English Summary:

1.3 Schrödinger equation in real space representation:

state $\longrightarrow$ wave fct. $\psi(\underline{r},t)$

observable $\longrightarrow$ momentum op. $\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

measurement value $\longrightarrow$ eigenvalue $\underline{p} = \hbar \underline{k}$ $(\in \mathbb{R}^3!)$

$$\boxed{\hat{\underline{p}}\psi = \underline{p}\psi}$$

mean value of many measurements $\longrightarrow$ expectation value

$$\langle \hat{\underline{p}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{\underline{p}} \psi \, d^3r$$

classical mechanics:

conserved quantity (e.g. momentum) $\hat{=}$ qm. eigenstate (e.g. momentum eigenstate)

Hamilton fct. $H(\underline{p},\underline{q})$ $\longrightarrow$ Hamilton op. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r})$

time-dep. Schrödinger eq. $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r},t) = \hat{H}\psi(\underline{r},t)}$

interpretation $|\psi(\underline{r},t)|^2$ = probability density of finding electron at $\underline{r}$ at time t

wavepacket $\psi(\underline{r},t) = \int \tilde{\psi}(\underline{k}) e^{i(\underline{k}\underline{r}-\omega t)} d^3k$, $\omega(\underline{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

Teilchen der Ladung e im elektromagn. Feld

Klass. Lagrange-Fkt. $L(\underline{q},\dot{\underline{q}},t) = T - V = \frac{m}{2}\dot{\underline{q}}^2 + e\left[\dot{\underline{q}}\cdot\underline{A}(\underline{q},t) - \phi(\underline{q},t)\right]$

$$\underline{E} = -\nabla\phi - \dot{\underline{A}}$$

$$\underline{B} = \nabla \times \underline{A}$$

kanon. konjug. Impuls $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = m\dot{q}_k + eA_k$

$$\Rightarrow \quad \dot{q}_k = \frac{1}{m}\underbrace{(p_k - eA_k)}_{\text{kinet. Impuls}}$$

klass. Hamiltonfkt.:

$$H(\underline{p},\underline{q}) = \underline{p}\,\dot{\underline{q}} - L = (m\dot{\underline{q}} + \cancel{e\underline{A}})\dot{\underline{q}} - \frac{m}{2}\dot{\underline{q}}^2 - e(\cancel{\dot{\underline{q}}\underline{A}} - \phi)$$

$$= \frac{m}{2}\dot{\underline{q}}^2 + e\phi = \frac{1}{2m}(\underline{p} - e\underline{A})^2 + e\phi$$

Hamilton-Operator:

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

(nichtrelativist. Elektron $e<0$; klass. nichtquantisierte Felder ϕ, $\underline{A}$)

Eichtransformation:

$$\boxed{\begin{aligned} \underline{A}'(\underline{r},t) &= \underline{A}(\underline{r},t) + \underline{\nabla} G(\underline{r},t) \\ \phi'(\underline{r},t) &= \phi(\underline{r},t) - \frac{\partial}{\partial t} G(\underline{r},t) \end{aligned}}$$

mit bel. Eichfkt. $G(\underline{r},t)$

Die Wellenfkt. muss auch umgeeicht werden:

$$\boxed{\psi'(\underline{r},t) = \psi(\underline{r},t)\, e^{i\frac{e}{\hbar}G(\underline{r},t)}}$$

$|\psi'|^2 = |\psi|^2$
eichinvariant!

Beweis:

Zeige $\hat{H}'\psi' = i\hbar\dot{\psi}' \Rightarrow \hat{H}\psi = i\hbar\dot{\psi}$

(i) $\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\psi' = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\{\psi e^{\frac{i}{\hbar}eG}\} = e^{\frac{i}{\hbar}eG}\{\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\psi + e(\underline{\nabla}G)\psi\}$

(ii) $(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}')\psi' = e^{\frac{i}{\hbar}eG}\{\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underbrace{(\underline{A}' - \underline{\nabla}G)}_{\underline{A}}\}\psi$

(iii) $(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}')^2\psi' = e^{\frac{i}{\hbar}eG}(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A})^2\psi$

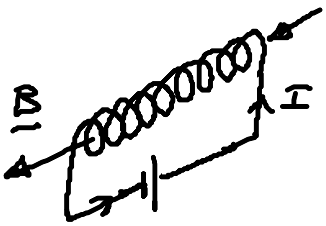
(iv) $\underbrace{\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A}')^2\psi' + e\phi'\psi'}_{\hat{H}'\psi'} = e^{\frac{i}{\hbar}eG}\{\underbrace{\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla} - e\underline{A})^2 + e\phi}_{\hat{H}\psi} - e\dot{G}\}\psi$

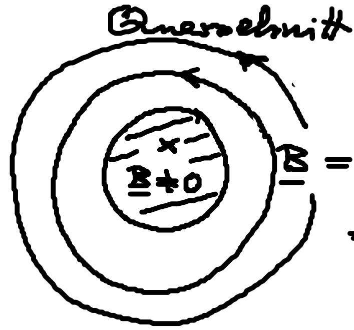
(v) $i\hbar\dot{\psi}' = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{\psi e^{\frac{i}{\hbar}eG}\} = e^{\frac{i}{\hbar}eG}\{\underbrace{i\hbar\dot{\psi}}_{\hat{H}\psi} - e\dot{G}\psi\}$

(iv) $\overset{!}{=}$ (v) $\Rightarrow \hat{H}\psi = i\hbar\dot{\psi}$ $\square$

Aharanov – Bohm – Effekt

Ein Magnetfeld $\underline{H}(\underline{r})$ mit magn. Ind. $\underline{B}(\underline{r})$ werde im Inneren einer langen Spule erzeugt; außerhalb der Spule $\underline{B}=0$.





$\underline{B} = \mathrm{rot}\,\underline{A} = 0$ i.e.

$\Rightarrow \underline{A} = \underline{\nabla}\Lambda(\underline{r}) \neq 0$

$(\underline{\nabla}\times\underline{\nabla}\Lambda = 0)$

Betrachte Gebiet $\underline{B}=0$:

Für das magnetostat. Pot. Λ gilt:

$$\Lambda(\underline{r}) = \int_{\underline{r}_0}^{\underline{r}} \underline{A}(\underline{s})\,d\underline{s}$$ (beliebiger Weg im einem einfach zus. hängenden Gebiet $\underline{B}=0$)

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

Eichtrafo: $\underline{A}' = \underline{A} + \underline{\nabla}G$ mit $G = -\Lambda$

$= 0$

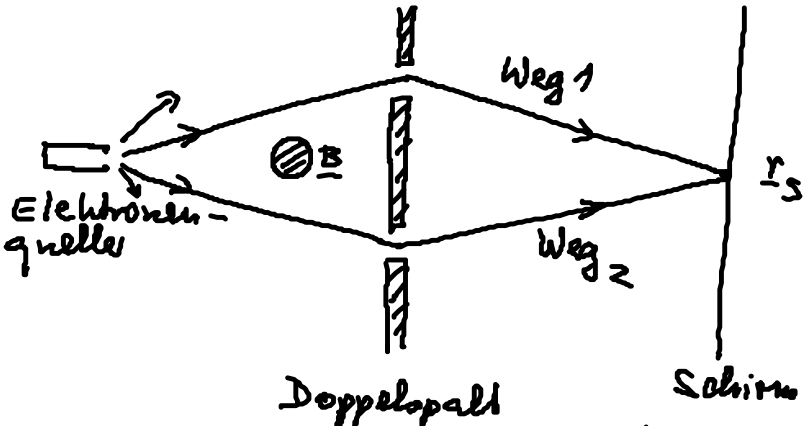
Wellenfkt. $\psi' = \psi\, e^{-\frac{i}{\hbar}e\Lambda}$ gehorcht $\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\right)^2\psi' + V\psi' = i\hbar\dot{\psi}'$

Also $$\boxed{\psi(\underline{r},t) = \psi'(\underline{r},t)\exp\left\{i\frac{e}{\hbar}\int_{\underline{r}_0}^{\underline{r}}\underline{A}(\underline{s})\,d\underline{s}\right\}}$$

$\psi(\underline{r})$: $\underline{A} \neq 0$

$\psi'(\underline{r})$: $\underline{A}' = 0$

Elektroneninterferenzexperiment:



Das Elektron bewege sich nur im Gebieten $\underline{B}=0$ (Spule abgeschirmt)

Nur Spalt 1 offen: $\psi_1(\underline{r}_S) = \psi_1' \exp\{i\frac{e}{\hbar}\int_1 d\underline{s}\cdot\underline{A}(s)\}$

Nur Spalt 2 offen: $\psi_2(\underline{r}_S) = \psi_2' \exp\{i\frac{e}{\hbar}\int_2 d\underline{s}\cdot\underline{A}(\underline{s})\}$

$$\underset{\underline{A}\neq 0}{\uparrow} \qquad \underset{\underline{A}'=0}{\uparrow}$$

Beide Spalte offen: $\psi(\underline{r}_S) = \psi_1' \exp\{i\frac{e}{\hbar}\int_1 d\underline{s}\,\underline{A}(s)\} + \psi_2' \exp\{i\frac{e}{\hbar}\int_2 d\underline{s}\,\underline{A}(s)\}$

Mit $\int_1 d\underline{s}\,\underline{A}(\underline{s}) - \int_2 d\underline{s}\,\underline{A}(s) = \oint d\underline{s}\,\underline{A}(\underline{s}) \underset{\text{Stokes}}{=} \int d\underline{f}\,\mathrm{rot}\,\underline{A} = \int \underline{B}\,d\underline{f} = \Phi_B$

magn. Fluss, der von beiden Wegen eingeschlossen ist

folgt:

$$\psi(\underline{r}_S) = \left(\psi_1'(\underline{r}_S,t)\exp\{i\tfrac{e}{\hbar}\Phi_B\} + \psi_2'(\underline{r}_S,t)\right)\exp\{i\tfrac{e}{\hbar}\int_2 d\underline{s}\,\underline{A}(\underline{s})\}$$

Die relative Phase zwischen ψ_1 und ψ_2 — und damit das <u>Interferenzbild</u> — wird bei Änderung des eingeschlossenen magn. Flusses $\Phi_B = \int \underline{B}\,d\underline{f}$ verschoben, obwohl die Elektronenwellen ausschließlich im <u>feldfreien</u> Gebiet $\underline{B}=0$ verlaufen:

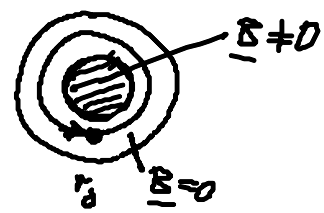
$$|\psi|^2 = |\psi_1'|^2 + |\psi_2'|^2 + 2\,\mathrm{Re}\left[\psi_1'\psi_2'^{*}\exp\{i\tfrac{e}{\hbar}\Phi_B\}\right]$$

Flussquantisierung in Supraleitern

Viele Metalle und keramische Halbleiter werden für Temp. $T < T_c$ supraleitend. Die Elektronen bilden Cooper-Paare (Ladung $2e$)

Meissner-Effekt: Magnetfeld wird aus dem Supraleiter verdrängt (Supraleiter 1. Art)

Supraleitender Hohlzylinder:



Wellenfkt. der Cooperpaare:

$$\psi(\underline{r}) = \psi'(\underline{r}) \exp\left\{ i \frac{2e}{\hbar} \int_{\underline{r}_0}^{\underline{r}} d\underline{s}\, \underline{A}(\underline{s}) \right\}$$

$$\underline{r} = \underline{r}_0 : \quad \psi(\underline{r}_0) = \psi'(\underline{r}_0) \quad (*)$$

geschlossener Weg im Hohlzylinder:

$$\psi(\underline{r}_0) = \psi'(\underline{r}_0) \exp\left\{ i \frac{2e}{\hbar} \oint d\underline{s}\, \underline{A}(\underline{s}) \right\} \overset{(*)}{=} \psi'(\underline{r}_0)$$

Eindeutigkeit der Wellenfkt.

$$\frac{2e}{\hbar} \underbrace{\oint d\underline{s}\, \underline{A}(\underline{s})}_{\Phi_B} \overset{!}{=} 2\pi n \qquad n \in \mathbb{N}$$

$\Rightarrow$ Quantisierung des eingeschlossenen Flusses

$$\boxed{\Phi_B = n\, \Phi_0} \qquad n \in \mathbb{N}$$

magn. Flussquantum $\quad \Phi_0 := \frac{\hbar \pi}{e} = \frac{h}{2e} = 2.07 \times 10^{-15}\ \mathrm{Vs}$