Helmuts Kochrezept Nummer 8:

Wie alleine aus der Forderung nach lokaler Eichinvarianz der Schrödingergleichung das elektromagnetische Feld, der kanonische Impuls und die quantenmechanische Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen und EM-Feld entsteht.

(Version 3, 25.2.2020)

Dieses „Kochrezept“ erklärt Dir, was passiert, wenn man fordert, dass die Schrödingergleichung eine sogenannte „lokale Eichinvarianz“ haben soll. Das bedeutet, dass die Observablen der Wellenfunktion nicht nur bei einer *globalen* Phasentransformation $\Psi(\vec{r},t) \to \Psi(\vec{r},t)\, e^{i\varphi}$ invariant bleiben sollen, sondern auch bei einer *lokalen* Phasentransformation $\Psi(\vec{r},t) \to \Psi(\vec{r},t)\, e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}$. Es stellt sich heraus, dass das zwingend die Einführung neuer Felder erfordert, und dass diese Felder mit dem elektrischen Potenzial ϕ und dem magnetischen Vektorpotential $\vec{A}$ identifiziert werden können.

Wir demonstrieren hier also die folgende, faszinierende Tatsache: Die Existenz eines elektromagnetischen Feldes und die Beschreibung der Wechselwirkung geladener Teilchen mit diesem elektromagnetischen Feld ergibt sich alleine aus der Forderung der Invarianz der Observablen der Schrödingergleichung bei einer lokalen Phasentransformation (a.k.a lokale Eichtransformation)!

Folgendes Wissen wird vorausgesetzt: Grundkenntnisse der klassischen Quantenmechanik und der Elektrodynamik. In Kapitel 3 (das man aber auch auslassen kann) sind zusätzlich Kenntnisse über das Rechnen mit Vierervektoren im Minkowski-Raum erforderlich.

In den Rechnungen werden SI-Einheiten verwendet.

1 Eichinvarianz und lokale Phasentransformation

Legen wir also los: Wie wir wissen, lautet die Schrödingergleichung für ein freies (spinfreies) Teilchen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\, \Psi(\vec{r},t) \tag{1}$$

Jetzt ersetzen wir $\Psi(\vec{r},t)$ durch eine Wellenfunktion mit einer globalen (d.h. konstanten) Phase φ:

$$\Psi(\vec{r},t) \to \Psi'(\vec{r},t) = e^{i\varphi}\, \Psi(\vec{r},t) \tag{2}$$

In diesem Fall liefert die Schrödingergleichung (1) dasselbe physikalische Ergebnis, weil der konstante Phasenfaktor $e^{i\varphi}$ nicht von den Differentialoperatoren berührt wird, und sich somit aus der Gleichung herauskürzt:

$$\begin{gathered} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2\, \Psi'(\vec{r},t) \overset{(2)}{\Rightarrow} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\varphi}\, \Psi(\vec{r},t)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \left(e^{i\varphi}\, \Psi(\vec{r},t)\right) \Rightarrow \\ i\hbar \cancel{e^{i\varphi}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \cancel{e^{i\varphi}} \vec{\nabla}^2\, \Psi(\vec{r},t) \end{gathered} \tag{3}$$

Die Sache sieht jedoch anders aus, wenn wir eine zeitlich und örtlich veränderliche (d.h. „lokale“) Phase $\varphi(\vec{r},t)$ annehmen, und damit eine sogenannte *Eichtransformation* der Wellenfunktion durchführen.

$$\Psi(\vec{r},t) \to \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\, \Psi(\vec{r},t) \tag{4}$$

Was passiert, wenn wir dieses neue $\widetilde{\Psi}(\vec{r},t)$ in die Schrödingergleichung einsetzen?

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\Psi}(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\,\widetilde{\Psi}(\vec{r},t) \tag{5}$$

Werden wir damit wieder (so wie zuvor) die ursprüngliche Gleichung, und somit eine unveränderte Physik erhalten? Probieren wir es aus! Setzen wir (4) in (5) ein, dann bekommen wir:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) \tag{6}$$

Um festzustellen, ob die Schrödingergleichung damit unverändert bleibt, berechnen wir zunächst, wie der Differentialoperator $\frac{\partial}{\partial t}$ auf $e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)$ wirkt:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = \frac{\partial e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\frac{\partial\,\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = i\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\frac{\partial\,\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\underline{\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(i\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(\vec{r},t)} \tag{7}$$

Dann berechnen wir, in zwei Schritten, wie der Laplace-Operator $\vec{\nabla}^2$ auf $e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)$ wirkt. Zunächst einmal berechnen wir den Gradienten…

$$\vec{\nabla}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = i\left(\vec{\nabla}e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\right)\Psi(\vec{r},t) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)$$

$$\vec{\nabla}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)$$

$$\underline{\vec{\nabla}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\right)\Psi(\vec{r},t)} \tag{8}$$

… und darauf basierend die Wirkung des Laplace-Operators:

$$\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) \overset{(8)}{\Rightarrow}$$

$$\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = \vec{\nabla}\cdot\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\right)\Psi(\vec{r},t)\right)$$

$$\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = \vec{\nabla}\cdot\left(ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)\right)$$

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = {} & i\left(\vec{\nabla}e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) + ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}^2\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) + \\ & + ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)\right) + \left(\vec{\nabla}e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)\right) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\vec{\nabla}^2\,\Psi(\vec{r},t)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = {} & -e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)^2\Psi(\vec{r},t) + ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}^2\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) + \\ & + ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)\right) + ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)\right) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\vec{\nabla}^2\,\Psi(\vec{r},t)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = {} & -e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)^2\Psi(\vec{r},t) + ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}^2\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) \\ & + 2ie^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\,\Psi(\vec{r},t)\right) + e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\vec{\nabla}^2\,\Psi(\vec{r},t)\end{aligned}$$

$$\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(\vec{\nabla}^2 + 2i\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\vec{\nabla} + i\left(\vec{\nabla}^2\,\varphi(\vec{r},t)\right) - \left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)^2\right)\Psi(\vec{r},t) \tag{9}$$

Behauptung: Dies ist gleichbedeutend mit

$$\underline{\vec{\nabla}^2\left(e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\,\Psi(\vec{r},t)\right) = e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t)} \tag{10}$$

Wenn diese Behauptung stimmen soll, muss der Differentialoperator $\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)^2$ aus Gleichung (10) dieselbe Wirkung auf $\Psi(\vec{r},t)$ haben wie der Operator $\left(\vec{\nabla}^2+2i\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\vec{\nabla}+i\left(\vec{\nabla}^2\,\varphi(\vec{r},t)\right)-\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)^2\right)$ aus Gleichung (9).

Beweis:

$$\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t)=\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)\cdot\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)\Psi(\vec{r},t)$$

$$\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t)=\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)\cdot\left(i\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\Psi(\vec{r},t)\right)$$

$$\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t)=-\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)^2\Psi(\vec{r},t)+i\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\Psi(\vec{r},t)\right)+i\left(\vec{\nabla}^2\,\varphi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t)+$$
$$+i\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\left(\vec{\nabla}\Psi(\vec{r},t)\right)+\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r},t)$$

$$\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t)=\left(\vec{\nabla}^2+2i\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)\cdot\vec{\nabla}+i\left(\vec{\nabla}^2\,\varphi(\vec{r},t)\right)-\left(\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)\right)^2\right)\Psi(\vec{r},t)\quad q.e.d$$

Sehr gut! Setzen wir nun also die Zwischenergebnisse (8) und (10) in die Gleichung (6) ein, dann erhalten wir:

$$i\hbar \cancel{e^{i\varphi(\vec{r},t)}}\left(i\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\cancel{e^{i\varphi(\vec{r},t)}}\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t)\tag{11}$$

Wenn man die $e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}$-Terme wegkürzt und die linke Seite ausmultipliziert, lässt sich das auch so anschreiben:

$$\left(-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t)+\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t)\tag{12}$$

Was wir gerne erhalten hätten, wäre eine Differentialgleichung gewesen, die die Observablen der Wellenfunktion unverändert lässt, egal ob wir sie (wie oben) mit einer lokalen Phase versehen, oder nicht (wie in Gleichung (1)). Das ist aber offensichtlich nicht der Fall, da $\varphi(\vec{r},t)$ auf der linken und rechten Seite der Differentialgleichung im Operator stehen bleibt und sich Gleichung (1) und (12) somit deutlich unterscheiden.

Unsere Forderung der „Forminvarianz" bei einer lokalen Phasentransformation $e^{i\,\varphi(\vec{r},t)}$ ist also nicht erfüllt. Was tun? Welche Erweiterungen sind notwendig, und was bedeuten sie physikalisch?

2 Ein Eichfeld rettet den Tag und bringt neue Physik

2.1 Linke Seite der Schrödingergleichung

Wir hätten also gerne, dass die Observablen der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r},t)$ unverändert bleiben, wenn wir eine beliebige orts- und zeitabhängige Phase $\varphi(\vec{r},t)$ einführen. Vergleichen wir die linke Seite von Gleichung (1) und (12), dann sehen wir folgenden Unterschied:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ vs.\ \left(-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\tag{13}$$

Den Term $-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}$ würden wir also gerne „loswerden".

Nun, $\varphi(\vec{r},t)$ ist eine skalare, orts- und zeitabhängige Größe. Wir könnten also versuchen, eine weitere skalare, orts- und zeitabhängige Größe $\chi(\vec{r},t)$ zu erfinden, und dem Operator in folgender Weise auf der linken Seite von Gleichung (12) hinzuzufügen:

$$\left(-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\hbar\frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t}\right)\Psi(\vec{r},t)=\cdots\tag{14}$$

Wenn wir jetzt fordern könnten, dass $\chi(\vec{r},t)\overset{!}{=}\varphi(\vec{r},t)$, dann hätten wir doch genau was wir brauchen, oder? In Gleichung (14) würde der störende Term $-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}$ offenbar verschwinden.

Aber Moment! Wir müssen diese Korrektur auch in die ursprüngliche Gleichung (1) einfügen:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \hbar\frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t}\right)\Psi(\vec{r},t) = \cdots \tag{15}$$

Im ersten Moment sieht es so aus, als hätten wir uns damit ein Problem eingehandelt. Das ist aber nicht der Fall, denn Gleichung (15) ist in Wahrheit einfach nur ein Sonderfall von Gleichung (14) mit $\varphi(\vec{r},t) = \chi(\vec{r},t) = 0$.

Nun ja. Das ist ja alles schön und gut, aber offensichtlich ist dieser Ansatz doch ein wenig zu trivial. Woher soll denn dieses magische $\chi(\vec{r},t)$ bitteschön plötzlich herkommen?

Außer…

Außer wir erfinden noch eine orts- und zeitabhängige Größe $\Phi(\vec{r},t)$, die ein skalares Feld repräsentiert. Wir fordern nun, dass es ein Eichfeld ist. Das heißt, dass das Feld $\Phi(\vec{r},t)$, ähnlich wie die Wellenfunktion $\Psi(\vec{r},t)$, ebenfalls eine Eichfreiheit hat:

$$\Phi(\vec{r},t) \rightarrow \widetilde{\Phi}(\vec{r},t) = \Phi(\vec{r},t) - \frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t} \tag{16}$$

Das heißt, immer wenn wir diese Transformationsregel (16) befolgen, soll sich daraus dieselbe Physik (dieselben Observablen) ergeben. Davon ausgehend, dass das neue Eichfeld $\Phi(\vec{r},t)$ eine Art von Potential ist, können wir es leicht in die Schrödingergleichung integrieren:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + \Phi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) \tag{17}$$

Das lässt sich umschreiben zu

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \Phi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\,\Psi(\vec{r},t) \tag{18}$$

Es zeigt sich, dass es sinnvoll ist, einen Faktor q (die Kopplungskonstante, die beschreibt, wie stark im gegebenen Einheitensystem die Wechselwirkung zwischen dem durch Ψ beschriebenen Teilchen und dem Feld Φ ist) herauszuziehen. Wir schreiben somit die linke Seite von Gleichung um zu:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\Phi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) = \cdots \tag{19}$$

Führen wir jetzt beide die Eichtransformationen (4) und (16) gleichzeitig durch, erhalten wir

$$\left(-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\Phi(\vec{r},t) + q\frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t}\right)\Psi(\vec{r},t) = \cdots \tag{20}$$

Jetzt können wir den störenden Term $-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t}$ zum Verschwinden bringen! Wir fordern einfach, dass er sich mit $q\frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t}$ zu Null aufhebt. Das können wir jetzt wirklich „fordern“, weil $\varphi(\vec{r},t)$ und $\chi(\vec{r},t)$ ja beliebig wählbare Eichgrößen sind, die die Physik unverändert lassen!

$$-\hbar\frac{\partial\,\varphi(\vec{r},t)}{\partial t} + q\frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t} = 0 \tag{21}$$

Das können wir auch so anschreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t}(-\hbar\,\varphi(\vec{r},t)) + \frac{\partial}{\partial t}(q\,\chi(\vec{r},t)) = 0 \tag{22}$$

Diese Gleichung ist am einfachsten zu erfüllen, wenn wir die Ausdrücke, auf die die $\partial/\partial t$ Operatoren wirken, gleich setzen:

$$-\hbar\,\varphi(\vec{r},t) + q\,\chi(\vec{r},t) = 0 \tag{23}$$

Somit:

$$\varphi(\vec{r},t) = \frac{q}{\hbar}\chi(\vec{r},t) \tag{24}$$

Setzen das zur Kontrolle in Gleichung (20) ein, sehen wir, dass wir den störenden Term wirklich eliminieren können:

$$\left(\cancel{-q\frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t}} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\Phi(\vec{r},t) + \cancel{q\frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t}}\right)\Psi(\vec{r},t) = \cdots \tag{25}$$

Nun, da wir den von der Eichgröße abhängigen Term erfolgreich eliminiert haben, sieht die linke Seite der Gleichung also so aus:

$$\underline{\left(+i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\Phi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t)} = \cdots \tag{26}$$

Durch die Einführung des Eichfeldes $\Phi(\vec{r},t)$ und durch geschickte Wahl der zugehörigen Eichgröße $\varphi(\vec{r},t) = \frac{q}{\hbar}\chi(\vec{r},t)$, sieht die linke Seite der Schrödingergleichung, dargestellt in Formel (26), nach der Eichtransformation wieder genauso aus wie vor der Eichtransformation in Formel (19)!

2.2 Rechte Seite der Schrödingergleichung

Sehen wir uns nun die rechte Seite von Gleichung (12) an:

$$\ldots = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{27}$$

Vergleichen wir dies mit der rechten Seite von Gleichung (1), erkennen wir auch hier einen Unterschied:

$$\vec{\nabla}^2 \; vs. \; \left(i\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\right)^2 \tag{28}$$

Ziehen wir zunächst einmal in Formel (27) das $\hbar^2$ in die quadratische Operatorklammer hinein:

$$\ldots = -\frac{1}{2m}\left(i\hbar\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) + \hbar\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{29}$$

Jetzt ziehen wir (innerhalb der quadratischen Klammer) ein i heraus:

$$\ldots = -\frac{1}{2m}\left(i\left(\hbar\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) + \frac{1}{i}\hbar\vec{\nabla}\right)\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{30}$$

Wegen $\frac{1}{i} = -i$ kann man das auch so anschreiben:

$$\ldots = -\frac{1}{2m}\left(i\left(\hbar\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) - i\hbar\vec{\nabla}\right)\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{31}$$

Das aus der inneren Klammer „herausgezogene" i können wir auch aus der äußeren Klammer herausziehen, wodurch sich wegen $i^2 = -1$ das Vorzeichen umdreht:

$$\ldots = +\frac{1}{2m}\left(\hbar\vec{\nabla}\,\varphi(\vec{r},t) - i\hbar\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{32}$$

In Gleichung (24) haben wir festgelegt, wie $\varphi(\vec{r},t)$ durch $\chi(\vec{r},t)$ ausgedrückt werden kann. Wir setzen das nun ein:

$$\ldots = \frac{1}{2m}\left(q\vec{\nabla}\chi(\vec{r},t) - i\hbar\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{33}$$

Wir wollen nun also den vektorwertigen Ausdruck $q\vec{\nabla}\chi(\vec{r},t)$ eliminieren. Weil es zuvor schon so gut funktioniert hat, führen wir wieder ein Eichfeld ein; diesmal aber ein *vektorielles* Eichfeld $\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)$. Wieder fordern wir eine Eichfreiheit in der Gestalt des Terms, den wir verschwinden lassen wollen[1]:

$$\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) \rightarrow \tilde{\vec{\mathrm{A}}}(\vec{r},t) = \vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\chi(\vec{r},t) \tag{34}$$

Wir setzen dieses Eichfeld wie folgt in Ausdruck (33) ein:

$$\ldots = \frac{1}{2m}\left(q\vec{\nabla}\chi(\vec{r},t) - i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)^2 \Psi(\vec{r},t) \tag{35}$$

Wenn wir jetzt die Eichtransformation (34) durchführen, erhalten wir, wie gewünscht:

$$\ldots = \frac{1}{2m}\left(q\vec{\nabla}\cancel{\chi(\vec{r},t)} - i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A} - q\vec{\nabla}\cancel{\chi(\vec{r},t)}\right)^2 \Psi(\vec{r},t) \tag{36}$$

Der Ausdruck $-i\hbar\vec{\nabla}$ ist aber nichts anderes als der Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$, und somit können wir letztlich die rechte Seite der Gleichung so anschreiben:

$$\ldots = \underline{\frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}\right)^2 \Psi(\vec{r},t)} \tag{37}$$

Damit sieht die neue Gleichung, zusammengesetzt aus den Ergebnissen (26) und (37), so aus:

$$\boxed{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\Phi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - q\,\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)\right)^2 \Psi(\vec{r},t)} \tag{38}$$

Mit Grundlagenkenntnissen in Elektrodynamik erkennt man leicht:

- Der Ausdruck $\Phi(\vec{r},t)$ mit der Eichfreiheit $\Phi(\vec{r},t) \rightarrow \tilde{\Phi}(\vec{r},t) = \Phi(\vec{r},t) - \frac{\partial\chi(\vec{r},t)}{\partial t}$ ist offenbar das elektrische Potential;
- der Ausdruck $\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)$ mit der Eichfreiheit $\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) \rightarrow \tilde{\vec{\mathrm{A}}}(\vec{r},t) = \vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\chi(\vec{r},t)$ ist offenbar das magnetische Potential.
- Der Ausdruck $q\,\Phi(\vec{r},t)$ beschreibt die potentielle Energie des Teilchens, und
- die Ersetzung von $\hat{\vec{p}}$ durch $\hat{\vec{p}} - q\vec{A}$ entspricht der Ersetzung des kinetischen Impulses $\hat{\vec{p}}$ durch den kanonischen Impuls $\hat{\vec{\pi}}$.

Es stellt sich also heraus:

- Gleichung (38) beschreibt die Wechselwirkung eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld im Rahmen der (nichtrelativistischen) Quantenmechanik! Das ist extrem bemerkenswert, denn wir sind *nur* von der Schrödingergleichung ausgegangen, und hatten mit Maxwell und Elektromagnetismus nichts am Hut! Einzig die Forderung nach Eichinvarianz hat zu diesem Ergebnis geführt!

Der eben beschriebene Mechanismus ist der Spezialfall eines allgemeinen Prinzips:

Wann immer ein physikalisches Gesetz einer *globalen* Symmetrie genügt (hier: Invarianz der Observablen der Schrödingergleichung gegen eine *globale* Phasentransformation), kann die stärkere Forderung nach Invarianz gegenüber *lokalen* Transformationen (hier: Invarianz gegenüber *lokalen* Phasentransformationen der Symmetriegruppe$U(1)$) nur durch die Einführung neuer Felder erfüllt werden, d.h. es tritt eine durch diese Eichfelder vermittelte Wechselwirkung auf.

---

[1] Warum wir hier – scheinbar willkürlich – plötzlich ein positives Vorzeichen in der Eichtransformation wählen, klären wir in Kapitel 3 auf!

Nachdem, was wir heute wissen, können alle bekannten fundamentalen Wechselwirkungen als Eichtheorien formuliert werden! So können nicht nur die elektromagnetische, die starke und die schwache Wechselwirkung mit Eichtheorien, denen die Symmetriegruppen $U(1)$, $SU(2)$ und $SU(3)$ zugrunde liegen, beschrieben werden, sondern man kann sogar zur Gravitationstheorie der allgemeinen Relativitätstheorie gelangen, indem man die (globalen) Koordinatentransformationen der speziellen Relativitätstheorie zu lokalen Transformationen erweitert[2]!

3 Wir schließen eine kleine Lücke mit Hilfe von Vierervektoren

Die Darstellung der Zusammenhänge im vorigen Kapitel verzichtet völlig auf die sonst übliche Darstellung mit Vierervektoren. Die Idee dahinter ist, die ansonsten so abstrakt wirkende Eichtheorie am Beispiel der Schrödingergleichung in konventioneller Schreibweise leichter verständlich und konkret fassbar zu machen.

Hinzu kommt, dass die Verwendung von Vierervektoren nur in relativistisch kovarianten Theorien wirklich angebracht ist, und die Schrödingergleichung, an Hand derer wir hier das Prinzip von lokaler Eichinvarianz gezeigt haben, ist eben (im Gegensatz zur Dirac-Gleichung) nicht relativistisch kovariant.

Ein kurzer Blick auf Vierervektoren ist dennoch sinnvoll. Schließlich müssen die obige Ergebnisse im Grenzfall kleiner Geschwindigkeiten ja auch in Vierer-Schreibweise darstellbar sein, und außerdem wird uns diese Darstellung helfen, eine kleine Lücke in obiger Erklärung zu schließen.

3.1 Allgemeines

Bisher haben wir die Wellenfunktion als Funktion von Ort $\vec{r}$ und Zeit t angeschrieben:

$$\Psi = \Psi(\vec{r}, t) \tag{39}$$

Wir steigen jetzt auf Vierervektoren um, und schreiben daher ab sofort

$$\Psi = \Psi(x^\alpha) \tag{40}$$

wobei wir den Vierer-Koordinatenvektor x^α definieren als

$$x^\alpha \mathrel{\widehat{=}} \begin{pmatrix} ct \\ \vec{r} \end{pmatrix} \tag{41}$$

mit $\alpha = 0,1,2,3$. Wir gehen von folgender Minkowski-Metrik aus:

$$\eta_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(1, -1, -1, -1) \tag{42}$$

Damit gilt:

$$\partial_\mu \mathrel{\widehat{=}} \begin{pmatrix} \frac{1}{c}\partial_t \\ \vec{\nabla} \end{pmatrix}; \ \partial^\mu \mathrel{\widehat{=}} \begin{pmatrix} \frac{1}{c}\partial_t \\ -\vec{\nabla} \end{pmatrix} \tag{43}$$

Das elektrische Potential $\Phi(\vec{r}, t)$ und das magnetische Vektorpotential $\vec{\mathrm{A}}(\vec{r}, t)$ lassen sich im Viererpotential A^μ zusammenfassen:

$$A^\mu \mathrel{\widehat{=}} \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathrm{c}}\Phi(x^\alpha) \\ \vec{\mathrm{A}}(x^\alpha) \end{pmatrix} \tag{44}$$

[2] UTYIAMA, R., *Phys. Rev.* 101 (1956) 1597.

3.2 Viererektoren erklären ein Vorzeichen

Betrachten wir nochmal die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen, von der wir ausgegangen sind:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\,\Psi(\vec{r},t) \tag{45}$$

Dies können wir so umschreiben:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla}\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{46}$$

Hier im Vergleich dazu die umgeschriebene Gleichung (38), die invariant unter lokaler Eichtransformation ist (wobei wir $\hat{\vec{p}}$ durch $-i\hbar\vec{\nabla}$ ersetzen):

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\Phi(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - q\,\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)\right)^2\Psi(\vec{r},t) \tag{47}$$

Wenn wir die rot und blau hervorgehobenen Differentialoperatoren betrachten, ergeben sich folgende Ersetzungen:

$$\begin{gathered} i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\,\Phi(\vec{r},t) \\ -i\hbar\vec{\nabla} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla} - q\,\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) \end{gathered} \tag{48}$$

Das können wir schreiben als

$$i\hbar\begin{pmatrix}\frac{1}{c}\partial_t \\ -\vec{\nabla}\end{pmatrix} \rightarrow i\hbar\begin{pmatrix}\frac{1}{c}\partial_t \\ -\vec{\nabla}\end{pmatrix} - q\begin{pmatrix}\frac{1}{c}\Phi(x^\alpha) \\ \vec{\mathrm{A}}(x^\alpha)\end{pmatrix} \tag{49}$$

Oder, unter Beachtung von (43) und (44), in Viererschreibweise:

$$\boxed{i\hbar\partial^\mu \rightarrow i\hbar\partial^\mu - qA^\mu} \tag{50}$$

Man nennt diese Ersetzung die <u>minimale Substitution</u>. Damit können wir nun eine kleine Lücke in der Erklärung aus Kapitel 2 schließen:

Wir haben in (16) folgende Eichfreiheit eingeführt:

$$\Phi(\vec{r},t) \rightarrow \tilde{\Phi}(\vec{r},t) = \Phi(\vec{r},t) - \frac{\partial\,\chi(\vec{r},t)}{\partial t} \tag{51}$$

Das rot hervorgehobene <u>negative</u> Vorzeichen war dabei willkürlich gewählt. Diese Wahl bewirkt aber zwingend, dass wir (wie in (48) dargestellt) $q\,\Phi(\vec{r},t)$ von $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ <u>subtrahieren</u> müssen!

In (34) haben wir uns dann (scheinbar willkürlich, und ohne Erklärung) entschlossen, beim Vektorpotential die Eichfreiheit mit <u>positivem</u> Vorzeichen zu definieren (siehe unten blau hervorgehoben), so dass wir (wie in (48) dargestellt) letztlich $q\,\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)$ zwingend von $-i\hbar\vec{\nabla}$ subtrahieren müssen.

$$\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) \rightarrow \tilde{\vec{\mathrm{A}}}(\vec{r},t) = \vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\,\chi(\vec{r},t) \tag{52}$$

Wir hätten das an dieser Stelle zwar damit begründen können, dass wir schon erahnen, das hier offenbar das elektromagnetische Feld „entsteht“, und aus den Maxwellgleichungen folgt, dass bei den Eichtransformationen von $\Phi(\vec{r},t)$ und $\vec{\mathrm{A}}(\vec{r},t)$ ein unterschiedliches Vorzeichen benötigt wird.

Wir müssen Maxwell aber gar nicht bemühen! Ein Blick auf (49) und (50) offenbart, dass diese Wahl notwendig war, damit sich die minimale Substitution $i\hbar\partial^\mu \rightarrow i\hbar\partial^\mu - qA^\mu$ kovariant formulieren lässt!