Schrödingergleichung, Eichinvarianz

Zur Errinerung, das Elektromagnetische Feld kann mit Hilfe eines skalaren Potentials Φ und eines Vektorpotentials \vec{A} wie folgt beschrieben werden:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \tag{1}$$

$$\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A} \tag{2}$$

Dabei sind die Potentiale \vec{A} und Φ nicht eindeutig festgelegt. \vec{E} und \vec{B} sind invariant unter Eichtransfomrationen:

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \chi \tag{3}$$

$$\Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{\partial}{\partial t} \chi \tag{4}$$

Wobei χ eine beliebig differenzierbare skalare Funktion seien kann. Eichinvarianz bedeutet, dass \vec{A}' und Φ' zu den gleichen elektrischen und magnetischen Feldern führen wie die nichtgestrichenen \vec{A} und Φ . Um das zu verdeutlichen setzen wir (3) in(1) ein und erhalten:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}' = \nabla \times (\vec{A} + \nabla \chi) \tag{5}$$

$$= \nabla \times \vec{A} + \underbrace{\nabla \times \nabla \chi}_{=0} \tag{6}$$

$$= \nabla \times \vec{A} \tag{7}$$

und setzen wir analog (3) und (4) in (2) ein:

$$\vec{E} = -\nabla \Phi' - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}' \tag{8}$$

$$= -\nabla(\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\chi) - \frac{\partial}{\partial t}(A + \nabla\chi) \tag{9}$$

$$= -\nabla \Phi + \nabla \frac{\partial}{\partial t} \chi - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \chi \tag{10}$$

$$= -\nabla\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A} \tag{11}$$

Man sieht also dass die Gleichungen (7) und (11) die gleichen Felder beschreiben wie die Gleichungen (1) und (2). D.h. dass durch die Eichung wurde die Physik nicht verändert \Rightarrow **Eichinvarianz**.

Nun wollen wir die Eichinvarianz der Schrödinger Gleichung überprüfen. Die SG für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld lautet:

$$\left[\frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + \frac{e}{c}\Phi\right]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \tag{12}$$

Es gelten folgende invariante Transformationen für ein Teilchen mit Masse m und Ladung e im elektromagnetischen Feld:

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \chi \tag{13}$$

$$\Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{\partial}{\partial t} \chi \tag{14}$$

$$\psi \to \psi' = \psi \cdot e^{\frac{ie}{ch}\chi} \tag{15}$$

Wobei auch hier χ eine beliebig differenzierbare skalare Funktion ist. Zum Beweiss setzen wir die transformierten Funktionen in die Schrödinger Gleichung (12) ein:

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla\chi)\right)^2 + \frac{e}{c}(\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\chi)\right]\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}$$
(16)

Laut Korrespondenzprinzip ersetzen wir den Impuls $p \to \frac{\hbar}{i} \nabla$. Und zunächst eine Nebenrechnung:

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla \chi)\right)\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} = \frac{\hbar}{i}\nabla(\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla \chi)\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}$$
(17)

$$= \frac{\hbar}{i} \left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} (\nabla \psi) + \psi(\nabla e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) \right) - \frac{e}{c} (\vec{A} + \nabla \chi) \psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}$$
(18)

$$= \frac{\hbar}{i} \left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} (\nabla \psi) + \psi \frac{ie}{c\hbar} (\nabla \chi) e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \right) - \frac{e}{c} (\vec{A} + \nabla \chi) \psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}$$
(19)

$$= \frac{\hbar}{i} e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} (\nabla \psi) + \psi - (\nabla \chi) e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} - \frac{e}{c} \vec{A} \psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} - \frac{e}{c} \vec{\nabla} \chi \psi - \frac{ie}{c\hbar} \vec{\chi}$$
(20)

$$= \frac{\hbar}{i} e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} (\nabla \psi) - \frac{e}{c} \vec{A} \psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}$$
(21)

$$=e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi\tag{22}$$

Durch Vergleich gilt auch:

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla \chi)\right) \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} = e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)$$
(23)

Also können wir schreiben:

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla\chi)\right)^{2}\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} = \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla\chi)\right) \cdot \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla\chi)\right)\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}}_{(17)} \tag{24}$$

$$= \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla\chi)\right) \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}}_{(23)} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi \tag{25}$$

$$=e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi\tag{26}$$

$$=e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi\tag{27}$$

Betrachten wir nun die rechte Seite der Schrödinger Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) = i\hbar \left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} (\frac{\partial}{\partial t}\psi) + \psi (\frac{\partial}{\partial t}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) \right)$$
 (28)

$$= i\hbar \left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} (\frac{\partial}{\partial t}\psi) + \psi \frac{ie}{c\hbar} (\frac{\partial}{\partial t}\chi) e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) \right)$$
 (29)

$$= i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right) - \psi\frac{e}{c} \left(\frac{\partial}{\partial t}\chi\right) e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\right) \tag{30}$$

Gleichung (24) und (30) in die Schrödinger Gleichung (16) einsetzen:

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla\chi)\right)^2 + \frac{e}{c}(\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\chi)\right]\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} = i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right) - \psi\frac{e}{c}(\frac{\partial}{\partial t}\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\right)$$
(31)

$$\frac{1}{2m} \underbrace{\left(\vec{p} - \frac{e}{c}(\vec{A} + \nabla \chi)\right)^2 \psi \cdot e^{\frac{ie}{ch}\chi}}_{(24)} + \frac{e}{c} \left(\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\chi\right) \psi \cdot e^{\frac{ie}{ch}\chi} = i\hbar e^{\frac{ie}{ch}\chi} \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right) - \psi \frac{e}{c} \left(\frac{\partial}{\partial t}\chi\right) e^{\frac{ie}{ch}\chi}\right) \tag{32}$$

$$\frac{1}{2m}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^{2}\psi + \frac{e}{c}\Phi\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} - \frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} = i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right) - \psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\partial}{\partial t}\chi\right)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\right)$$
(33)

$$\frac{1}{2m}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi + \frac{e}{c}\Phi\psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} = i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right) \qquad |:e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}$$
(34)

$$\left[\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + \frac{e}{c}\Phi\right]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \tag{35}$$

Wie man sieht erhalten wir die ursprüngliche Schrödinger Gleichung (12). D.h. die SG ist Eichinvariant bezüglich der eingesetzen 3 Transformationen (13) bis (15). Die umgeeichte Wellefunktion $\psi \cdot e^{\frac{ie}{ch}\chi}$ liefert die gleiche Wahrscheinlichkeitsdichte wie die ursprüngliche Wellenfunktion:

$$|\psi'|^2 = \psi'^* \cdot \psi' = e^{-\frac{ie}{c\hbar}\chi} e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \psi^* \psi = |\psi|^2$$

Also wird die Physik dahinter nicht verändert.