

Quantenmechanik

Prof. Dr. Wolfgang von der Linden
Georg Fantner
Bernhard Schaffer

30. November 2000

Inhaltsverzeichnis

0.1	Zeitabhängige (Diracsche) Störungstheorie	4
0.1.1	Das Wechselwirkungsbild	4
0.1.2	Harmonische oder konstante Störung	8
1	Wechselwirkung von Elektronen mit elektro-magnetischen Feldern	15
1.1	Lagrange-Funktion geladener Teilchen im el.-mag. Feld . . .	15
1.2	Hamilton-Funktion geladener Teilchen im el.-mag. Feld . . .	17
2	Eine kurze Einführung in die Feynman'schen Pfadintegrale	19
2.1	Aharonov-Bohm-Effekt	22
2.2	Quanten-Interferenz aufgrund von Gravitation	23

0.1 Zeitabhängige (Diracsche) Störungstheorie

Häufig interessiert man sich für zeitabhängige Hamilton-Operatoren. Z.B. könnte man daran interessiert sein, was mit einem Atom passiert, wenn man elektromagnetische Wellen einstrahlt. Man kann versuchen, die zeitabhängige Schrödingergleichung analytisch exakt zu lösen. Das gelingt allerdings nur in den seltensten Fällen. Der Ausweg sind entweder numerische Verfahren, die in den letzten Jahren rasant an Leistungsfähigkeit und Bedeutung zugenommen haben. Alternativ hat man die Möglichkeit, das Problem approximativ zu lösen. Wir gehen davon aus, daß der Hamilton-Operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$ aus einem zeitunabhängigen Teil \hat{H}_0 und einer zeitabhängigen Störung $\hat{H}_1(t)$ besteht. Für das Folgende gehen wir davon aus, daß das Eigenwertproblem von \hat{H}_0

$$\hat{H}_0|\Phi_n\rangle = \epsilon_n|\Phi_n\rangle$$

gelöst ist. In der Praxis benutzt man die Lösung des zeitabhängigen Problems, um experimentell Rückschlüsse auf das Eigenwertspektrum von \hat{H}_0 zu gewinnen. Z.B. kann man einen klassischen Oszillator von außen mit einer periodischen Kraft mit einer Frequenz ω anregen. Wenn wir ω kontinuierlich variieren, wird die Amplitude der erzwungenen Schwingung bei der Eigenfrequenz des ungestörten Oszillators maximal sein. Wir können also auf diese Weise auf die Eigenfrequenz (bzw. Federkraft) und die Reibungskräfte rückschließen. In Quantensystemen ist diese Vorgehensweise die einzig mögliche, das mikroskopische System zu untersuchen. In diesem Zusammenhang hat man allerdings die Stärke des Störterms \hat{H}_1 unter Kontrolle und kann erreichen, daß „ $\hat{H}_1 \ll \hat{H}_0$ “ Die Aufteilung der Dynamik in Anteile, die von \hat{H}_0 und solche, die von \hat{H}_1 herrühren, führt zur Einführung des Wechselwirkungsbildes.

0.1.1 Das Wechselwirkungsbild

Die Zeitentwicklung eines beliebigen Anfangszustands $|\Phi\rangle$ im zeitunabhängigen ungestörten System lautet bekanntlich

$$|\Phi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Phi\rangle \quad .$$

Deshalb ist es sinnvoll, diesen Teil der Dynamik explizit im Zustandsvektor

$$|\Psi^S(t)\rangle =: e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi^I(t)\rangle \quad , \quad (1)$$

der die Schrödingergleichung des vollen Problems lösen soll, zu berücksichtigen. Zustände im ursprünglichen SCHRÖDINGERBILD kennzeichnen wir mit einem Index S und die im WECHSELWIRKUNGSBILD mit I . Die Zeitableitung von Gl. (1) liefert

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi^S(t)\rangle &= i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 \overbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\Psi^I(t)\rangle}^{|\Psi^S\rangle} + e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \frac{d}{dt} |\Psi^I(t)\rangle \right) \\ &= \hat{H}_0 |\Psi^S\rangle + i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \frac{d}{dt} |\Psi^I(t)\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

Wir setzen Gl. (1) und Gl. (2) in die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi^S(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) |\Psi^S(t)\rangle \quad . \quad (3)$$

ein und erhalten

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |\Psi^S\rangle + i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \frac{d}{dt} |\Psi^I(t)\rangle &= \hat{H}_0 |\Psi^S\rangle + \hat{H}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\Psi^I(t)\rangle \\ i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \frac{d}{dt} |\Psi^I(t)\rangle &= \hat{H}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\Psi^I(t)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi^I(t)\rangle &= \underbrace{e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{H}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}}_{=:\hat{H}_1^I} |\Psi^I(t)\rangle \end{aligned}$$

WECHSELWIRKUNGSBILD	
$\hat{H}_1^I = e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{H}_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$	(4)
$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi^I(t)\rangle = \hat{H}_1^I \Psi^I(t)\rangle$	

Wir entwickeln nun $|\Psi^I(t)\rangle$ nach den Eigenzuständen von \hat{H}_0 :

$$|\Psi^I(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\Phi_n\rangle$$

Einsetzen in Gl. (4) liefert:

$$i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) |\Phi_n\rangle = \sum_n \hat{H}_1^I |\Phi_n\rangle c_n(t)$$

Multiplikation von links mit $\langle \Phi_m |$:

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) \underbrace{\langle \Phi_m | \Phi_n \rangle}_{\delta_{n,m}} &= \sum_n \frac{\langle \Phi_m | \hat{H}_1^I | \Phi_n \rangle}{e^{+\frac{i}{\hbar} \epsilon_m t} \langle \Phi_m | \hat{H}_1^S | \Phi_n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_n t}} c_n(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) &= \sum_n e^{+\frac{i}{\hbar} \epsilon_m t} \underbrace{\langle \Phi_m | \hat{H}_1^S | \Phi_n \rangle}_{H_{mn}} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_n t} c_n(t) \\ \dot{c}_m(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_n H_{mn}(t) e^{i\frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{\hbar} t} c_n(t) \quad . \end{aligned}$$

Mit der Definition

$$\omega_{mn} := \frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{\hbar}$$

lautet die Schrödingergleichung für die Entwicklungskoeffizienten

$$\dot{c}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n H_{mn}(t) e^{i\omega_{mn} t} c_n(t) \quad (5)$$

$$H_{mn}(t) = \langle \Phi_m | \hat{H}_1^S | \Phi_n \rangle \quad . \quad (6)$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ kennen wir $c_m(0)$. Zu einer späteren Zeit t gilt dann

$$\begin{aligned} \int_0^t \dot{c}_m(\tau) d\tau &= c_m(t) - c_m(0) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} c_n(\tau) d\tau \\ c_m(t) &= c_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} c_n(\tau) d\tau \quad (7) \end{aligned}$$

Eine Reihenentwicklung, die nach Potenzen in H_1 geordnet ist, erhält man über die Picard-Lindelöf-Iteration:

$$c_m^{(l+1)}(t) = c_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} c_n^{(l)}(\tau) d\tau \quad .$$

Wenn die Iteration konvergiert, erfüllt $c_m^{(\infty)}$ die Integralgleichung Gl. (7).
Wir beginnen die Iteration mit $c_m^{(0)}(t) = c_m(0)$:

$$\begin{aligned} c_m^{(1)}(t) &= c_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} \overbrace{c_n^{(0)}(\tau)}^{c_n(0)} d\tau \\ &= c_m(0) - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(0) \left(\int_0^t H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} d\tau \right)}_{\triangleq \text{Korrektur zu } c^{(0)} \text{ von der Ordnung } H_1} \end{aligned}$$

Der nächste Iterationsschritt liefert:

$$\begin{aligned} c_m^{(2)}(t) &= c_m(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} c_n^{(1)}(\tau) d\tau \\ &= c_m(0) - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} \left(c_n(0) \right.}_{c_m^{(1)}(t)} \\ &\quad \left. - \frac{i}{\hbar} \sum_{n'} c_{n'}(0) \left(\int_0^\tau H_{nn'}(\tau') e^{i\omega_{nn'}\tau'} d\tau' \right) \right) d\tau \\ &= c_m^{(1)}(t) + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_{n,n'} \int_0^t d\tau H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} \int_0^\tau d\tau' H_{nn'}(\tau') e^{i\omega_{nn'}\tau'} c_{n'}(0) \end{aligned}$$

Insbesondere interessiert uns folgende Frage: Wenn das System zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|\Phi_i\rangle$ ist, wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß es dann zur Zeit $t > 0$ in dem Zustand $|\Phi_f\rangle$ ist? ($|\Phi_i\rangle, |\Phi_f\rangle$ sind Eigenzustände von \hat{H}_0)

$$P_{\rightarrow f} = |\langle \Phi_f | \Psi(t) \rangle|^2 = \left| \langle \Phi_f | \sum_n c_n(t) \Phi_n \rangle \right|^2 = \left| \sum_n c_n(t) \underbrace{\langle \Phi_f | \Phi_n \rangle}_{\delta_{fn}} \right|^2 = |c_f(t)|^2 \quad . \quad (8)$$

Die Anfangsbedingung lautet $c_n(0) = \delta_{n,i}$. Daraus folgt in zweiter Ord-

nung in \hat{H}_1

$$\begin{aligned}
c_f(t) = \delta_{f,i} & - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{fi}(\tau) e^{i\omega_{fi}\tau} d\tau \\
& - \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \int_0^t d\tau H_{fn}(\tau) e^{i\omega_{fn}\tau} \int_0^\tau d\tau' H_{ni}(\tau') e^{i\omega_{ni}\tau'} \\
& + O(\hat{H}_1^3)
\end{aligned} \tag{9}$$

0.1.2 Harmonische oder konstante Störung

Eine sehr wichtige Anwendung der zeitabhängigen Störungstheorie sind Probleme, bei denen zur Zeit t eine konstante oder harmonische Störung eingeschaltet wird

$$\hat{H}_1 = \Theta(t) \hat{A} \cos(\omega t + \varphi)$$

- $\Theta(t)$ schaltet die Störung zur Zeit $t=0$ ein
- $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ ist selbstadjungiert, damit \hat{H}_1 selbstadjungiert ist
- für $\omega = 0$ beschreibt diese Gleichung eine konstante Störung

Es gilt

$$\begin{aligned}
\hat{H}_1(t) &= \Theta(t) \left(\frac{\hat{A}}{2} e^{i\omega t} e^{i\varphi} + \frac{\hat{A}}{2} e^{-i\omega t} e^{-i\varphi} \right) \\
&= \Theta(t) \left(\hat{V} e^{i\omega t} + \hat{V}^\dagger e^{-i\omega t} \right) \\
H_{mn}(t) &= (V_{mn} e^{i\omega t} + V_{mn}^* e^{-i\omega t}) \quad .
\end{aligned}$$

$\Theta(t)$ wird in diesem Zusammenhang nicht mehr benötigt, da die Integrale in Gl. (9) ohnehin erst bei $t = 0$ beginnen! Das erste Integral in Gl. (9) lautet

$$\begin{aligned}
\int_0^t d\tau H_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} &= V_{mn} \int_0^t d\tau e^{i(\omega + \omega_{mn})\tau} + V_{mn}^* \int_0^t d\tau e^{i(\omega_{mn} - \omega)\tau} \\
&= V_{mn} \frac{e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} - 1}{i(\omega_{mn} + \omega)} + V_{mn}^* \frac{e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{mn} - \omega)}
\end{aligned}$$

D.h. der Term erster Ordnung liefert:

$$c_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \left\{ V_{fi} \cdot e^{i\frac{\omega_{fi} + \omega}{2}t} \cdot \frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi} + \omega}{2}t\right)}{\frac{\omega_{fi} + \omega}{2}} + V_{fi}^* \cdot e^{i\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}t} \cdot \frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}t\right)}{\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}} \right\} \tag{10}$$

Wir haben den Term δ_{fi} weggelassen, da in der praktischen Anwendung nur der Fall $f \neq i$ interessiert.

Wir betrachten zunächst ein konstantes Potential ($\omega = 0$)

$$\begin{aligned} c_f(t) &= -\frac{i}{\hbar} \left\{ V_{fi} \cdot e^{i\frac{\omega_{fi}}{2}t} \cdot \frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\frac{\omega_{fi}}{2}} + V_{fi}^* \cdot e^{i\frac{\omega_{fi}}{2}t} \cdot \frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\frac{\omega_{fi}}{2}} \right\} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \underbrace{(V_{fi} + V_{fi}^*)}_{=H_{fi}} \cdot e^{i\frac{\omega_{fi}}{2}t} \cdot \frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\frac{\omega_{fi}}{2}} \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß das System in der Zeit t in den Zustand f übergegangen ist, lautet

$$P_{i \rightarrow f} = |c_f(t)|^2 = \frac{t^2}{\hbar^2} |H_{fi}|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)}{\left(\frac{\omega_{fi}}{2}t\right)^2} \quad . \quad (11)$$

Falls das Spektrum diskret und ϵ_i nicht entartet ist, gibt es zwischen der Energie ϵ_i und der Energie der Endzustände ϵ_f eine Energielücke $\Delta\epsilon_f$. Die Übergangswahrscheinlichkeit lautet

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{4 |H_{fi}|^2}{(\Delta\epsilon_f)^2} \sin^2\left(\frac{\Delta\epsilon_f t}{2\hbar}\right) \quad .$$

Diese Wahrscheinlichkeit oszilliert also mit der Frequenz $\omega = \frac{\Delta\epsilon}{\hbar}$. Das ist ein charakteristisches Phänomen diskreter Systeme. Erst im Fall kontinuierlicher Spektren verschwindet die Periodizität, wie wir gleich sehen werden. Die Periode der Oszillationen ist $T = \frac{2\pi\hbar}{\Delta\epsilon}$ und die Amplitude nimmt proportional zu $\frac{1}{(\Delta\epsilon)^2}$ ab. Die größte Übergangswahrscheinlichkeit liegt also vor, wenn i und f zu benachbarten Zuständen gehören.

Wenn das diskrete Spektrum in ϵ_i **entartet** ist, d.h. $\exists f \neq i : \epsilon_f = \epsilon_i$, dann liefert Gl. (11) stattdessen

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{t^2}{\hbar^2} |H_{fi}|^2.$$

Die Wahrscheinlichkeit wächst proportional zu t^2 an. Ab einer bestimmten Zeit wird die Wahrscheinlichkeit größer Eins. Das ist natürlich unsinnig

und zeigt an, daß

$$t \ll \frac{\hbar}{|H_{fi}|} \quad (12)$$

erfüllt sein muß, damit die Störungstheorie erster Ordnung anwendbar ist.

Wir wenden uns nun dem Fall zu, daß das Spektrum bei ϵ_i **kontinuierlich** ist.

Es ist hierbei zweckmäßig, die Übergangsrates (Übergangswahrscheinlichkeitsdichte pro Zeiteinheit) $W = \frac{P}{t}$ einzuführen, die aus Gl. (11) folgt

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |H_{fi}|^2 \frac{t}{2\pi} \left(\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}t/2} \right)^2 .$$

Wir führen nun folgende auf Eins normierte Funktion ein

$$\Delta_t(\omega) := \frac{t}{2\pi} \left(\frac{\sin(\frac{\omega t}{2})}{\frac{\omega t}{2}} \right)^2 \quad (13)$$

$$\int \Delta_t(\omega) d\omega = 1 .$$

Mit dieser Funktion ist die Übergangsrates

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |H_{fi}|^2 \Delta_t\left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_i}{\hbar}\right) . \quad (14)$$

Das Verhalten von $\Delta_t(\omega)$ ist in Abbildung (1) als Funktion von ω zu festem t wiedergegeben. Man erkennt, daß $\Delta_t(\omega)$ bei $\omega = 0$ konzentriert ist, eine Breite proportional zu $\frac{1}{t}$ und eine Höhe proportional zu t hat. Sie ist auf Eins normiert und es gilt Diese Funktion verhält sich im Limes $t \rightarrow \infty$ wie die Delta-Funktion.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int f(\omega) \Delta_t(\omega) d\omega = f(0) ,$$

vorausgesetzt, die Test-Funktion $f(\omega)$ hat die Eigenschaft $\lim_{\omega \rightarrow \infty} \frac{f(\omega)}{\omega} = 0$. Für diese Klasse von Funktionen gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta_t(\omega) = \delta(\omega) . \quad (15)$$

Hiermit wird Gl. (14) zu

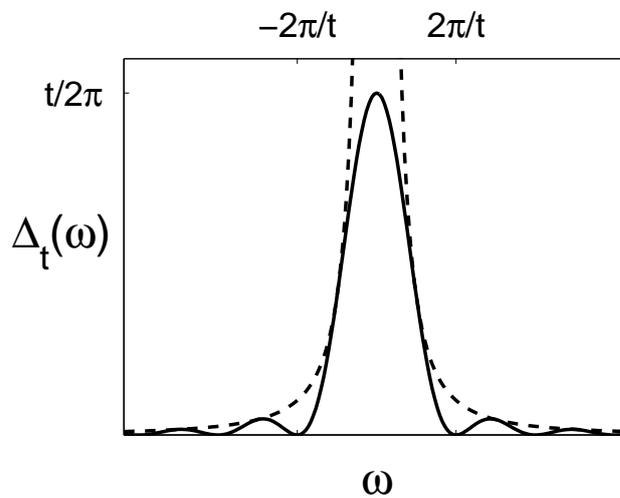


Abbildung 1: Plot der Funktion $\Delta_t(\omega)$ (durchgezogen) und der Einhüllenden $\frac{2}{\omega^2 t \pi}$ (gestrichelt).

FERMI'S GOLDENE REGEL

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i) \quad . \quad (16)$$

Diese Darstellung ist immer dann sinnvoll, wenn in der Nachbarschaft von ϵ_i ein Kontinuum von Endzuständen vorhanden ist. Das ist in physikalischen Anwendungen oft der Fall. Im Limes $t \rightarrow \infty$ gilt offensichtlich die Energieerhaltung. Für sehr kurze Zeiten ist die Energieerhaltung aufgeweicht, da die Frequenz der vorliegenden Schwingung noch nicht eindeutig ausgeprägt ist. Wir finden im Fall der Entartung eine zeitlich **konstante Übergangsrate**, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit wächst linear mit der Zeit und führt zu unphysikalischen Ergebnissen, wenn die Störungstheorie nicht mehr anwendbar ist, d.h. wenn die Ungleichung Gl. (12) verletzt wird.

Bei einem kontinuierlichen Spektrum kann man nicht mehr die Übergangswahrscheinlichkeit in individuelle Zustände angeben. $P = |\langle \Phi_f | \Psi(t) \rangle|^2$ in Gl. (8) hat dann vielmehr die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsdichte.

In diesem Fall interessieren wir uns für die Übergangsrate in das Intervall von Endzustandsenergien ($\epsilon_n \in \Delta I_f := [\epsilon_f, \epsilon_f + \Delta\epsilon]$). Gl. (16) wird dann zu:

$$\begin{aligned}
 W_{i \rightarrow \Delta I_f} &= \sum_{\epsilon_n \in \Delta I_f} \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ni}|^2 \delta(\epsilon_n - \epsilon_i) \\
 &= \int_{E \in \Delta I_f} \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ni}|^2 \delta(E - \epsilon_i) \rho(E) dE \\
 &= \Theta(\epsilon_i \in \Delta I_f) \overline{|H_{fi}|^2} \frac{2\pi}{\hbar} \rho(\epsilon_i) \quad (17)
 \end{aligned}$$

- Ein gemittelttes Matrixelement ($\overline{|H_{fi}|^2}$) ist nur sinnvoll, wenn $|H_{fi}|$ in I_f nicht wesentlich variiert.
- $\rho(E)$ ist die Zustandsdichte, denn die Anzahl der Zustände ΔN im Intervall $\Delta E := (E - \frac{\Delta}{2}, E + \frac{\Delta}{2})$ ist gegeben durch

$$\Delta N = \sum_{\epsilon_n \in \Delta I_f} 1 = \int_{E - \frac{\Delta}{2}}^{E + \frac{\Delta}{2}} \varrho(E') dE' \approx \rho(E) \Delta \quad .$$

Neben Gl. (17) gibt es eine in vielen Fällen praktischere Darstellung der Übergangsrate. Ausgangspunkt hierfür ist

$$\frac{1}{\omega - i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} + i\pi \delta(\omega) \quad ,$$

wobei diese Beziehung erst unter einem Integral Bedeutung erhält und \mathcal{P} als Hauptwert-Integral zu verstehen ist. 0^+ stellt eine infinitesimale, positive Größe dar. Aus dieser Beziehung folgt eine wichtige Darstellung der δ -Funktion

DARSTELLUNG DER δ -FUNKTION
$ \lim_{0^+ \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \Im \left(\frac{1}{\omega - i0^+} \right) = \lim_{0^+ \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{0^+}{\omega^2 + (0^+)^2} = \delta(\omega) \quad . $

Einsetzen in Gl. (16) liefert:

$$\begin{aligned}
W_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} |H_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i) \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} |H_{fi}|^2 \frac{1}{\pi} \Im \left(\frac{1}{(\epsilon_f - \epsilon_i) - i0^+} \right) \\
&= \frac{2}{\hbar} \Im \left(\langle \Phi_i | \hat{A}^\dagger | \Phi_f \rangle \langle \Phi_f | \hat{A} | \Phi_i \rangle \frac{1}{(\epsilon_f - \epsilon_i) - i0^+} \right) \\
&= \frac{2}{\hbar} \Im \left(\langle \Phi_i | \hat{A}^\dagger | \Phi_f \rangle \langle \Phi_f | \frac{1}{(\epsilon_f - \epsilon_i) - i0^+} \hat{A} | \Phi_i \rangle \right)
\end{aligned}$$

Wegen $\hat{H}_0 | \Phi_f \rangle = \epsilon_f | \Phi_f \rangle$ gilt auch:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2}{\hbar} \Im \left(\langle \Phi_i | \hat{A}^\dagger | \Phi_f \rangle \langle \Phi_f | \frac{1}{(\hat{H}_0 - \epsilon_i) - i0^+} \hat{A} | \Phi_i \rangle \right) .$$

Es muß nun, wie zuvor, über alle Endzustände in ΔI_f summiert werden. Wir modifizieren hierzu \hat{A} so, $\hat{A} \rightarrow \hat{W}$, daß der Operator \hat{W} nur in die Endzustände streut, die im jeweiligen Experiment gerade untersucht werden (z.B. Richtungs-Selektion, Energie-Selektion etc.).

$$\hat{W} | \Phi_f \rangle := \begin{cases} \hat{A} | \Phi_f \rangle & \text{für beobachtete Endzustände } | \Phi_f \rangle \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Hierbei ist \hat{W} i.d.R nicht mehr selbstadjungiert! Die Summation über die Endzustände kann nun uneingeschränkt durchgeführt werden und liefert

$$\begin{aligned}
W_{i \rightarrow \Delta I_f} &= \frac{2}{\hbar} \sum_f \Im \left(\langle \Phi_i | \hat{W}^\dagger | \Phi_f \rangle \langle \Phi_f | \frac{1}{(\hat{H}_0 - \epsilon_i) - i0^+} \hat{W} | \Phi_i \rangle \right) \\
&= \frac{2}{\hbar} \Im \left(\langle \Phi_i | \hat{W}^\dagger \underbrace{\sum_f | \Phi_f \rangle \langle \Phi_f |}_{=1} \frac{1}{(\hat{H}_0 - \epsilon_i) - i0^+} \hat{W} | \Phi_i \rangle \right)
\end{aligned}$$

ÜBERGANGSRATE

$$W_{i \rightarrow \Delta I_f} = \frac{2}{\hbar} \Im \left(\langle \Phi_i | \hat{W}^\dagger \frac{1}{(\hat{H}_0 - \epsilon_i) - i0^+} \hat{W} | \Phi_i \rangle \right) . \quad (18)$$

Die rechte Seite stellt eine sogenannte Greensche Funktion dar. Sie bildet den Ausgangspunkt zur theoretischen Beschreibung experimentell bestimmbarer dynamischer Antwortfunktionen.

Der Fall einer **harmonischen Störung** läßt sich nun leicht diskutieren. Hier ist $\omega \neq 0$ und es gibt in Gl. 10 zwei Beiträge: $af(\omega_{fi} + \omega) + bf(\omega_{fi} - \omega)$, von denen für große t nur jeweils einer ungleich Null sein kann.

$$|af(\omega_{fi} + \omega) + bf(\omega_{fi} - \omega)|^2 = |a|^2 |f(\omega_{fi} + \omega)|^2 + |b|^2 |f(\omega_{fi} - \omega)|^2 + \underbrace{(a^*b + ab^*)f(\omega_{fi} + \omega) \cdot f(\omega_{fi} - \omega)}_{=0}$$

Voraussetzung hierfür ist, daß der Abstand 2ω der beiden δ -artigen Peaks groß ist gegen die Peakbreite $2\pi/t$ (siehe Abbildung (1)). Das heißt,

$$t \gg \frac{\pi}{\omega} \approx \frac{\hbar}{|\epsilon_f - \epsilon_i|} .$$

Gleichzeitig muß immer noch Gl. (12) erfüllt sein, damit die erste Ordnung Störungstheorie gültig ist. Für die Zeit t erhalten wir also die Bedingung

$$\frac{\hbar}{|\epsilon_f - \epsilon_i|} \ll t \ll \frac{\hbar}{|H_{fi}|} .$$

Voraussetzung dafür, daß diese Bedingung für t überhaupt erfüllt werden kann, ist

$$\frac{|H_{fi}|}{|\epsilon_f - \epsilon_i|} \ll 1 .$$

Das ist genau die gleiche Voraussetzung, die für die Gültigkeit der zeitunabhängigen Störungstheorie notwendig ist.

Analog zu Gl. (16) erhalten wir

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(|W_{fi}|^2 \underbrace{\delta(\epsilon_f - \epsilon_i + \hbar\omega)}_{\epsilon_f = \epsilon_i - \hbar\omega \Rightarrow \text{Emission}} + |W_{fi}^*|^2 \underbrace{\delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega)}_{\epsilon_f = \epsilon_i + \hbar\omega \Rightarrow \text{Absorption}} \right)$$

Analog zu Gl. (18) erhalten wir

$$W_{i \rightarrow \Delta I_f} = \frac{2}{\hbar} \Im \left(\langle \Phi_i | \hat{W}^\dagger \frac{1}{\hat{H}_0 - \epsilon_i + \omega - i0^+} \hat{W} | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_i | \hat{W}^\dagger \frac{1}{\hat{H}_0 - \epsilon_i - \omega - i0^+} \hat{W} | \Phi_i \rangle \right)$$

Diese Formeln sind der Ausgangspunkt zur Beschreibung vieler physikalischer Effekte, wie z.B.: (inverse) Photoemission, Augerspektroskopie, Coulomb-Streuung und Compton-Streuung.

Kapitel 1

Wechselwirkung von Elektronen mit elektro-magnetischen Feldern

1.1 Lagrange-Funktion geladener Teilchen im el.-mag. Feld

Wir wissen bereits wie die Hamilton-Funktion eines Teilchens der Ladung q im elektrostatischen Feld aussieht. Das elektrostatische Potential $\Phi(\vec{x})$ ist ja gerade die Arbeit, die verrichtet werden muß, um ein geladenes Teilchen darin zu einem bestimmten Ort \vec{r} zu bringen. Demnach ist die potentielle Energie $V(\vec{r}) = q \Phi(\vec{x})$ und die Lagrange-Funktion ist dann

$$L = T - V = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - q\Phi(\vec{x}) \quad . \quad (1.1)$$

Die wohl-vertrauten Euler-Lagrange-Gleichungen sind

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}} L - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\vec{x}}} L \right) = 0 \quad (1.2a)$$

$$-q \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \Phi(\vec{x}) - \frac{d}{dt} \left(m \dot{\vec{x}} \right) = 0 \quad . \quad (1.2b)$$

Das elektrische Feld erhält man aus dem Potential über $\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \Phi(\vec{x})$ und die elektrostatische Kraft ist demnach $\vec{F} = q \vec{E}$. Die gesamte elektromagnetische Kraft auf ein bewegtes geladenes Teilchen der Ladung q enthält noch die Lorentz-Kraft¹

$$\vec{F} = q \vec{E} + \frac{q}{c} (\vec{v} \times \vec{B}) \quad , \quad (1.3)$$

¹Wieder in Gaußschen Einheiten.

die einen geschwindigkeitsabhängigen Anteil enthält, der nicht aus einer Lagrange-Funktion vom Typ (1.1) über die Euler-Lagrange-Gleichung abgeleitet werden kann. Die elektromagnetische Kraft steht senkrecht zur Bewegung und ändert nur die Richtung aber nicht den Betrag der Geschwindigkeit und leistet daher keine Arbeit. Es kann aber leicht gezeigt werden, daß die Lagrange-Funktion

LAGRANGE-FUNKTION EINES GELADENEN TEILCHENS IM ELEKTRO-MAGNETISCHEN FELD	
$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - q\Phi(\vec{x}) + \frac{q}{c}\vec{A} \cdot \vec{v}$	(1.4)

die richtige Bewegungsgleichung liefert. Das magnetische Feld kann immer durch ein Vektorpotential über

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

ausgedrückt werden, da $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ gelten muß. Der kanonische Impuls ist dann

$$\vec{p} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} L = m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A} \quad . \quad (1.5)$$

Für die Bewegungsgleichung benötigen wir

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{x}} L \right) = \frac{d}{dt} \vec{p} = m\ddot{\vec{x}} + \frac{q}{c} \frac{d}{dt} \vec{A} \quad . \quad (1.6)$$

Man beachte, daß $\vec{A} = \vec{A}(\vec{x}(t), t)$. Deshalb gilt

$$\frac{dA_i}{dt} = \frac{\partial A_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial t} = \frac{\partial A_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} A_i \quad .$$

Schließlich benötigen wir für die Bewegungsgleichung noch

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -q \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{q}{c} \vec{v} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} \quad (1.7)$$

und erhalten für die Euler-Lagrange-Gleichung (1.2a)

$$-q \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{q}{c} \vec{v} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} = m \ddot{x}_i + \frac{q}{c} \left(\frac{\partial A_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} A_i \right)$$

bzw.

$$\begin{aligned} m \ddot{x}_i &= -q \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + \frac{q}{c} \vec{v} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} - \frac{q}{c} \left(\frac{\partial A_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} A_i \right) \\ &= q \left(-\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + \frac{q}{c} \left(\vec{v} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} A_i \right) \end{aligned} \quad (1.8)$$

Der zweite Term kann vereinfacht werden zu

$$\begin{aligned} \left(\vec{v} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x_i} - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} A_i \right) &= \left(v_j \frac{\partial}{\partial x_i} A_j - v_j \frac{\partial}{\partial x_j} A_i \right) \\ &= \left(\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl} \right) v_j \frac{\partial}{\partial x_l} A_m \\ &= \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} v_j \frac{\partial}{\partial x_l} A_m \\ &= \varepsilon_{ijk} v_j \underbrace{\left(\vec{\nabla} \times \vec{A} \right)_k}_{\vec{B}} \\ &= (\vec{v} \times \vec{B})_i \end{aligned}$$

Aus Gl. (1.8) wird damit

$$\begin{aligned} m \ddot{x}_i &= q \left(-\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + \frac{q}{c} (\vec{v} \times \vec{B})_i \\ \Rightarrow \vec{F} = m \ddot{\vec{x}} &= q \underbrace{\left(-\vec{\nabla} \Phi - \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right)}_{\vec{E}} + \frac{q}{c} \vec{v} \times \vec{B} \end{aligned}$$

Damit haben wir das gesuchte Ergebnis.

1.2 Hamilton-Funktion geladener Teilchen im el.-mag. Feld

Wir wollen nun aus der Lagrange-Funktion die Hamilton-Funktion ableiten, da sie den Ausgangspunkt für die Quantenmechanik darstellt. Unter

Verwendung von Gl. (1.5) und Gl. (1.4) erhalten wir

$$\begin{aligned} H &= \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L \\ &= \left(m\dot{\vec{x}} + \frac{q}{c}\vec{A} \right) \dot{\vec{x}} - \frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2 + q\Phi(\vec{x}) - \frac{q}{c}\vec{A} \cdot \dot{\vec{x}} \\ &= \frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}^2 + q\Phi(\vec{x}) \quad . \end{aligned}$$

Nun müssen wir noch die Geschwindigkeit durch den Impuls ersetzen.
Aus Gl. (1.5) folgt $\dot{\vec{x}} = \frac{1}{m}(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A})$ und somit

HAMILTON-FUNKTION EINES GELADENEN TEILCHENS IM ELEKTRO-MAGNETISCHEN FELD
$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right)^2 + q\Phi(\vec{x}) \quad . \quad (1.9)$

Kapitel 2

Eine kurze Einführung in die Feynman'schen Pfadintegrale

Ausgangspunkt ist die Übergangsamplitude $\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle$, ein Teilchen im Zustand \vec{x}' zur Zeit t' anzutreffen, wenn es zur Zeit t am Ort \vec{x} präpariert worden ist. Mit dem Zeitentwicklungsoperator für einen nicht explizit zeitabhängigen Hamilton-Operator erhalten wir

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \langle \vec{x}' | e^{-iH \frac{t-t'}{\hbar}} | \vec{x} \rangle \quad . \quad (2.1)$$

Wenn wir den Propagator $\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle$ kennen, können wir daraus bequem berechnen, wie sich ein beliebiger Zustandsvektor mit der Zeit entwickelt

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}', t') &= \langle \vec{x}' | e^{-iH \frac{t-t'}{\hbar}} | \psi(t) \rangle \\ &= \int \langle \vec{x}' | e^{-iH \frac{t-t'}{\hbar}} | \vec{x} \rangle \psi(\vec{x}, t) d^3x \\ &= \int \langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle \psi(\vec{x}, t) d^3x \quad . \end{aligned}$$

Wir gehen von dem Einteilchen-Hamilton-Operator

$$H = H_0 + H_1 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (2.2)$$

aus. Da die beiden Beiträge nicht kommutieren gilt

$$e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} H} = e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} H_0} e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} H_1} + O((\Delta t)^2) \quad ,$$

mit $\Delta t = (t' - t)$. Um die Faktorisierung dennoch durchführen zu können, muß dafür gesorgt werden, daß der Vorfaktor von H (hier Δt) klein wird.

Das erreicht man durch

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \langle \vec{x}' | \underbrace{e^{-iH \frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-iH \frac{\Delta t}{\hbar}} \dots e^{-iH \frac{\Delta t}{\hbar}}}_{N \text{ Faktoren}} | \vec{x} \rangle .$$

Vor jede Exponentialfunktion schieben wir den Einheitsoperator $\hat{\mathbb{1}} = \int |\vec{x}_i\rangle \langle \vec{x}_i| d^3x_i$ mit passendem Index „i“ ein und erhalten

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \int \dots \int d^3x_1 \dots d^3x_{N-1} \prod_{i=1}^N \langle \vec{x}_{i-1} | e^{-iH \frac{\delta}{\hbar}} | \vec{x}_i \rangle ,$$

mit den Definitionen $\vec{x}_0 = \vec{x}'$ und $\vec{x}_N = \vec{x}$ und $\delta = \frac{\Delta t}{N}$ Unter Ausnutzung von Gl. (2.2) wird hieraus

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle &= \int \dots \int d^3x_1 \dots d^3x_{N-1} \prod_{i=1}^N \left(\langle \vec{x}_{i-1} | e^{-i \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} | \vec{x}_i \rangle e^{-iV(\vec{x}_i) \frac{\delta}{\hbar}} \right) + O(\delta^2) \\ &= \int \prod_i d^3x_i \left(\prod_{i=1}^N \langle \vec{x}_{i-1} | e^{-i \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} | \vec{x}_i \rangle \right) e^{-i \sum_i V(\vec{x}_i) \frac{\delta}{\hbar}} + O(\delta^2) . \end{aligned} \quad (2.3)$$

Wir verarbeiten nun die Matrixelemente $\langle \vec{x}_{i-1} | e^{-i \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} | \vec{x}_i \rangle$ dadurch, daß wir den Einheitsoperator ausgedrückt in Impulseigenzuständen einfügen

$$\langle \vec{x}_{i-1} | e^{-i \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} | \vec{x}_i \rangle = \int d^3q \langle \vec{x}_{i-1} | e^{-i \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \vec{x}_i \rangle = \int d^3q e^{-i \frac{\vec{q}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} \langle \vec{x}_{i-1} | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \vec{x}_i \rangle .$$

Mit

$$\langle \vec{x} | \vec{q} \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i \vec{q} \cdot \vec{x}}$$

wird daraus

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_{i-1} | e^{-i \frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} | \vec{x}_i \rangle &= (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3q e^{-i \frac{\vec{q}^2}{2m} \frac{\delta}{\hbar}} e^{-i \vec{q} \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1})} \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3q e^{-i \frac{1}{2m} \frac{\delta}{\hbar} (\vec{q}^2 + \frac{2m}{\delta} \vec{q} \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}))} \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3q e^{-i \frac{1}{2m} \frac{\delta}{\hbar} (\vec{q} + \frac{m}{\delta} (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}))^2} e^{i \frac{1}{2m} \frac{\delta}{\hbar} (\frac{m}{\delta} (\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}))^2} \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \underbrace{\left(\int d^3q' e^{-i \frac{1}{2m} \frac{\delta}{\hbar} \vec{q}'^2} \right)}_{(\frac{\pi 2m\hbar}{i\delta})^{3/2}} e^{i \frac{m}{2} \frac{\delta}{\hbar} \left(\frac{\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}}{\delta} \right)^2} \\ &= \left(\frac{m}{i\delta 2\pi\hbar} \right)^{-3/2} e^{i \frac{m}{2} \frac{\delta}{\hbar} \left(\frac{\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}}{\delta} \right)^2} . \end{aligned}$$

Somit vereinfacht sich Gl. (2.3) zu

$$\langle \vec{x}', t' | \vec{x}, t \rangle = \int \dots \int \prod_i \left(\left(\frac{m}{i\delta 2\pi\hbar} \right)^{-3/2} d^3 x_i \right) e^{i \sum_i \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}}{\delta} \right)^2 - V(\vec{x}_i) \right) \frac{\delta}{\hbar}} + O(\delta^2) .$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ geht das Argument der Exponentialfunktion über in

$$\begin{aligned} \sum_i \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}}{\delta} \right)^2 - V(\vec{x}_i) \right) \delta &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \int_t^{t'} \left\{ \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}(t)^2 - V(\vec{x}(t)) \right\} dt \\ &= \int_t^{t'} L[x(t)] dt = S[x(t)] . \end{aligned}$$

Damit erhalten wir den von Feynman vorgeschlagenen alternativen Zugang zur Quantenmechanik über Pfadintegrale

FEYNMAN'SCHES PFADINTEGRAL
$\langle \vec{x}', t' \vec{x}, t \rangle = \int_{\vec{x}}^{\vec{x}'} \mathcal{D}[x(t)] e^{iS[x(t)]/\hbar}$ $\int_{\vec{x}}^{\vec{x}'} \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d^3 x_1 \dots \int d^3 x_{N-1} \left(\frac{m}{i\delta 2\pi\hbar} \right)^{-3N/2} .$

Die Übergangsamplitude von \vec{x} zur Zeit t nach \vec{x}' zur Zeit t' ist die Summe (Integral) über alle Pfade. Gemittelt wird der Phasenfaktor, dessen Argument die Wirkung zu gegebenem Pfad ist. Der wesentliche Unterschied zur klassischen Physik ist die Tatsache, daß nicht nur der Pfad minimaler Wirkung beiträgt. Die Wirkung ist das Zeit-Integral der Lagrange-Funktion.

Man beachte die große Ähnlichkeit zu den Grundprinzipien der QM, die wir im Zusammenhang mit dem Doppelspaltexperiment abgeleitet haben. Geht man von der allgemeinen Gültigkeit des Pfadintegral-Formalismus aus, ist es einfach, den Einfluß eines Vektorpotentials (Magnetfeld) auf die Wahrscheinlichkeitsamplitude eines bestimmten Pfades anzugeben. Man erhält lediglich aufgrund von Gl. (1.4) einen zusätzlichen Phasenfaktor, die sogenannte

PEIERLS-PHASE

$$\varphi_{\text{Peierls}} = e^{i \frac{q}{c\hbar} \int_t^{t'} \vec{A} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt} dt} = e^{i \frac{q}{c\hbar} \int_{\vec{x}} \vec{A} \cdot d\vec{x}} \quad (2.4)$$

2.1 Aharonov-Bohm-Effekt

Ein Experiment, in dem die Peierls-Phase beobachtet werden kann, ist der Aharonov-Bohm-Effekt. Hierbei werden Teilchen durch einen Doppelspalt geschickt, hinter dem sich in einem räumlich beschränkten Gebiet, wie in Abbildung (2.1) dargestellt, eine magnetische Spule befindet. Innerhalb der Spule liegt ein konstantes B-Feld der Stärke B_0 vor und außerhalb ist das B-Feld Null. Wir betrachten die beiden in der Abbildung skizzierten Pfade, die zum Pfadintegral beitragen werden. Auf diesen Pfaden liegt kein B-Feld vor. Das Vektorpotential hingegen ist im Bereich außerhalb der Spule im Abstand r vom Spulenzentrum gegeben durch

$$\vec{A} = \frac{B_0 R^2}{2r} \vec{e}_\varphi \quad .$$

Wir werden allerdings für die folgenden Überlegungen den tatsächlichen Wert von \vec{A} nicht benötigen. Es sei Ψ_α^0 für $\alpha = 1, 2$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Pfad α bei Abwesenheit der Spule. Der zusätzlich B-Feld-abhängige Phasenfaktor Faktor ist gemäß Gl. (2.4)

$$e^{-i \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\text{Pfad}_\alpha} \vec{A} d\vec{x}}$$

Die Summe der Amplituden der beiden Pfade ergibt

$$\begin{aligned} \Psi_1 + \Psi_2 &= \Psi_1^0 e^{-i \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\text{Pfad}_1} \vec{A} d\vec{x}} + \Psi_2^0 e^{-i \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\text{Pfad}_2} \vec{A} d\vec{x}} \\ &= e^{-i \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\text{Pfad}_2} \vec{A} d\vec{x}} \left(\Psi_1^0 e^{-i \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \left(\int_{\text{Pfad}_1} - \int_{\text{Pfad}_2} \right) \vec{A} d\vec{x}} + \Psi_2^0 \right) \\ &= e^{-i \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\text{Pfad}_2} \vec{A} d\vec{x}} \left(\Psi_1^0 e^{-i \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \oint_C \vec{A} d\vec{x}} + \Psi_2^0 \right) \quad . \end{aligned}$$

Der Vorfaktor fällt bei der Berechnung von Erwartungswerten heraus. Nicht so das Linienintegral auf einem geschlossenen Weg um das eingeschlossene B-Feld. Die Elektrodynamik (Satz von Stokes) liefert

$$\oint_C \vec{A} d\vec{x} = \int \vec{B} d\vec{S} \quad .$$

Das hintere Integral ist ein Oberflächenintegral, das den magnetischen Fluß Φ durch die von C umschlossene Fläche angibt. Offensichtlich können wir nun die Kurve C deformieren, solange wir nicht den Bereich $B = 0$ verlassen. Mit der Konstanten für das elementare Flußquantum

$$\Phi_0 := 2\pi \frac{c\hbar}{e}$$

erhalten wir schließlich

$$\Psi_1 + \Psi_2 = e^{-i\left(\frac{e}{\hbar c}\right) \int_{\text{Pfad}_2} \vec{A} d\vec{x}} \left(\Psi_1^0 e^{-i2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}} + \Psi_2^0 \right) .$$

Wenn also $\Phi/\Phi_0 = n$ eine ganze Zahl ist, addieren sich Ψ_1^0 und Ψ_2^0 konstruktiv und bei $\Phi/\Phi_0 = n + 1/2$ destruktiv. Daß heißt, daß bei Variation des B-Feldes eine oszillierendes Signal am Schirm beobachtet wird. Wir haben somit ein Ergebnis abgeleitet, in das in Zwischenschritten das nicht eindeutig festgelegte (eichabhängige) Vektorpotential eingeht. Das Endergebnis hingegen hängt nur von B ab und ist eichinvariant. Das obige Resultat hat weitere interessante Konsequenzen. Wenn geladene Teilchen auf geschlossenen Bahnen umlaufen, z.B. in geeignet geformten Spulen, so muß der eingeschlossene magnetische Fluß in Einheiten von Φ_0 quantisiert sein, damit die Wellenfunktion eindeutig ist. Diese Quantisierung wurde erstmals 1961 mit supraleitenden Spulen in einem homogenen Magnetfeld nachgewiesen. Da in den supraleitenden Spulen Cooper-Paare die elementaren Objekte bilden und diese die Ladung $2e$ haben, wurde als Flußquant der Wert $\Phi_0/2$ gefunden.

2.2 Quanten-Interferenz aufgrund von Gravitation

Wir werden hier untersuchen, wie man den Pfadintegral-Formalismus nutzen kann, um ein überraschendes Interferenz-Experiment zu beschreiben, daß sensitiv genug ist, Interferenz aufgrund des Einflusses der Erdgravitation auf Neutronen zu beobachten. Man beachte, daß der Unterschied zwischen der elektromagnetischen und der Gravitationskraft zwischen Elektronen und Neutronen 10^{40} beträgt. Man verwendet einen annähernd monochromatischen Neutronenstrahl, der ähnlich wie im obigen Doppelspalt-Experiment in zwei Pfade zerlegt wird, die anschließend wieder zusammenlaufen. Einer der Teilstrahlen verläuft auf einem Weg, der eine höhere potentielle Energie im Schwerfeld der Erde hat. Die Apparatur ist auf einer ebenen Platte angebracht, die um eine Achse um einen beliebigen

Winkel φ verkippt werden kann, so daß der Beitrag der potentiellen Energie zur Wirkung durch

$$\Delta S = T \cdot m_s g l_1 \sin(\varphi)$$

beschrieben werden kann. l_1 ist hierbei die Breite der Platte und T die Zeit, die das Neutron benötigt, die Länge l_2 der Anordnung zu durchlaufen. Wir können T über $T = l_2/pm$ durch den Impuls ausdrücken. Der Impuls wiederum hängt mit der de Broglie Wellenlänge über $p = h/\lambda$ zusammen. Der Unterschied der Wirkung auf den beiden Pfaden ist damit

$$\Delta S = \frac{m_s m_t g l_1 l_2 \lambda \sin(\varphi)}{2\pi \hbar} .$$

Für Neutronen mit $\lambda = 1.4\overset{\circ}{\text{Å}}$ wurde die Interferenz als Funktion von φ experimentell ermittelt. Man findet eine Periode von $O(5^\circ)$. Da \hbar im Nenner vorkommt geht die Periodenlänge im klassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ gegen Null und die Interferenz-Oszillationen sind nicht mehr beobachtbar. Ein weiterer interessanter Punkt ist die Tatsache, daß hier beide Typen von Massen, träge m_t und schwere m_s eingehen. Dieses Experiment ermöglicht einen Test der Gleichheit dieser Massen auf mikroskopischem Gebiet. Man findet die Gleichheit auch hier bestätigt.

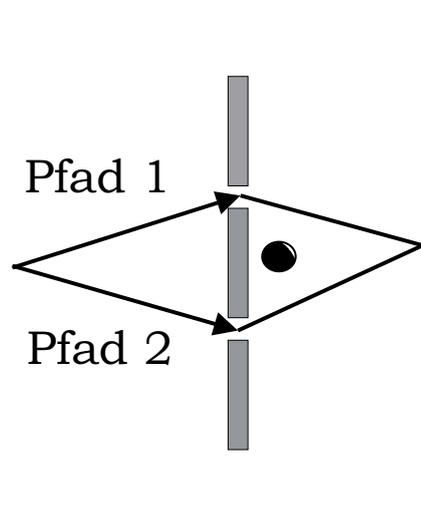


Abbildung 2.1: Meßanordnung zum Aharonov-Bohm-Effekt. Durch den Kreis verläuft der magnetische Fluß senkrecht zur Bildebene. Außerhalb des Kreises verschwindet das Magnetfeld.