Heiko Dumlich, Max Hoffmann 22. Januar 2007

12 Übungsblatt Theoretische Physik IV

12.1 (Elektron im Magnetfeld)

Der Hamiltonoperator für ein Elektron (Ladung $q = -e$, $e > 0$), dass sich in einem homogenen Magnetfeld in z-Richtung bewegt ($\vec{B}(\vec{r}) = B\vec{e}_z$) und kein Potential spürt ($V(\vec{r}) = 0$), lautet:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\pi}^{\mathbf{2}} + \mu_B \hat{\sigma}_z B. \tag{1}$$

Mit dem Operator des kanonischen Impulses (in Ortsdarstellung) $\hat{\pi} = \frac{\hbar}{i}\nabla + e\vec{A}(\vec{r})$, dem Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$, dem Bohrschen Magneton μ_B und der Pauli-Matrix $\hat{\sigma}_z$. Es sind die Energieeigenwerte und Eigenzustände des Problems zu bestimmen.

Für ein beliebiges Vektorpotential gilt $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. Zudem gilt für ein Vektorpotential $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ (Coulomb-Eichung). In diesem Fall gilt für das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\left(\vec{B} \times \vec{r}\right)$. In unserem speziellen Fall ist $\vec{B} = B\vec{e}_z$, daher folgt für das Vektorpotential:

$$\vec{A}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -By \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix},$$

alternativ würde auch z.B.

$$\vec{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ Bx \\ 0 \end{pmatrix}$$

funktionieren, dies lässt sich leicht durch einsetzen verifizieren. Für die erste Bedingung erhalten wir:

$$\vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ 0 & Bx & 0 \end{vmatrix} = \partial_x Bx\vec{e}_z = B\vec{e}_z$$

und für die zweite Bedingung:

$$\nabla \cdot \vec{A} = \partial_x(0) + \partial_y(Bx) + \partial_z(0) = 0.$$

Für $\vec{A}_1$ werden die Bedingungen auch erfüllt:

$$\vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -\frac{1}{2}By & \frac{1}{2}Bx & 0 \end{vmatrix} = \partial_x \frac{1}{2}Bx\vec{e}_z - \partial_y\left(-\frac{1}{2}By\right)\vec{e}_z = B\vec{e}_z$$

und

$$\nabla \cdot \vec{A} = \partial_x \left(-\frac{1}{2}By\right) + \partial_y \left(\frac{1}{2}Bx\right) + \partial_z (0) = 0$$

Wir betrachten $\hat{\pi}^{\mathbf{2}}$:

$$\hat{\pi}^{\mathbf{2}} = \left[\frac{\hbar}{i}\nabla + e\vec{A}(\vec{r})\right]^2 = \left[-\hbar^2\nabla^2 + \frac{\hbar}{i}\nabla e\vec{A}(\vec{r}) + e\vec{A}(\vec{r})\frac{\hbar}{i}\nabla + e^2\vec{A}^2(\vec{r})\right].$$

Wenden wir den Operator $\vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r})$ in Ortsdarstellung (d.h. $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$) auf eine Wellenfunktion an, ergibt sich:

$$\frac{\hbar}{i}\nabla \cdot \left(\vec{A}\psi\right) = \frac{\hbar}{i}\underbrace{\left(\nabla \cdot \vec{A}\right)}_{=0}\psi + \vec{A} \cdot \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi\right) = \vec{A} \cdot \frac{\hbar}{i}\nabla\psi.$$

Somit vertauschen also die Operatoren und wir können für $\hat{\pi}^2$ schreiben:

$$\hat{\pi}^{\mathbf{2}} = \left[-\hbar^2\nabla^2 + 2e\vec{A}(\vec{r})\frac{\hbar}{i}\nabla + e^2\vec{A}^2(\vec{r})\right].$$

Betrachten wir den zweiten Term des Hamiltonian (1), dieser ist gegeben mit:

$$\mu_B\hat{\sigma}_z B = \begin{pmatrix} \mu_B B & 0 \\ 0 & -\mu_B B \end{pmatrix}.$$

Es gilt also die stationäre Pauligleichung:

$$\left(\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2 + 2e\vec{A}(\vec{r})\frac{\hbar}{i}\nabla + e^2\vec{A}^2(\vec{r})\right] + \mu_B\hat{\sigma}_z B\right)\vec{\psi} = E\vec{\psi},$$

mit

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}.$$

Aus dieser ergeben sich die zwei Gleichungen:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2 + 2e\vec{A}(\vec{r})\frac{\hbar}{i}\nabla + e^2\vec{A}^2(\vec{r})\right] + \mu_B B\right)\psi_+ &= E\psi_+ \\
\left(\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2 + 2e\vec{A}(\vec{r})\frac{\hbar}{i}\nabla + e^2\vec{A}^2(\vec{r})\right] - \mu_B B\right)\psi_- &= E\psi_-.
\end{aligned}$$

Wir betrachten die erste Gleichung, wobei wir schreiben können, wenn wir unser $\vec{A}_1$ explizit einsetzen:

$$\left(\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2 + eBx\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} - eBy\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + e^2\left(\frac{1}{4}B^2y^2 + \frac{1}{4}B^2x^2\right)\right] + \mu_B B\right)\psi_+ = E\psi_+$$

Setzen wir $\vec{A}_2$ explizit ein, erhalten wir folgende Gleichung:

$$\left(\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2 + 2eBx\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + e^2B^2x^2\right] + \mu_B B\right)\psi_+ = E\psi_+$$

Es ist also sofort zu erkennen, das die ψ_+ je nach Wahl von $\vec{A}$ eine andere Form erhalten werden, wobei die z-Richtung ausgezeichnet ist (in diese ist ja auch das $\vec{B}$-Feld gerichtet!).

Wir suchen einen Ansatz für ψ_+ von der zweiten Gleichung, da diese leichter zu lösen sein wird (im Vektorpotential verschwinden 2 Komponenten und nicht nur eine wie bei der ersten Gleichung für $\vec{A}_1$), wobei auf Grund der x- und x^2-Terme folgender Ansatz sinnvoll erscheint:

$$\psi_+ = X\left(x\right)e^{ik_y y}e^{ik_z z}.$$

Setzen wir diesen Ansatz ein, ergibt sich:

$$\left(\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + 2eBx\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} + e^2B^2x^2\right] + \mu_B B\right)X\left(x\right)e^{ik_y y}e^{ik_z z} = EX\left(x\right)e^{ik_y y}e^{ik_z z},$$

wobei unser Ziel ist, dies auf die Form eines harmonischen Oszillators zurückzuführen der uns gut bekannt ist:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X\left(x\right)}{\partial x^2} + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_y^2 + k_z^2\right) + \frac{eB}{m}x\frac{\hbar}{i}ik_y + \frac{e^2B^2}{2m}x^2\right)X\left(x\right) + \mu_B BX\left(x\right) = EX\left(x\right),$$

wir können die Zyklotronfrequenz einsetzen mit $\omega_c = \frac{eB}{m_e}$ folgt, wobei wir zudem umstellen können:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X\left(x\right)}{\partial x^2} + \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \hbar k_y\omega_c x + \frac{1}{2}m\omega_c^2 x^2\right)X\left(x\right) = \left(E - \mu_B B - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right)X\left(x\right)$$

Wir können die binomische Formel benutzen und die von x unabhängige neue Energie $\tilde{E} = \left(E - \mu_B B - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right)$ definieren:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X\left(x\right)}{\partial x^2} + \left(\frac{\hbar k_y}{\sqrt{2m}} + \sqrt{\frac{m}{2}}\omega_c x\right)^2 X\left(x\right) = \tilde{E}X\left(x\right),$$

wobei diese Gleichung der Schrödingergleichung eines verschobenen Oszillators entspricht. Wir können dies umschreiben, um dies besser zu erkennen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 X\left(x\right)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega_c^2\left(\frac{\hbar k_y}{m\omega_c} + x\right)^2 X\left(x\right) = \tilde{E}X\left(x\right).$$

Wir können jetzt substituieren $\xi = \frac{\hbar k_y}{m\omega_c} + x$, damit folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \tilde{X}(\xi)}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2}m\omega_c^2\xi^2\tilde{X}(\xi) = \tilde{E}\tilde{X}(\xi).$$

Hierfür kennen wir die Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen, diese lauten:

$$\tilde{E} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

und

$$\tilde{X}(\xi) = \left(\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}}\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\frac{m\omega_c}{\hbar}\xi^2}{2}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}}\xi\right),$$

wobei $H_n(x)$ die Hermiteschen Polynome sind.

Wir müssen nur noch substituieren, um ein Ergebnis für die Energieeigenwerte und die Energieeigenfunktionen der Aufgabe zu erhalten, es folgt für die Energieeigenwerte:

$$E_+ = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \mu_B B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

und für die Energieeigenfunktion:

$$\psi_+ = \left(\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}}\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{\frac{m\omega_c}{\hbar}\left(\frac{\hbar k_y}{m\omega_c} + x\right)^2}{2}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}}\left(\frac{\hbar k_y}{m\omega_c} + x\right)\right) e^{ik_y y}e^{ik_z z}.$$

Interessanter Weise ist eine erneute erschöpfende Behandlung für den Fall ψ_- nicht notwendig, was man schnell aus den Gleichungen erkennt, da sich für diesen nur das Vorzeichen von $\mu_B B$ ändert, dieses spielt für die Energieeigenfunktionen jedoch keine Rolle und liefert nur andere Energieeigenwerte, es folgt also für ψ_-:

$$E_- = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c - \mu_B B + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}.$$

Während $\psi_+ = \psi_-$ gilt, somit also:

$$\vec{\psi} = \psi_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Dies bedeutet physikalisch interpretiert, dass Elektronen mit verschiedenem Spin verschiedene Energien besitzen, obwohl sie sich im selben Orbital aufhalten, bzw. gerade, dass sie sich im selben Orbital aufhalten "dürfen", wenn sie verschiedenen Spin besitzen.

12.2 (Elektron im Hohlzylinder)

Wir betrachten ein Elektron, dass sich in folgendem in Zylinderkoordinaten gegebenen Potential bewege:

$$V(\rho,\varphi,z)=\begin{cases}0 & \text{für } \rho_a\leq\rho\leq\rho_b\\ \infty & \text{sonst}\end{cases}$$

a)

Es sind die Randbedingungen für die Wellenfunktion in den Punkten $\rho=\rho_a$ und $\rho=\rho_b$ zu bestimmen. Die Wellenfunktion muss in $\rho=\rho_a$ und $\rho=\rho_b$ identisch verschwinden, da das Potential gegen unendlich strebt. Es gilt also:

$$\begin{aligned}\psi(\rho=\rho_a) &= 0\\ \psi(\rho=\rho_b) &= 0\end{aligned}$$

b)

Es sind die (nicht-normierten) Energieeigenfunktionen mit Hilfe eines Separationsansatzes zu finden, zudem ist zu zeigen, dass die Energieeigenwerte gegeben sind durch

$$E_{lnk}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_{ln}^2+k^2\right),$$

wobei k eine kontinuierliche Wellenzahl sei und die k_{ln} als n-te Wurzel der transzendenten Gleichung

$$J_l(k_{ln}\rho_b)\,N_l(k_{ln}\rho_a)-J_l(k_{ln}\rho_a)\,N(k_{ln}\rho_b)=0$$

gegeben sind. Die Funktionen $J_l(x)$ und $N_l(x)$ sind definiert als die linear unabhängigen Lösungen der Besselschen Differentialgleichung

$$x^2\frac{d^2}{dx^2}J_l(x)+x\frac{d}{dx}J_l(x)+\left(x^2-l^2\right)J_l(x)=0$$

äquivalent für $N_l(x)$.

Wir betrachten die Schrödingergleichung für dieses Problem, wobei wir den LaPlace-Operator in Zylinderkoordinaten ($\Delta=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$) verwenden und nur den Bereich betrachten in dem die Wellenfunktion nicht verschwindet, d.h. $\rho_a\leq\rho\leq\rho_b$ bzw. $V(\rho)=0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\right]\psi=E\psi.$$

Wählen des Separationsansatzes:

$$\psi(\rho,\varphi,z) = R(\rho)\,\Phi(\varphi)\,Z(z)$$

und Eingehen in die SG mit diesem liefert:

$$\frac{\Phi Z}{\rho}\frac{\partial R}{\partial \rho} + \Phi Z \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{RZ}{\rho^2}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + R\Phi \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} R\Phi Z.$$

Wir multiplizieren mit $\frac{\rho^2}{R\Phi Z}$ und erhalten:

$$\frac{\rho}{R}\frac{\partial R}{\partial \rho} + \frac{\rho^2}{R}\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \rho^2 \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -\rho^2 \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Hieraus können wir die Besselsche Differentialgleichung erhalten, hierzu betrachten wir:

$$\frac{\rho}{R}\frac{\partial R}{\partial \rho} + \frac{\rho^2}{R}\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \rho^2 \underbrace{\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}}_{=const.=-k^2} + \underbrace{\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}}_{=const.=-l^2} = -\rho^2 \frac{2mE}{\hbar^2}$$

mit

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z} = -k^2 \Rightarrow Z = Ae^{\pm ikz}$$

da das Teilchen in z-Richtung frei ist und somit für diese Richtung als freies Teilchen angenommen werden kann, und

$$\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi} = -l^2 \Rightarrow \Phi = Ce^{il\varphi} + De^{-il\varphi}$$

wobei wegen $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$ auf Grund der Winkelsymmetrie gelten muss:

$$C + D = Ce^{il2\pi} + De^{-il2\pi}.$$

Dies wird jedoch nur durch ganzzahlige l erfüllt, daher gilt $l \in \mathbb{Z}$.
Wir erhalten, wenn wir die DGL mit R multiplizieren:

$$\rho\frac{\partial R}{\partial \rho} + \rho^2 \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \left[\rho^2 \underbrace{\left(\frac{2mE}{\hbar^2} - k^2\right)}_{=\mu^2} - l^2\right] R = 0$$

Substitution von $x = \mu\rho$ liefert ($\frac{d}{dx} = \frac{dp}{dx}\frac{d}{dp} = \frac{1}{\mu}\frac{d}{dp} \Leftrightarrow \mu\frac{d}{dx} = \frac{d}{dp}$):

$$x\frac{d\tilde{R}(x)}{dx} + x^2 \frac{d^2\tilde{R}(x)}{dx^2} + \left(x^2 - l^2\right)\tilde{R}(x) = 0$$

wie bereits oben angekündigt die Besselsche DGL. Mit der Definition, dass $J_l(x)$ und $N_l(x)$ die linear unabhängigen Lösungen dieser sind, können wir also die Linearkombination dieser als $\tilde{R}(x)$ schreiben:

$$\tilde{R}(x) = \eta_j J_l(x) + \eta_n N_l(x),$$

wobei wir hierbei ausgenutzt haben das l ganzzahlig ist, d.h. $N_l(x)$ ist die Webersche Funktion (nach Bronstein auch als $Y_n(x)$ geschrieben).

Es ist an der Zeit unsere Randbedingungen aus Aufgabenteil a) wieder rauszukramen, wobei wir mit dem Separationsansatz erhalten:

$$\begin{aligned} \psi(\rho_a, \varphi, z) &= R(\rho_a)\,\Phi(\varphi)\,Z(z) = 0 \\ \psi(\rho_b, \varphi, z) &= R(\rho_b)\,\Phi(\varphi)\,Z(z) = 0 \end{aligned}$$

somit gilt jedoch auch mit $\tilde{R}(x) = \tilde{R}(\mu\rho)$ und $\psi(\rho_a, \varphi, z) = \psi(\rho_b, \varphi, z) = 0$:

$$\tilde{R}(\mu\rho_a) = 0 = \tilde{R}(\mu\rho_b)$$

Dies bedeutet jedoch zugleich:

$$\begin{aligned} \eta_j J_l(\mu\rho_a) + \eta_n N_l(\mu\rho_a) &= 0 \\ \eta_j J_l(\mu\rho_b) + \eta_n N_l(\mu\rho_b) &= 0 \end{aligned}$$

dies können wir umschreiben zu:

$$\begin{pmatrix} J_l(\mu\rho_a) & N_l(\mu\rho_a) \\ J_l(\mu\rho_b) & N_l(\mu\rho_b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_j \\ \eta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

wobei die Koeffizientendeterminante verschwinden muss, d.h.

$$\begin{vmatrix} J_l(\mu\rho_a) & N_l(\mu\rho_a) \\ J_l(\mu\rho_b) & N_l(\mu\rho_b) \end{vmatrix} = J_l(\mu\rho_a)\,N_l(\mu\rho_b) - J_l(\mu\rho_b)\,N_l(\mu\rho_a) = 0$$

Dies ist aber gerade Gleichung (4) vom Übungsblatt:

$$J_l(k_{ln}\rho_b)\,N_l(k_{ln}\rho_a) - J_l(k_{ln}\rho_a)\,N_l(k_{ln}\rho_b) = 0,$$

wobei $\mu = k_{ln}$ sei, somit erhalten wir, da $\mu^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - k^2$ ist, durch umstellen:

$$E_{lnk} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_{ln}^2 + k^2\right).$$

$\square$

Für die nicht-nomierten $(A = 1)$ Energieeigenfunktionen folgt:

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \left(\eta_j J_l(k_{nl}\rho) + \eta_n N_l(k_{nl}\rho)\right)\left(Ce^{il\varphi} + De^{-il\varphi}\right)e^{\pm ikz}.$$

c)

Es wird ein homogenes Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z = \nabla \times \vec{A}$ für $0 \leq \rho \leq \rho_a$ angelegt. Es ist das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$ und die veränderte Säkulargleichung (4) vom Übungsblatt für die Energieeigenwerte zu bestimmen.

Wir betrachten ein zylindersymmetrisches Problem, daher betrachten wir die Rotation in Zylinderkoordinaten, es gilt:

$$\nabla \times \vec{A} = \vec{e}_\rho \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial A_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial A_\varphi}{\partial z} \right) + \vec{e}_\varphi \left(\frac{\partial A_\rho}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial \rho} \right) + \vec{e}_z \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\varphi) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial A_\rho}{\partial \varphi} \right)$$

damit folgt aber, da unser $\vec{B}$-Feld in z-Richtung zeigt:

$$B = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\varphi) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial A_\rho}{\partial \varphi}.$$

Wir wählen $\frac{\partial A_\rho}{\partial \varphi} = 0$, somit folgt also:

$$B\rho = \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\varphi).$$

Wir integrieren beide Seiten der Gleichung, wobei das $\vec{B}$-Feld nur innen ($\rho \leq \rho_a$) existiert:

$$\begin{aligned} \int_0^{\rho_a} B\rho &= \int_0^{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\varphi) \\ \frac{B}{2} \frac{\rho_a^2}{\rho} &= A_\varphi \end{aligned}$$

Dies ist das Ergebnis für das äußere Vektorpotential $\vec{A}_{aussen}$. Somit ist dieses gegeben mit

$$\vec{A}_{aussen} = \frac{B}{2} \frac{\rho_a^2}{\rho} \vec{e}_\varphi$$

Wenn $\vec{B} = B\vec{e}_z$ für $0 \leq \rho \leq \rho_a$ ergibt jedes Flächenintegral über die zur z-Achse senkrechten Ebene ($\vec{n} = \vec{e}_z$), welches den Innenraum umschließt:

$$\int\int_\Gamma B\,\vec{e}_z \cdot \vec{n}\; d\Gamma = \int\int_\Gamma B\; d\Gamma = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\rho_a} dr\, Br = \pi \rho_a^2 B.$$

Weil aber $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ ist, können wir den Stokesschen Satz anwenden:

$$\int\int_\Gamma \left(\vec{\nabla} \times \vec{A} \right) \cdot \vec{e}_z\, d\Gamma = \oint_{\bar{\gamma}} \vec{A} \cdot d\vec{x}.$$

Dies liefert in kartesischen Koordinaten

$$\oint_{\bar{\gamma}} \vec{A} \cdot d\vec{x} = \oint_{\bar{\gamma}} (A_x dx + A_y dy + A_z dz)$$

mit der Parametrisierung $\bar{\gamma}$ die dem Rand des Kreises entspricht $(\rho \leq \rho_a)$ $\varphi \in [0, 2\pi]$, $x = \rho \cos\varphi$, $y = \rho \sin\varphi$ und $z = 0$ folgt somit:

$$\begin{aligned}
\pi\rho_a^2 B &= \int_0^{2\pi} \left(A_x \frac{dx}{d\varphi} d\varphi + A_y \frac{dy}{d\varphi} d\varphi + A_z \frac{dz}{d\varphi} d\varphi \right) \\
&= \rho \int_0^{2\pi} \left(A_x \left(-\sin\varphi\right) d\varphi + A_y \left(\cos\varphi\right) d\varphi + 0 \right) \\
&= \rho \int_0^{2\pi} \left(A_y \cos\varphi - A_x \sin\varphi \right) d\varphi \\
&= \rho \int_0^{2\pi} A_\varphi \, d\varphi \\
&= 2\pi\rho A_\varphi
\end{aligned}$$

Wir erhalten also ein Vektorpotential von

$$A_\varphi = \frac{\rho B}{2},$$

d.h. $\vec{A}_{innen} = A_\varphi \vec{e}_\varphi = \frac{\rho B}{2} \vec{e}_\varphi$.

Wir betrachten nun das äußere Vektorpotential, welches sich im Leiter befindet. Bei diesem Vektorpotential verschwindet praktischerweise auch der Gradient in Zylinderkoordinaten. Wir koppeln das Potential an den kanonischen Impuls an (da wir wie in 12.1 den Einfluss eines Magnetfeldes besitzen) und rechnen in Ortsdarstellung aus:

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{\pi}}^2 &= \left(\hat{\vec{p}} + e\vec{A} \right)^2 \\
&= \hat{\vec{p}}^2 + \left(\frac{Be\rho_a^2}{2\rho} \right)^2 + \frac{Be\rho_a^2}{\rho} \vec{e}_\varphi \cdot \hat{\vec{p}} \\
&= -\hbar^2 \Delta + \left(\frac{Be\rho_a^2}{2\rho} \right)^2 + \frac{Be\rho_a^2 \hbar}{\rho^2 i} \frac{\partial}{\partial\varphi}.
\end{aligned}$$

Wir wählen für die Wellenfunktion wieder den bewährten Separationsansatz:

$$\psi\left(\rho, \varphi, z\right) = R\left(\rho\right) \Phi\left(\varphi\right) Z\left(z\right)$$

Dies eingesetzt in unsere Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi = \frac{\hat{\vec{\pi}}^2}{2m} \psi = E\psi$$

ergibt:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho} \frac{R'}{R} + \frac{R''}{R} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\Phi'}{\Phi} + \frac{Z''}{Z} \right) + \frac{Be\rho_a^2}{2m\rho^2 i} \frac{\Phi'}{\Phi} + \frac{1}{2m} \left(\frac{Be\rho_a^2}{2\rho} \right)^2 \right] \psi = E\psi$$

Wir multiplizieren mit $\frac{-2mR\rho^2}{\psi\hbar^2}$ und erhalten:

$$\rho R' + \rho^2 R'' + \left(1 - \frac{Be\rho_a^2}{\hbar i}\right)\frac{\Phi'}{\Phi}R + \rho^2\frac{Z''}{Z}R - \left(\frac{Be\rho_a^2}{2\hbar}\right)^2 R = \frac{-2mE\rho^2}{\hbar^2}R.$$

Umstellen liefert

$$\rho R' + \rho^2 R'' + \underbrace{\left[\left(1 - \frac{Be\rho_a^2}{\hbar i}\right)\frac{\Phi'}{\Phi} - \left(\frac{Be\rho_a^2}{2\hbar}\right)^2\right]}_{=-\tilde{l}^2} R + \underbrace{\left(\frac{Z''}{Z} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\rho^2}_{=\tilde{\mu}^2\rho^2=x_\alpha^2} R$$

also wieder die Besselsche DGL nur mit etwas anderen Konstanten. Das führt entsprechend auf eine etwas andere Sakulärgleichung:

$$J_l\left(\tilde{\mu}\rho_a\right)N_l\left(\tilde{\mu}\rho_b\right) - J_l\left(\tilde{\mu}\rho_b\right)N_l\left(\tilde{\mu}\rho_a\right)$$

und veränderte Energieeigenwerte. Eine tiefergehende Analyse des Problems würde uns eine weitere Energiewertaufspaltung in Abhängigkeit davon geben, ob ein Teilchen in oder gegen die Vektorpotentialfeldrichtung läuft, dies nennt man den Aharanov-Bohm-Effekt. Das besondere hieran ist, dass das Magnetfeld sich nicht im Leiter befindet und dennoch über das Vektorfeld die Energieeigenwerte beeinflusst.