- [8] Nature.com, doi: 10.1038/nature12186
- [9] M.Gruber, Diplomarbeit "Das Spektrum des Schrödinger-Operators mit periodischem Magnetfeld und elektrischem Potential. Mathematische und physikalische Aspekte", Uni. Augsburg (1994)
- [10] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* 14, 6 (1976)