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:

$$\vec{E} = -\nabla\Phi' - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}' \tag{8}$$
$$= -\nabla(\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\chi) - \frac{\partial}{\partial t}(A + \nabla\chi) \tag{9}$$
$$= -\nabla\Phi + \cancel{\nabla\frac{\partial}{\partial t}}\chi - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A} \cancel{- \frac{\partial}{\partial t}\nabla}\chi \tag{10}$$
$$= -\nabla\Phi - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A} \tag{11}$$

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:

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi \tag{13}$$
$$\Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{\partial}{\partial t}\chi \tag{14}$$
$$\psi \to \psi' = \psi \cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \tag{15}$$

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

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

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

$$\left(\vec{p}-\frac{e}{c}(\vec{A}+\nabla\chi)\right)\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}=\frac{\hbar}{i}\nabla(\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi})-\frac{e}{c}(\vec{A}+\nabla\chi)\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \tag{17}$$
$$=\frac{\hbar}{i}\left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\nabla\psi)+\psi(\nabla e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi})\right)-\frac{e}{c}(\vec{A}+\nabla\chi)\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \tag{18}$$
$$=\frac{\hbar}{i}\left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\nabla\psi)+\psi\frac{ie}{c\hbar}(\nabla\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\right)-\frac{e}{c}(\vec{A}+\nabla\chi)\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \tag{19}$$
$$=\frac{\hbar}{i}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\nabla\psi)+\cancel{\psi\frac{e}{c}(\nabla\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}}-\frac{e}{c}\vec{A}\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}-\cancel{\frac{e}{c}\vec{\nabla}\chi\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}} \tag{20}$$
$$=\frac{\hbar}{i}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\nabla\psi)-\frac{e}{c}\vec{A}\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \tag{21}$$
$$=e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi \tag{22}$$

Durch Vergleich gilt auch:

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

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:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi})=i\hbar\left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\frac{\partial}{\partial t}\psi)+\psi(\frac{\partial}{\partial t}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi})\right) \tag{28}$$
$$=i\hbar\left(e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\frac{\partial}{\partial t}\psi)+\psi\frac{ie}{c\hbar}(\frac{\partial}{\partial t}\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi})\right) \tag{29}$$
$$=i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\frac{\partial}{\partial t}\psi)-\psi\frac{e}{c}(\frac{\partial}{\partial t}\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) \tag{30}$$

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

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}(\vec{A}+\nabla\chi)\right)^2+\frac{e}{c}(\Phi-\frac{\partial}{\partial t}\chi)\right]\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}=i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\frac{\partial}{\partial t}\psi)-\psi\frac{e}{c}(\frac{\partial}{\partial t}\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) \tag{31}$$
$$\frac{1}{2m}\underbrace{\left(\vec{p}-\frac{e}{c}(\vec{A}+\nabla\chi)\right)^2\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}}_{(24)}+\frac{e}{c}(\Phi-\frac{\partial}{\partial t}\chi)\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}=i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\frac{\partial}{\partial t}\psi)-\psi\frac{e}{c}(\frac{\partial}{\partial t}\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}) \tag{32}$$
$$\frac{1}{2m}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi+\frac{e}{c}\Phi\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}-\cancel{\frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}}=i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\frac{\partial}{\partial t}\psi)-\cancel{\psi\frac{e}{c}(\frac{\partial}{\partial t}\chi)e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi})} \tag{33}$$
$$\frac{1}{2m}e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi+\frac{e}{c}\Phi\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}=i\hbar e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}(\frac{\partial}{\partial t}\psi)\qquad |:e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi} \tag{34}$$
$$\left[\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\vec{A})^2+\frac{e}{c}\Phi\right]\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \tag{35}$$

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 $\psi\cdot e^{\frac{ie}{c\hbar}\chi}$ 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.