English Summary:

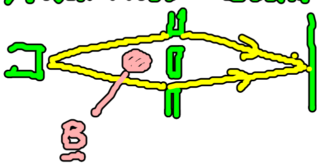
particle in electromagnetic field:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}(\underline{r},t)\right)^2 + e\phi(\underline{r},t)$$

gauge transformation: $A' = A + \nabla G(\underline{r},t)$ $\Rightarrow \psi' = \psi(\underline{r},t)\, e^{i\frac{e}{\hbar}G(\underline{r},t)}$

$\phi' = \phi - \frac{\partial}{\partial t}G(\underline{r},t)$

Aharonov-Bohm



$A' = 0$

$$\psi = \psi' \exp\left\{ i\frac{e}{\hbar}\int_{\underline{r}_0}^{\underline{r}} A(\underline{s})\,d\underline{s}\right\}$$

$$\psi(\underline{r}_0) = \psi'(\underline{r}_0)\, e^{i\frac{2e}{\hbar}\oint \underline{A}\,d\underline{s}} \overset{!}{=} \psi'(\underline{r}_0)$$

magnetic flux quantization in superconductors

$$\oint d\underline{s}\, A(\underline{s}) \underset{\text{Stokes}}{=} \int d\underline{f}\, \mathrm{rot}\,\underline{A} = \int d\underline{f}\cdot\underline{B} = \Phi_B \overset{!}{=} n\Phi_0 \quad \left(\text{flux quantum } \Phi_0 = \frac{\hbar\pi}{e}\right)$$

$n \in \mathbb{N}$

1.4 Kontinuitätsgleichung

Schrödinger-Gl. für Teilchen in Potentialen $\underbrace{V, \underline{A}}_{\text{reell}}$:

$$i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}\right)^2\psi + V\psi$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}\right)\psi + V\psi$$

$$= \frac{1}{2m}\Big[-\hbar^2\Delta\psi + \underbrace{i\hbar e\underline{\nabla}(\underline{A}\psi) + i\hbar e\underline{A}(\underline{\nabla}\psi) + e^2\underline{A}^2\psi}_{\text{magnetfeldabh. Terme}}\Big] + V\psi$$

konj. komplex

$$-i\hbar\dot{\psi}^* = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\Delta\psi^* - i\hbar e\underline{\nabla}(\underline{A}\psi^*) - i\hbar e\underline{A}(\underline{\nabla}\psi^*) + e^2\underline{A}^2\psi^*\right] + V\psi^*$$

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = i\hbar(\psi^*\dot\psi + \dot\psi^*\psi)$$

$$= \psi^* \hat{H}\psi - \psi(\hat{H}\psi)^*$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*)}_{\underline{\nabla}(\psi^*\underline{\nabla}\psi - \psi\underline{\nabla}\psi^*) - \underbrace{(\underline{\nabla}\psi^*\underline{\nabla}\psi - \underline{\nabla}\psi\underline{\nabla}\psi^*)}_{0}} + \frac{e^2}{2m}\underbrace{(\psi^*\underline{A}^2\psi - \psi\underline{A}^2\psi^*)}_{0} + \underbrace{\psi^*V\psi - \psi V\psi^*}_{0}$$

$$+ \frac{i\hbar e}{2m}\Big(\underbrace{\psi^*\underline{\nabla}(\underline{A}\psi) + \underline{A}\psi\underline{\nabla}\psi^*}_{\underline{\nabla}(\psi^*\underline{A}\psi)} + \underbrace{\psi\underline{\nabla}(\underline{A}\psi^*) + \underline{A}\psi^*\underline{\nabla}\psi}_{\underline{\nabla}(\psi\underline{A}\psi^*)}\Big)$$

$$= \underline{\nabla}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\underline{\nabla}\psi - \psi\underline{\nabla}\psi^*) + i\frac{\hbar e}{m}\underline{A}\psi\psi^*\right\}$$

Dies hat die Form einer Kontinuitätsgl.:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \underline{\nabla}\cdot\underline{j} = 0}$$

<u>lokale</u> Wahrscheinlichkeitserhalt.

für Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$

und Wahrscheinlichkeits<u>stromdichte</u>

$$\underline{j} = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\underline{\nabla}\psi - \psi\underline{\nabla}\psi^*) - \frac{e}{m}\underline{A}\psi\psi^*$$

$$= \frac{1}{2m}\left\{\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}\right)\psi + \psi\left(-\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}\right)\psi^*\right\}$$

$$\boxed{\underline{j} = \frac{1}{2m}\left\{\psi^*\hat{\underline{p}}_{kin}\psi + \psi(\hat{\underline{p}}_{kin}\psi)^*\right\}}$$

mit dem kinet. Impuls-Op. $\hat{\underline{p}}_{kin} := \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}$

<u>Bemerkung</u>:

(1) Kanon. Impulsop. $\hat{\underline{p}} := \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$ (klass. $p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot q_j}$)

$\updownarrow$

Kinet. Impulsop. $\hat{\underline{p}}_{kin} := \hat{\underline{p}} - e\underline{A}$, hängt mit dem

Geschwindigkeitsop. $\hat{\underline{v}} := \frac{\hat{\underline{p}}_{kin}}{m}$ zusammen

Die Kontinuitätsgl. lautet dann:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \underline{\nabla}\cdot\underline{j} = 0} \quad \text{mit} \quad \boxed{\underline{j} = \frac{1}{2}\left\{\psi^*\hat{\underline{v}}\psi + \psi(\hat{\underline{v}}\psi)^*\right\}}$$

analog zur Kontinuitätsgl. für klass. Dichte ϱ:

$$\dot{\varrho} + \underline{\nabla}\cdot\underline{j} = 0 \quad \text{mit} \quad \underline{j} = \varrho\underline{v}$$

Quantenmech. muss die symm. reelle Form $\underline{j} = \mathrm{Re}\{\psi^*\hat{\underline{v}}\psi\}$ gewählt werden, da $\varrho\hat{\underline{v}}$ oder $\hat{\underline{v}}\varrho$ nicht wohldefiniert ist.

(2) In $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\underline{p}} - e\underline{A})^2 = \frac{1}{2m}[\hat{\underline{p}}^2 - e\hat{\underline{p}}\underline{A} - e\underline{A}\hat{\underline{p}} + e^2A^2]$

ist die Reihenfolge der Faktoren zu beachten!

Nur in Coulomb-Eichung ($\underline{\nabla}\cdot\underline{A} = 0$) gilt:

$$(\hat{\underline{p}}\underline{A} + \underline{A}\hat{\underline{p}})\psi = \frac{\hbar}{i}[\underline{\nabla}(\underline{A}\psi) + \underline{A}(\underline{\nabla}\psi)]$$
$$= \frac{\hbar}{i}[\underbrace{(\underline{\nabla}\cdot\underline{A})}_{0}\psi + 2\underline{A}(\underline{\nabla}\psi)] = 2\underline{A}\hat{\underline{p}}\psi$$

also $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\underline{p}}^2 - 2e\underline{A}\hat{\underline{p}} + e^2\underline{A}^2)$

(3) lokale Wahrscheinl.erhalt. (=-bilanz) $\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \underline{\nabla}\underline{j} = 0$

folgt globale Wahrscheinl.erhalt. (Normierung der Wellenfkt.):

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{\mathbb{R}^3}|\psi|^2 d^3r = -\int_V \underline{\nabla}\cdot\underline{j}\, d^3r \underset{\text{Gauß}}{=} -\oint_{\partial V}\underline{j}\cdot d\underline{f} \overset{!}{=} 0 \quad \text{da } \underline{j}\big|_\infty = 0$$

1.5 Zeitunabhängige Schrödingergl. u. stationäre Zustände

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = \hat{H}\psi(r,t)}$$ Schrödgl. mit zeitunabh. $\hat{H}$

Anfangs-Randwertproblem

Anfangsbed. $\psi(\underline{r},0)$ geg.

Randbed.: Normierung $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\underline{r},t)|^2 d^3r < \infty$

$\Rightarrow |\psi(\underline{r},t)| \to 0$ für $|\underline{r}| \to \infty$

Separationsansatz (spezielle Lösung)

$\psi(\underline{r},t) = \varphi(\underline{r})T(t)$ eingesetzt:

$$i\hbar\varphi\dot{T} = T\hat{H}\varphi$$

$$\underbrace{i\hbar\frac{\dot{T}}{T}}_{\text{hängt nur von } t \text{ ab}} = \underbrace{\frac{\hat{H}\varphi}{\varphi}}_{\text{hängt nur von } \underline{r} \text{ ab}} = E = \text{const.}$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{array}{l} \dot{T} = -\frac{i}{\hbar}ET \\ \hat{H}\varphi(\underline{r}) = E\varphi(\underline{r}) \end{array}} \Rightarrow T_E(t) = c\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

zeitunabhängige Schrödingergl.

Eigenwertproblem des Hamilton-Op.

$$\hat{H}\varphi_E = E\varphi_E$$

Energie-Eigenfkt. $\varphi_E(\underline{r})$

Energie-Eigenwerte E

(mögliche Messwerte der Observablen "Energie")

Energie-Eigenzustände

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

heißen stationäre Zustände, da die zugehörige Wahrscheinl.dichte

$$|\psi_E|^2 = |\varphi_E(\underline{r})|^2$$

zeitunabh. ist.

(NB: Wellenfkt. $\psi_E(x,t)$ ist zeitabh., da
die Materiewellen mit $\omega = \frac{E}{\hbar}$ nach
deBroglie oszilliert — gilt auch
mit Pot.!)

Weiterhin sind alle <u>Erwartungswerte</u> von
Observablen $F(\underline{p},\underline{q})$ in Energie-Eigenzuständen
zeit<u>un</u>abhängig:

$$\langle F(\hat{\underline{p}},\hat{\underline{q}})\rangle = \int \psi_E^* F(\hat{\underline{p}},\hat{\underline{q}})\psi_E \, d^3r = \int \varphi_E^*(r) F\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla},\underline{r}\right)\varphi_E(r)\, d^3r$$

Insbesondere:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\underline{r}}\rangle = 0 \quad , \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{\underline{p}}\rangle = 0$$

<u>Bem.</u>:

(1) Die Energie-Eigenwerte E des Hamilton-Op.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}\right)^2 + V$$

sind reell.

<u>Beweis</u>: Nach § 1.4:

$$\psi^*\hat{H}\psi - (\hat{H}\psi)^*\psi = -i\hbar\,\underline{\nabla}\,\underline{j}$$

$$\int_{\mathbb{R}^3}\psi^*\hat{H}\psi\, d^3r - \int_{\mathbb{R}^3}(\hat{H}\psi)^*\psi\, d^3r = -i\hbar\int_{\mathbb{R}^3}\underline{\nabla}\,\underline{j}\, d^3r \overset{\text{Gauß}}{=} -i\hbar\int_{\partial\mathbb{R}^3}\underline{j}\cdot d\underline{f} = 0$$

Andererseits

$$\int\psi^*\hat{H}\psi\, d^3r = \int\psi^* E\psi\, d^3r = E\int\psi^*\psi\, d^3r = E$$

$$\int(\hat{H}\psi)^*\psi\, d^3r = \int(E\psi)^*\psi\, d^3r = E^*\int\psi^*\psi\, d^3r = E^*$$

$$\Rightarrow \quad E = E^*$$

(Für komplexes $E = E_1 + iE_2$ wäre $|\psi_E|^2 = e^{2\frac{E_2 t}{\hbar}}|\varphi_E|^2$
zeitabh. $\Rightarrow$ zerfallende Zustände für $E_2 < 0$)

(2) Energie-Eigenzustände sind scharf in der Energie aber beliebig unscharf in der Zeit

$\langle \hat{H} \rangle = E$ Erwartungswert = Eigenwert

Klass. Mechanik: H zeittranslationsinvar. $\Rightarrow E$ Erhalt.größe

H ortstranslationsinvar. $\Rightarrow \underline{p}$ Erhalt.größe

(3) Die Bedingung der Normierbarkeit schränkt die zulässigen Werte der Energie ein (Randbedingungen $\Rightarrow$ Eigenwertproblem)