

2. Phasen

2.1	Phasen von Zustandsfunktionen	2
2.1.1.	Allgemein	2
2.1.2.	Erwartungswert von Spinoperatoren	3
2.1.3.	Spinorverhalten	4
2.1.4.	Impuls	5
2.1.5.	Atominterferometer	5
2.2	Der Aharonov-Bohm Effekt	7
2.2.1.	Kräfte, Felder, Potentiale	7
2.2.2.	Skalares Potential	8
2.2.3.	Interferometrischer Nachweis	8
2.2.4.	Vektorpotential	9
2.2.5.	Experimentelle Verifikation	11
2.2.6.	Interpretation	12
2.2.7.	Aharonov - Casher Effekt	12
2.2.8.	Varianten des AC Effekts	14
2.3	Der 'molekulare' Aharonov-Bohm Effekt	16
2.3.1.	Der Jahn-Teller Effekt	16
2.3.2.	Modell	17
2.3.3.	Energien	18
2.3.4.	Pseudorotation	19
2.3.5.	Eindeutigkeit	20
2.3.6.	Diskussion	21

2.1 Phasen von Zustandsfunktionen

2.1.1. Allgemein

Eine quantenmechanische Zustandsfunktion ist bekanntlich immer nur bis auf eine Phase definiert, d.h. der gleiche Zustand kann auch durch die Funktion $\psi' = e^{i\phi} \psi$ beschrieben werden. Dies sieht man z.B. daraus, dass der Erwartungswert

$$\langle A \rangle_{\psi} = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^* A \psi$$

$$\langle A \rangle_{\psi'} = \langle \psi' | A | \psi' \rangle = \int (e^{i\phi} \psi)^* A (e^{i\phi} \psi) = \langle A \rangle_{\psi}$$

für beide Funktionen der gleiche ist. Dies ist die wesentlichste Eichinvarianz der Quantenmechanik.

Andererseits ist für eine Zustandsfunktion, die Eigenfunktion eines Hamiltonoperators ist, die Phase eine Art Uhr, welche die Zeitentwicklung darstellt. Für eine Eigenfunktion eines zeitunabhängigen Hamiltonoperators H gilt bekanntlich

$$\psi(t) = \psi(0) e^{-iHt}$$

Es ist also gerade die Phase, welche die Zeitentwicklung enthält. Eine Multiplikation mit einem beliebigen Phasenfaktor $e^{i\phi}$ entspricht somit einer Verschiebung des Ursprungs der Zeitachse.

Während die Phase einer Zustandsfunktion keine Bedeutung hat wenn sie "isoliert" ist, wird sie von entscheidender Bedeutung wenn eine Superposition von zwei Zustandsfunktionen erzeugt wird:

$$\psi_1 = c_a \psi_a + c_b \psi_b$$

Wird hier eine der beiden Basisfunktionen mit einem Phasenfaktor multipliziert,

$$\psi_2 = c_a \psi_a e^{i\phi} + c_b \psi_b$$

so unterscheiden sich die Erwartungswerte von Operatoren, die in der Basis (ψ_a, ψ_b) nicht diagonal sind:

$$\langle A \rangle_{\psi_1} = \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle =$$

$$= |c_a|^2 \langle A \rangle_a + |c_b|^2 \langle A \rangle_b + c_a^* c_b \langle \psi_a | A | \psi_b \rangle + c_b^* c_a \langle \psi_b | A | \psi_a \rangle$$

$$\langle A \rangle_{\psi_2} = |c_a|^2 \langle A \rangle_a + |c_b|^2 \langle A \rangle_b + c_a^* c_b e^{-i\phi} \langle \psi_a | A | \psi_b \rangle + c_b^* c_a e^{i\phi} \langle \psi_b | A | \psi_a \rangle$$

Da der nichtdiagonale Teil zwei Terme enthält, die zueinander konjugiert-komplex sind, kann er auch geschrieben werden als

$$A_{nd} = 2 \operatorname{Re} \{ c_a^* c_b e^{-i\phi} \langle \psi_a | A | \psi_b \rangle \}$$

$$= 2 \operatorname{Re}\{c_a^* c_b \langle a|A|b\rangle\} \cos + 2 \operatorname{Im}\{c_a^* c_b \langle a|A|b\rangle\} \sin$$

Damit wird offensichtlich, dass die *relative* Phase der beiden Komponenten eine wesentliche Rolle spielt.

Es ist auch nützlich, für diese Unterscheidung den Dichteoperator des Systems zu betrachten. Dieser ist gegeben als

$$= | \rangle \langle |$$

und enthält alle messbare Information eines quantenmechanischen Zustandes.

In einer Basis $|1\rangle, |2\rangle, \dots |i\rangle$ ist der Dichteoperator, der zu einem Zustand

$$= c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle + \dots + c_i |i\rangle$$

gehört somit der Dichteoperator

$$= \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* & \dots & c_1 c_i^* \\ c_1^* c_2 & |c_2|^2 & \dots & c_2 c_i^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_1^* c_i & c_2^* c_i & \dots & |c_i|^2 \end{pmatrix} .$$

Hier ist offensichtlich, dass die Diagonalelemente unabhängig von der Wahl der Phasen der einzelnen Koeffizienten sind. Die Außerdiagonalelemente sind bilinear und werden damit ebenfalls nicht verändert wenn die Phase aller Koeffizienten um den gleichen Betrag verändert wird. Im Gegensatz dazu führt eine Änderung der Phase eines einzelnen Koeffizienten oder unterschiedliche Änderungen der Phasen von mehreren Koeffizienten bei allen Außerdiagonalelementen, welche diese enthalten, zu einer Änderung. Dies sind deshalb die Änderungen welche zu einem messbaren Effekt führen.

2.1.2. Erwartungswert von Spinoperatoren

Als Beispiel betrachten wir den Erwartungswert der Spinoperatoren $I_{x,y,z}$ für den Superpositionszustand

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^i | \uparrow \rangle + | \downarrow \rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^i \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Hier stellt somit die relative Phase der beiden Zustände dar. Die Erwartungswerte sind dann

$$\langle |I_x| \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i} & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ e^i \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} e^{-i} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \cos .$$

$$\langle |I_y| \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i} & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & -i \\ e^i & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} e^{-i} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i & \\ ie^i & \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \sin \quad .$$

$$\langle |I_z| \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i} & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \\ -1 & e^i \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} e^{-i} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^i & \\ -1 & \end{pmatrix} = 0 .$$

Der Erwartungswert von I_z , der in dieser Basis diagonal ist, wird somit nicht beeinflusst, während die transversalen Komponenten, welche vollständig nichtdiagonal sind, maximal beeinflusst werden.

2.1.3. Spinorverhalten

An dieser Stelle soll kurz das Verhalten eines Spins unter einer 2 Rotation repetiert werden. Eine Rotation um einen Winkel und eine Achse wird allgemein durch den Operator

$$R = e^{i I}$$

dargestellt. Für $\theta = 2\pi$ und $\phi = z$ erhalten wir für einen Spin $I = \frac{1}{2}$

$$R_{2z} = e^{i2 I_z} = \begin{pmatrix} e^i & \\ & e^{-i} \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix} .$$

Offenbar kehrt also der Spin unter einer 2 Rotation zwar wie erwartet in den Ausgangszustand zurück, allerdings nur modulo eines Phasenfaktors -1. Dies wird als Spinorverhalten bezeichnet.

Wie oben betont sind solche Phasenänderungen an isolierten Zuständen nicht messbar.

Es gibt jedoch die Möglichkeit, sie interferometrisch zu messen. Auf diese Weise wurde dieses Spinorverhalten **Z: Interferometer** erstmals experimentell in einem Neutronen-Interferometer gemessen (H. Rauch, A. Zeilinger, G. Badurek, A. Wilfing, W. Bauspiess, and U. Bonse, 'Verification of coherent spinor rotation of fermions', Phys.Lett. 54a, 425-427 (1975).).

Auch die magnetische Resonanz bietet eine Reihe von Möglichkeiten für die Messung von solchen Phasenfaktoren, auf die später noch eingegangen wird. Arbeiten, in denen dieses Verhalten untersucht wurde, umfassen

M.E. Stoll, E.K. Wolff, and M. Mehring, 'Demonstration of 4 and 2 rotational symmetry in a spin-1 system (deuterons)', Phys. Rev. A 17, 1561-1567 (1978).

E.K. Wolff and M. Mehring, 'Spinor behaviour of a double quantum transition in three level systems', Phys. Lett. 70a, 125-126 (1979).

M. Mehring, E.K. Wolff, and M.E. Stoll, 'Exploration of the eight-dimensional spin space of a spin-1 particle by NMR', J.Magn.Reson. 37, 475-495 (1980);

M. Mehring, P. Hofer, and A. Grupp, 'Bloch-Siegert shift, Rabi oscillation, and spinor behaviour in pulsed electron-nuclear double resonance experiments', Phys. Rev. A 33, 3523-3526 (1986).

D. Suter, A. Pines, and M. Mehring, 'Indirect phase detection of NMR spinor transitions', Phys. Rev. Lett. 57, 242-244 (1986).

H.J. Bernstein, 'Spin precession during interferometry of fermions and the phase factor associated with rotations through 2 radians', Phys. Rev. Lett. 18, 1102-1103 (1967);

Y. Aharonov and L. Susskind, 'Observability of sign change of spinors under 2 rotations', Phys. Rev. 158, 1237-1238 (1967).

2.1.4. Impuls

Bekanntlich ist die Zustandsfunktion eines freien Teilchens abhängig von seinem Impuls. In einer Dimension gilt für eine ebene Welle

$$\psi(x) = \psi_0 e^{ikx},$$

wobei der Impuls

$$p = \hbar k$$

beträgt.

Im allgemeinen verändert eine Phasentransformation

$$\psi'(x) = \psi_0(x) e^{i\phi}$$

den physikalischen Zustand nicht. Ist die Transformation aber ortsabhängig

$$\psi''(x) = \psi_0(x) e^{i\phi(x)},$$

so ist der Impuls jetzt offenbar um $\hbar k = -i \hbar d \phi / dx$ verändert. Dies ist natürlich eine direkte Konsequenz davon dass der Impuls im Ortsraum nicht diagonal ist.

2.1.5. Atominterferometer

Bekanntlich haben auch schwere Teilchen wie z.B. Atome Welleneigenschaften. Atome können deshalb in Experimenten eingesetzt werden, in denen Beugung und Interferenz beobachtet werden. Dazu gehören Experimente an Interferometern, in diesem Fall also Atominterferometern.

Die wichtigsten Bestandteile eines solchen Gerätes sind Strahlteiler und Spiegel. Diese können **Z: Atominterferometer** entweder mit materiellen Mitteln realisiert werden, oder mit optischen Instrumenten, d.h. mit Laserstrahlen.

D. Keith, C.R. Ekstrom, Q.A. Turchette, and D.E. Pritchard, 'An interferometer for atoms', Phys. Rev. Lett. 66, 2693-2696 (1991).

C.J. Bordé, '*Atomic interferometry with internal state labelling*', Phys. Lett. A 140, 10-12 (1989).

C.S. Adams, M. Sigel, and J. Mlynek, '*Atom optics*', Phys. Rep. 240, 143-210 (1994).

2.2 Der Aharonov-Bohm Effekt

2.2.1. Kräfte, Felder, Potentiale

Der Ausdruck Aharonov - Bohm Effekt bezieht sich auf eine Arbeit von Aharonov und Bohm aus dem Jahr 1959 (Y. Aharonov and D. Bohm, 'Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory', Phys. Rev. 115, 485 (1959)).

Der Effekt wurde eigentlich schon 11 Jahre vorher gefunden (W. Ehrenberg and R.E. Siday, '*The refractive index in electron optics and the principle of dynamics*', Proc. Roy. Soc. London B62, 8-21 (1949).), allerdings blieb diese Arbeit offenbar lange unbeachtet.

F: PR(L) Arbeiten

Ausgangspunkt war die Frage nach der Bedeutung von elektromagnetischen Feldern, resp. Potentialen. In der klassischen Mechanik wurden ursprünglich die Bewegungsgleichungen mit Hilfe von Kräften, resp. Feldern aufgestellt. So werden die Newton'schen Bewegungsgleichungen für die Schwerkraft z.B. geschrieben als

$$m \frac{d^2z}{dt^2} = - F_G = - m g .$$

Die Felder (z.B. E, H, B, Gravitationsfeld) wurden als Verallgemeinerung der Kräfte eingeführt.

Als nächste Stufe im Abstraktionsprozess wurden Potentiale ϕ und A eingeführt. Sie stellen primär ein nützliches Hilfsmittel für die Berechnung der Kräfte, resp. Felder dar:

$$E = - \nabla \phi - \dot{A} \quad B = \nabla A \times A$$

Bei der kanonischen Beschreibung der Quantenmechanik verwendet man aber die Potentiale.

$$H = \frac{1}{2m} [p - q A]^2 + q \phi .$$

Allerdings ändert sich die Bewegung nicht wenn geeignete Eichtransformationen der Potentiale durchgeführt werden. Damit ist auch hier die Bedeutung der Potentiale nicht automatisch klar wird. Ehrenberg und Siday, resp. Aharonov und Bohm haben deshalb eine Reihe von Gedankenexperimenten diskutiert, um diese Frage zu verdeutlichen. Einige dieser Gedankenexperimente wurden später auch im Labor durchgeführt. Damit konnte gezeigt werden, dass die Potentiale tatsächlich eine physikalische Bedeutung haben, d.h. dass sie zu beobachtbaren Konsequenzen führen können, auch wenn die Felder verschwinden.

2.2.2. Skalares Potential

Wir betrachten zunächst ein geladenes Teilchen mit Ladung q , das sich im Innern eines Faraday-Käfigs befindet, an dem ein Spannungsgenerator angeschlossen ist. Der Käfig wird dadurch auf ein Potential $\phi(t)$ gebracht, im Innern verschwindet jedoch das Feld E . In der üblichen Formulierung der Quantenmechanik enthält der Hamiltonoperator

Z: Faraday-Käfig

$$H = H_0 + V(t)$$

einen Term

$$V(t) = q \phi(t) .$$

Damit entwickelt sich die Zustandsfunktion des Teilchens nach

$$\psi(t) = \psi_0(t) e^{-iS} \quad \text{mit} \quad S = \int V(t) dt$$

und $\psi_0(t)$ als Lösung des Hamiltonoperators H_0 . Dass dies eine Lösung ist kann leicht durch Einsetzen in die Schrödingergleichung überprüft werden:

$$d \psi(t)/dt = e^{-iS} d \psi_0(t)/dt - i \psi(t) V(t) = -i H_0 \psi(t) - i V(t) \psi(t) .$$

Offenbar verändert also das Potential die Phase des Zustandes. Experimentell könnte man dies realisieren indem man das Teilchen durch einen Faraday-Käfig fliegen lässt und an diesen, während das Teilchen sich darin befindet, einen Spannungspuls anlegt. Da das Feld im Inneren verschwindet wirkt keine klassische Kraft auf das Teilchen. Die Schrödingergleichung sagt aber voraus, dass sich der Zustand des Systems anders entwickelt als ohne Spannungspuls.

2.2.3. Interferometrischer Nachweis

Für einen isolierten Zustand hat dies keine Bedeutung in dem Sinn, dass die experimentell beobachtbaren Größen sich nicht ändern würden. Es gibt aber durchaus die Möglichkeit, ein Experiment zu konstruieren, in dem die Phasenänderung durch eine Variation des Potentials zu einem experimentell beobachtbaren Resultat führen würde.

Dazu werden Elektronen oder andere geladene Teilchen als Strahl auf einen Strahlteiler geschickt, welcher zwei Teilstrahlen erzeugt, die eine feste Phasenbeziehung haben. Der Strahl wird gepulst, d.h. es ist jeweils nur ein Wellenpaket unterwegs, dessen räumliche Ausdehnung klein ist im Vergleich zur Länge des Faraday-Käfigs. Das Potential am Faraday-Käfig ist für die beiden Teilstrahlen unabhängig einstellbar und wird nur eingeschaltet wenn sich die Elektronen im Innern des Käfigs befinden, so dass sie zu keiner Zeit ein Feld spüren.

Z: Interferometer

Hinter den beiden Käfigen werden die beiden Teilstrahlen ψ_1 und ψ_2 wieder zusammgeführt und zur Interferenz gebracht. Die Zustandsfunktion der Überlagerung ist dann gegeben als

$$\psi = \psi_1^0 e^{-iS_1/\hbar} + \psi_2^0 e^{-iS_2/\hbar} \quad \text{mit } S_i = \int V_i(t) dt .$$

Die Indizes 1 und 2 beziehen sich auf die beiden unterschiedlichen Wege.

Offensichtlich enthält die resultierende Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$ einen Term $\psi_1^0 \psi_2^{0*} e^{-i(S_1-S_2)/\hbar}$, der von der Phasendifferenz der beiden Teilstrahlen und damit von der Differenz der zeitlich gemittelten Potentiale abhängt. Man findet somit einen physikalischen Effekt obwohl kein Elektron je einem elektrischen Feld ausgesetzt war. Dies ist ein erster Hinweis darauf, dass das Potential eine wirkliche physikalische Bedeutung hat.

Der Ausdruck S_1-S_2 kann auch als Schleifenintegral

$$S_1-S_2/\hbar = q \oint V(t) dt$$

geschrieben werden, wobei der Pfad beide Teilstrahlen umfaßt und das Potential jeweils am Ort des Wellenpakets genommen wird. Offenbar ist es dieses Schleifenintegral, welches die Änderung der beobachtbaren Größe ausmacht.

2.2.4. Vektorpotential

Damit dieses Resultat relativistisch invariant ist muß ein entsprechender Ausdruck auch für das Vektorpotential existieren. Bekanntlich gilt für die Lorentz-Transformation der Potentiale zwischen zwei Bezugssystemen, die sich mit der relativen Geschwindigkeit u in x -Richtung gegeneinander bewegen

$$A_{1x} = [A_{2x} + u(\phi_2/c^2)] \quad A_{1y} = A_{2y} \quad A_{1z} = A_{2z} \\ \phi_1/c^2 = [(\phi_2/c^2) + u/c^2 A_{2x}]$$

Der verallgemeinerte Ausdruck muß lauten

$$q \oint (V(t) dt - \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}) , \quad (\text{SI-Einheiten})$$

wobei der Pfad einen beliebigen geschlossenen Weg in Raum und Zeit umfassen kann.

Wir betrachten als einen weiteren Spezialfall einen geschlossenen Pfad bei fester Zeit t . Die Phasenverschiebung der Zustandsfunktion sollte dann

Z: geschlossener Pfad

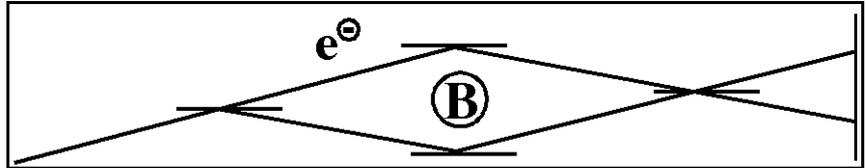
$$S/\hbar = -q \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}$$

betragen. Dabei gilt bekanntlich

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \int \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{n} = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{n} = \Phi,$$

d.h. das Schleifenintegral entspricht gerade dem eingeschlossenen magnetischen Fluß.

Dies entspricht einer experimentellen Situation, die häufig als Aharonov-Bohm Experiment bezeichnet wird. Ein geladenes Teilchen, z.B.



ein Elektron fliegt an einem Gebiet vorbei, das ein magnetisches Feld enthält. Das Gebiet des Elektronenstrahls selber ist jedoch feldfrei. Klassisch erwartet man somit, dass das Magnetfeld keinen Einfluß auf die Bewegung des Elektronenstrahls hat.

Der Hamiltonoperator für den Elektronenstrahl (ohne Spin) hat hierbei die Form

$$H = \frac{1}{2m} [\vec{p} - q\vec{A}]^2 = \frac{1}{2m} [\vec{p} + e\vec{A}]^2 .$$

In Regionen wo das Magnetfeld verschwindet ($\nabla \times \mathbf{A} = 0$) wirkt keine klassische Kraft auf die Elektronen, so dass ihre Bahn durch die Gegenwart des Vektorpotentials nicht beeinflusst wird. Sein Effekt beschränkt sich dann auf einen Phasenfaktor, den wir als

$$= \psi_0 e^{-iS/\hbar}$$

schreiben können, wobei ψ_0 die Lösung für $A = 0$ darstellt. Ableiten ergibt

$$S = e \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} .$$

Eine solche Zustandsfunktion ist im allgemeinen natürlich nicht einwertig; sie kann somit keine gültige Lösung für den gesamten Bereich darstellen. Allerdings können wir die Lösung auf beide Teilstrahlen einzeln anwenden und sehen dann, daß

$$\psi_1 = \psi_1^0 e^{-iS_1/\hbar} \quad \psi_2 = \psi_2^0 e^{-iS_2/\hbar} \quad \text{mit } S_i = e \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} .$$

Das Integral erfolgt entlang dem Pfad der beiden Teilstrahlen.

Damit erwarten wir in der Region in der sich die beiden Strahlen überlagern ein Interferenzmuster, welches von der Phasendifferenz

$$S_1 - S_2 = e \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} = e \Phi$$

abhängt. Φ stellt hier den magnetischen Fluss dar, der von den beiden Teilstrahlen eingeschlossen wird.

2.2.5. Experimentelle Verifikation

Eine experimentelle Bestätigung dieses Effekts wurde durch Chambers 1960 publiziert (R.G. Chambers, *'Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux'*, Phys. Rev. Lett. 5, 3-5 (1960).). Er modifizierte dafür ein Elektronenmikroskop.

Ein Elektronenstrahl wurde durch ein **Z: Experimenteller Aufbau** elektrostatisches Biprisma in zwei Teilstrahlen aufgetrennt und auf einem Schirm zur Interferenz gebracht. Der magnetische Fluß wurde im Schattenbereich des Biprismas durch eine dünne Eisennadel erzeugt. Diese enthält ca. 400 Flußquanten, welche im Eisen lokalisiert sind, so dass das Feld außerhalb klein blieb.

Ein kritischer Punkt bei diesem Experiment ist der Test **Z: Rückkehrfeld** ob der beobachtete Effekt aufgrund einer Wechselwirkung der Elektronen mit dem Magnetfeld zustande kommt oder über das Vektorpotential des eingeschlossenen Flusses. Da die Flußlinien geschlossen sein müssen ist das Feld in der Region des Elektronenstrahls nicht Null. Eine direkte Wechselwirkung mit dem Magnetfeld hat aber andere Konsequenzen.

Die Lorentzkraft im Magnetfeld führt wie im klassischen Fall zu einer Krümmung der Bahn der Elektronen. Der Punkt, an dem der Elektronenstrahl auf dem Schirm auftrifft ändert sich dadurch. Außerdem wird die Bahn der Elektronen dadurch länger, so dass sie mit einer anderen Phase auf dem Schirm auftreffen. **Z: gebogene Bahnen**

Eine detailliertere Rechnung (F.G. Werner and D.R. Brill, *'Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory in the interpretation of electron interferometer fringe observations'*, Phys. Rev. Lett. 4, 344-347 (1960).), wie auch entsprechende Experimente, zeigen, dass dies dazu führt, dass das Interferenzmuster verschoben wird, das Muster bezüglich der Einhüllenden aber dasselbe bleibt. **Z: Muster mit Einhüllender**

Chambers hat deshalb zunächst **F: Chambers Exp. mit Magnetfeld** den Effekt eines Magnetfeldes untersucht und tatsächlich diese Verschiebung gefunden.

Im Gegensatz dazu erzeugt die AB-Phase **F: Chambers AB Resultate** eine Verschiebung des Interferenzmusters gegenüber der Einhüllenden, da der klassische Weg der Elektronen nicht beeinflusst wird. Die Stärke des Flusses variiert über die Länge der Nadel, so dass die Verschiebung des Interferenzmusters an verschiedenen Stellen auf dem Schirm unterschiedlich ausfällt. Die Streifen erscheinen deshalb schräg. Da der Fluß in der Eisennadel nicht quantitativ gemessen werden konnte war allerdings nur ein qualitativer Test möglich.

Weitere Experimente: S. Wahsburn, H. Schmid, D. Kern, and R.A. Webb, *'Normal-metal Aharonov-Bohm effect in the presence of a transverse electric field'*, Phys. Rev. Lett. 59, 1791-1794 (1987).

2.2.6. Interpretation

Zunächst handelt es sich beim AB-Effekt lediglich um ein Interferenzphänomen.

Allerdings hatten wir bei der Diskussion des Neutroneninterferometers gesehen, daß die Interferenz zwischen den beiden Teilstrahlen dazu führen kann, dass die Intensität der beiden Strahlen am Ausgang zu-, resp. abnimmt. **Z: Interferometer**

Somit werden auch klassisch leicht messbare Größen vom AB-Effekt beeinflusst. **Z: Intensität ()**

Dass das Potential einen Effekt auf die Teilchen besitzt ist unter anderem deshalb unerwartet, weil es durch eine Eichtransformation in ein anderes Potential überführt werden kann. Allerdings ist die physikalisch bedeutsamen Größen nicht das Potential selber, sondern ein Schleifenintegral über das Potential. Dieses ist aber im Gegensatz zum Potential selber eichinvariant. Somit bleibt auch die Messgröße selber eichinvariant. Allerdings ist bei dieser Sichtweise eine Wirkung des magnetischen Flusses (der eichinvarianten Größe) vorhanden obwohl die geladenen Teilchen dieses Feld nie gespürt haben. In dieser Sichtweise ist die Wirkung des Feldes somit nichtlokal.

Prinzipiell ist es natürlich auch möglich, die Phase der beiden Teilstrahlen separat zu messen. Dabei müssen jedoch zwei getrennte Referenzen verwendet werden. Ein echter Vergleich der beiden Phasenmessungen ist erst möglich wenn auch die beiden Referenzen verglichen werden. Damit erhält man wieder eine geschlossene Kurve. Die Invarianz unter Eichtransformationen des Vektorpotentials bleibt erhalten, da bei jeder Transformation auch die Zustände angepasst werden müssen (W.E. Lamb, R.R. Schlicher, and M.O. Scully, *'Matter-field interaction in atomic physics and quantum optics'*, Phys. Rev. A 36, 2763-2772 (1987).). **Z: getrennte Phasenmessung**

Die entscheidende Bedeutung des Schleifenintegrals ist hier übrigens ähnlich wie beim Zwillingsparadox, wo der Altersunterschied durch das Schleifenintegral

$$t = \text{ods}/c$$

gegeben ist (R. Chiao, *'Berry's phase in optics; Aharonov-Bohm-like effects and gauge structures in surprising contexts'*, preprint , 1 (1988).).

2.2.7. Aharonov - Casher Effekt

In vielen physikalischen Systemen besteht eine Symmetrie zwischen elektrischen und magnetischen Effekten. Dies gilt auch für den Aharonov-Bohm Effekt.

Bisher hatten wir den Fall diskutiert wo ein elektrischer Monopol eine Region mit einem Magnetfeld umkreist. Wenn wir uns auf ein zweidimensionales System beschränken entspricht dies der Bewegung eines elektrischen Monopols um einen magnetischen Dipol. **Z: Ruhesystem Magnetfeld**

Wenn wir den gleichen **Z. Ruhesystem elektrischer Monopol** Vorgang im Ruhesystem des elektrischen Monopols betrachten so finden wir, dass ein magnetischer Dipol sich um eine elektrische Ladung bewegt. In drei Dimensionen würde dies der Umkreisung eines elektrisch geladenen Drahts entsprechen. Wiederum würde man klassisch keine Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Dipol und dem elektrisch geladenen Draht erwarten. Allerdings sieht dies etwas anders aus wenn wir die Bewegung mit berücksichtigen.

Wir diskutieren zunächst den Fall, dass der Dipol μ mit sich mit der Geschwindigkeit v um die linienförmige Ladungsverteilung bewegt.

Aufgrund der Bewegung des Teilchens besitzt das **Z: Bewegung, Felder** elektromagnetische Feld der Linienladung im Ruhesystem des Teilchens eine magnetische Komponente. Allgemein gilt für die Transformation der Felder mit

$$\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}, \quad \beta = v/c,$$

$$E' = \gamma (E + v \times B) - \gamma^2 \beta (\beta \cdot E),$$

$$B' = \gamma (B - 1/c \times E) - \gamma^2 \beta (\beta \cdot B).$$

Wir beschränken uns auf den Grenzfall niedriger Geschwindigkeiten ($\beta \ll 1$). Im Laborsystem gilt an der Stelle des magnetischen Dipols $B=0$. Damit wird die magnetische Komponente im Ruhesystem des magnetischen Dipols

$$B' = - 1/c^2 v \times E.$$

Die potentielle Energie wird durch die resultierende Zeeman-Wechselwirkung verschoben um

$$E_{\text{mag}} = - \mu \cdot B' = 1/c^2 \mu \cdot (v \times E) = 1/c^2 (v E \mu) = 1/c^2 v \cdot (E \times \mu).$$

Wenn sich das Teilchen um die Ladung bewegt ändert sich somit die Phase des Teilchens um den zusätzlichen Betrag

$$e^{-iE_{\text{mag}}/\hbar} = e^{-i \int_{AC} v \cdot (E(t) \times \mu) dt} = e^{-i \int_{AC} \frac{1}{\hbar c^2} ds \cdot (E(s) \times \mu)}.$$

Die Phase hängt damit nicht von der Geschwindigkeit des Teilchens ab. Auch die Geometrie des Pfades spielt keine Rolle, lediglich die eingeschlossene Ladungsdichte. Dieser Effekt wurde von Aharonov und Casher vorausgesagt (Y. Aharonov and A. Casher, *Topological quantum effects for neutral particles*, Phys. Rev. Lett. 53, 319-321 (1984).) und wird deshalb als Aharonov-Casher Effekt bezeichnet.

Eine experimentelle Verifikation dieser Voraussage wird sinnvollerweise mit ungeladenen Teilchen durchgeführt, so dass der Coulomb-Effekt des elektrischen Feldes keinen Einfluß hat. Ein experimentell relativ leicht zugängliches Teilchen, welches neutral ist aber ein magnetisches Moment besitzt, ist das Neutron. Erste Experimente zum Nachweis des Aharonov-Casher Effekts wurden deshalb mit Neutronen in einem Interferometer durchgeführt (A. Cimmino, G.I. Opat, A.G. Klein, H. Kaiser, S.A. Werner, M. Arif, and R. Clothier, 'Observation of the topological aharonov-casher phase shift by neutron interferometry', Phys. Rev. Lett. 63, 380-383 (1989).). Allerdings sind für die Beobachtung des Effektes extrem hohe elektrische Ladungsdichten erforderlich, so dass die experimentellen Resultate mit einem großen Fehler behaftet waren.

Neben dem Neutron gibt es viele elektrisch neutrale Atome, die auch ein magnetisches Dipolmoment aufweisen.

K. Zeiske, G. Zinner, F. Riehle, and J. Helmcke, 'Aharonov-Casher-Phase im Atominterferometer gemessen', Phys. Bl. 51, 1188-1189 (1995).

K. Zeiske, G. Zinner, F. Riehle, and J. Helmcke, 'Atom interferometry in a static electric field: measurement of the Aharonov-Casher phase', Appl. Phys. B 60, 205-209 (1995).

A. Görlitz, B. Schuh, and A. Weis, 'Measurement of the Aharonov-Casher phase of aligned Rb atoms', Phys. Rev. A 51, R4305-4308 (1995).

2.2.8. Varianten des AC Effekts

Die AC-Phase hängt vom Pfadintegral des Vektorprodukts $\mu \times E$ ab.

Anstelle des von AC diskutierten geschlossenen Pfades um den Draht kann der Effekte der Phasenverschiebung relativ einfach gemessen werden indem man nicht ein Atom um den Draht herumführt, sondern zwei identische Kopien auf beiden Seiten des Drahtes vorbei führt und sie dahinter zur Interferenz bringt. Eine Phasenverschiebung führt dann zu einer Verschiebung der Interferenzstreifen.

Z Interferometer

Da lediglich das Pfadintegral von $\mu \times E$ eine Rolle spielt kann man anstelle eines Weges um einen Draht auch die beiden Kopien parallel laufen lassen, sofern das E-Feld für die beiden in entgegengesetzte Richtung zeigt. Das Feld kann aber auch parallel sein, sofern dafür die Richtung des magnetischen Moments umgedreht wird. Da die beiden Kopien entgegengesetzte Phasen akkumulieren wird die Differenzphase gerade gleich dem Doppelten der einzelnen Phasenbeiträge sein. Eine räumliche Trennung ist bei diesem Experiment offenbar nicht mehr essentiell. Die Superposition der beiden Spinzustände entspricht damit direkt einem Zustand mit Spinrichtung senkrecht zu der bisher diskutierten Achse.

Z / F: Varianten

Eine Version dieses Experiments wurde deshalb durchgeführt indem ein spin-polarisierter Atomstrahl durch das Feld eines Plattenkondensators geschickt wurde. Wir wählen als z-Achse die Normale zur Ebene in der der Atomstrahl und das E - Feld liegen. Die Richtung des Atom-

F: Exp. Helmcke

strahls sei die y-Achse und das elektrische Feld liege entlang der x-Achse. Der magnetische Dipol soll durch einen Spin 1/2 gegeben sein, welcher sich in einem Superpositionszustand befindet:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle).$$

Dies entspricht einem Dipol, der gerade parallel zum E-Feld orientiert ist.

Da der Zustand $|+\rangle$ einem Dipol in z-Richtung entspricht führt eine Bewegung in y-Richtung zu einer AC-Phase

$$\Delta\phi_{AC} = \frac{1}{2} \mu \times E \cdot ds = \frac{1}{2} \mu E l,$$

wobei μ die Kopplungskonstante des magnetischen Dipols beschreibt, E die elektrische Feldstärke (welche als homogen angenommen wird) und l die Länge der Strecke a-b. Der Faktor $\frac{1}{2}$ steht für den Spin, skaliert also die Stärke der Wechselwirkung.

Für den Zustand $|-\rangle$ erhält man die inverse Phase, so dass der Zustand nach der Strecke l die Form

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle e^{i\Delta\phi_{AC}} + |-\rangle e^{-i\Delta\phi_{AC}})$$

erhält. Dieser Zustand ist gegenüber dem Ausgangszustand um den Winkel $2\Delta\phi_{AC}$ in Ausbreitungsrichtung gedreht.

Diese Präzession ist eine Möglichkeit, den AC-Effekt experimentell zu untersuchen. Es muß dabei allerdings beachtet werden, dass das elektrische Feld auch über den Stark-Effekt zu einer Verschiebung der Energieniveaus führt und damit zu einer Präzessionsbewegung des Spins. Die beiden Effekte können aber aufgrund ihrer unterschiedlichen Abhängigkeit von der Stärke des E-Feldes separiert werden: Der Stark-Effekt variiert quadratisch mit dem E-Feld; eine Inversion ändert somit daran nichts. Der AC-Effekt dagegen ist linear und ändert damit sein Vorzeichen. Wird die Differenz der Phasenverschiebung zwischen Experimenten mit umgekehrtem Vorzeichen des E-Feldes gemessen wird somit die Abhängigkeit vom Stark-Effekt eliminiert.

F: Exp. Resultate

Anstelle dieses einfachen Spin-Rotationsexperimentes ist es auch möglich, Atominterferometer zu bauen, in denen die Phase interferometrisch bestimmt wird. (K. Zeiske, G. Zinner, F. Riehle, and J. Helmcke, 'Aharonov-Casher-Phase im Atominterferometer gemessen', Phys. Bl. 51, 1188-1189 (1995); Zeiske et al, Appl. Phys. B, 60, 205 (1995).).

2.3 Der 'molekulare' Aharonov-Bohm Effekt

2.3.1. Der Jahn-Teller Effekt

Ähnliche Effekte wie der Aharonov-Bohm Effekt treten auch in Molekülen auf; man spricht dann vom "molekularen Aharonov-Bohm Effekt". Voraussetzung ist, dass die Moleküle eine Jahn-Teller Verzerrung zeigen.

Jahn und Teller zeigten 1937, dass Moleküle mit mehr als 2 Atomen keinen entarteten Grundzustand haben können. Ist der Grundzustand aus Symmetriegründen entartet, so erreicht das Molekül einen nicht entarteten Grundzustand indem es sich verzerrt und einen Zustand mit geringerer Symmetrie annimmt.

Z: entartete Grundzustände

Als Beispiel betrachten wir ein Molekül aus drei identischen Atomen (z.B. H_3 , Na_3). Die Gruppentheorie sagt, dass in diesem Fall das niedrigste Einelektronen Orbital A-Symmetrie aufweist und damit nicht entartet ist, während das zweite und dritte E-Symmetrie aufweisen und damit entartet sind.

Z: C3-Symmetrie

Wenn jedes dieser drei Atome ein Valenzelektron besitzt, müssen insgesamt drei Spinorbitale besetzt werden. Falls die Elektron-Elektron Wechselwirkung klein ist werden somit zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin das niedrigste Orbital besetzen, während das dritte in eines der beiden höher liegende Orbital gehen kann, wobei die beiden Möglichkeiten energetisch äquivalent sind.

Z: Orbitale

Offensichtlich kann die Energie für das dritte Elektron erniedrigt werden wenn eine Wechselwirkung die beiden E-Zustände koppelt. Wie aus der Störungstheorie bekannt führt dies in erster Ordnung dazu dass ein Orbital erniedrigt, das andere angehoben wird. Da nur eines von beiden besetzt wird führt dies zu einer Absenkung der Gesamtenergie. Aus der Gruppentheorie ist klar, dass eine Wechselwirkung mit C_3 Symmetrie die beiden E-Zustände nicht koppelt. Somit muss das Molekül eine Geometrie niedrigerer Symmetrie einnehmen um diese Aufspaltung zu bewirken. Das gleiche gilt natürlich auch für Moleküle in einem sehr allgemeinen Sinn, also z.B. auch für die Struktur von Festkörpern, oder für Streuexperimente wie z.B. die Reaktion $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$.

Z: Aufspaltung

Als ein Beispiel für ein solches Molekül betrachten wir das Na_3 Molekül. Die drei Na-Atome definieren eine Ebene. Der symmetrische Zustand mit drei identischen Bindungslängen ist gemäß Jahn-Teller Theorem nicht stabil.

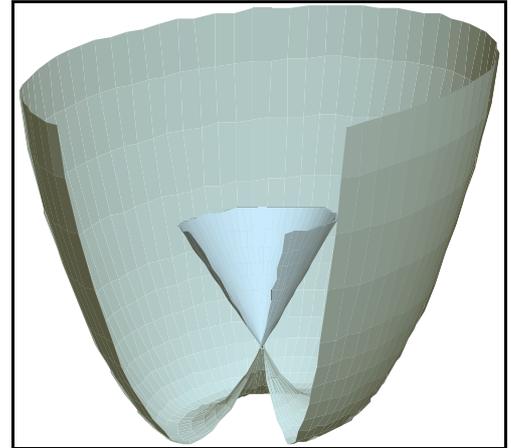
Z: Na_3 Molekül

Eine Abweichung von dieser Struktur in beliebiger Richtung führt zu einer Aufspaltung der Energien der Grundzustände. Bei einem stabilen Molekül muß die Energie als Funktion der Verzerrung ein Minimum besitzen. Aufgrund der Symmetrie des Moleküls ist außerdem klar, dass eine Konfigurati-

Z: Strukturvariation / Energievariation

on mit identischer Energie auch dann erreicht wird, wenn das Molekül um 120 Grad gedreht ist.

Ein Schnitt durch die Energiefläche zeigt demnach, dass die Energie eines Zustandes in etwa einer Parabel entspricht, wobei das Minimum vom Nullpunkt weg verschoben wurde. Im Ursprung schneiden sich die beiden Energieflächen in einem sogenannten "diabolischen" Punkt oder einer konischen Schnitt. Der energetisch günstigste Punkt liegt nicht beim Punkt mit der höchsten Symmetrie. Dadurch gibt es nicht nur einen Punkt niedrigster Energie, sondern drei (aufgrund der C_3 Symmetrie)



2.3.2. Modell

Ohne auf Details einzugehen kann man ein relativ einfaches Modell dieses molekularen Systems machen.

C.A. Mead and D.G. Truhlar, 'On the determination of Born-Oppenheimer nuclear motion wave functions including complications due to canonical intersections and identical nuclei', J. Chem. Phys. 70, 2284-2296 (1979).

Um das System in der Nähe des entarteten Punktes zu beschreiben betrachten wir zunächst einen Hamiltonoperator für ein System ohne Jahn-Teller Verzerrung. In der Born-Oppenheimer Näherung können wir für die Bewegung der Kerne den Hamiltonoperator

$$H_N = \frac{1}{2M} (p_x^2 + p_y^2) + M/2 \quad ^2 (x^2 + y^2)$$

schreiben. Hier sind x und y reduzierte Ortsvariablen, welche die Kernpositionen beschreiben, wobei der Ursprung des Koordinatensystems bei der symmetrischen Konfiguration liegt. Da wir ein planares Molekül diskutieren genügen zwei Variablen für die Beschreibung des Systems. p_x und p_y sind die entsprechenden Impulse und M die reduzierte Masse der Kerne. Das System stellt offenbar einen zweidimensionalen harmonischen Oszillator dar, was für jedes System mit zwei Freiheitsgraden in der Nähe des Minimums eine korrekte Beschreibung ist.

Bei den beiden Koordinaten x , y handelt es sich nicht um **F: Pseudorotation** Koordinaten eines einzelnen Kerns oder um Schwerpunktskoordinaten des Moleküls, sondern um effektive oder verallgemeinerte Koordinaten.

Die Jahn-Teller Verzerrung wird erzeugt durch einen Operator, welcher die Freiheitsgrade der Kerne und der Elektronen koppelt. Wir betrachten hier nur die beiden elektronischen Zustände mit E Symmetrie, welche ohne Jahn-Teller Verzerrung entartet sind. Da die Details dieser Zustandsfunktionen hier nicht interessieren

können wir sie hier als ein generisches Zweiniveausystem behandeln. Solche Systeme werden allgemein mit Hilfe von Pauli-Matrizen x , y , z beschrieben.

Da die Kopplung, welche die Jahn-Teller Verzerrung erzeugt, im Zentrum des Koordinatensystems aus Symmetriegründen verschwindet können wir sie in der unmittelbaren Umgebung linearisieren. Im einfachsten Fall erhält der Kopplungsoperator dann die Form

$$H_e(x, y) = (x \ x + y \ y) ,$$

wobei die Stärke der Kopplung parametrisiert. Der gesamte Hamiltonoperator ist damit

$$H = H_N + H_e(x, y) .$$

2.3.3. Energien

Wir verwenden zur Lösung die Born-Oppenheimer Näherung, d.h. wir vernachlässigen die kinetische Energie der Kerne. Der Hamiltonoperator wird dann

$$H = M/2 \ (x^2 + y^2) + (x \ x + y \ y) .$$

Dieser Ausdruck ist offenbar schon diagonal in den Kernpositionen. Da wir die elektronischen Freiheitsgrade lediglich als ein generisches Zweiniveausystem behandelt haben ist es außerdem relativ leicht, für jede Kernposition die elektronischen Eigenfunktionen zu bestimmen. Der formale Hamiltonoperator entspricht einem Spin 1/2, der an Magnetfelder der Stärke $x/2$, resp. $y/2$ gekoppelt ist (γ = gyromagnetisches Verhältnis). Dies entspricht einem effektiven Feld der Stärke

$$q/2 \quad \text{mit} \quad q = (x, y) , \quad |q| = \sqrt{x^2 + y^2}$$

in der xy Ebene.

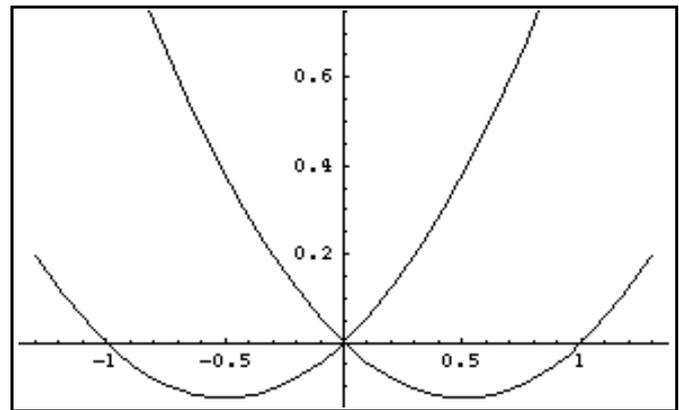
Die Eigenzustände sind demnach die beiden Spinzustände parallel, resp. antiparallel zum effektiven Feld.

$$\pm(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} \\ \pm e^{i\theta/2} \end{pmatrix} , \quad \theta = \tan^{-1}(y/x) .$$

Wie leicht durch Diagonalisieren des Hamiltonoperators nachgeprüft werden kann sind die entsprechenden Energien

$$E_{\pm} = \pm q/2 + M/2 \pm 2 q^2 .$$

Da die Energie der beiden Zustände linear mit dem Abstand vom Ursprung wächst wird dieser Schnitt zwischen den beiden Energieflächen als konischer Schnitt bezeichnet. Genau genommen handelt es sich aber nur um eine (rotationssymmetrische) Fläche, welche sich mit sich selber schneidet.



Während wir in diesem Fall davon ausgehen, dass eine Fläche sich mit sich selber schneidet sind auch Fälle möglich wo zwei unterschiedliche Flächen sich schneiden (G. Herzberg and H.C. Longuet-Higgins, *'Intersection of potential energy surfaces in polyatomic molecules'*, Discuss. Faraday Soc. 35, 77 (1963)). Dieses Beispiel stammt vom HNO Molekül.

Z: Herzberg Fig. 2

2.3.4. Pseudorotation

Wir betrachten nun eine Bewegung des Moleküls, welche im Parameterraum einer Rotation um die Entartung entspricht.

Diese Bewegung wird als Pseudorotation bezeichnet, da sie einerseits einer Rotation im Koordinatensystem entspricht, das Molekül aber nicht wirklich rotiert, d.h. sein Drehimpuls verschwindet.

F: Pseudorotation

Wir führen zusätzlich zu den bereits verwendeten Koordinaten x und y eine z-Koordinate ein. Diese hat keine physikalische Bedeutung, sondern wird uns als mathematisches Hilfsmittel dienen.

Z: Koordinatensystem

Wir bezeichnen die Eigenzustände an einer Stelle (x, y) des Parameterraums als (x, y) und (x, y) . Aufgrund der Symmetrie des Problems ist es offensichtlich, dass eine Rotation um die z-Achse daraus neue Eigenzustände erzeugen muß. Der Hamiltonoperator wird durch den Operator

$$U_z = e^{i \phi / 2}$$

um die z-Achse gedreht. Die Zustände werden demnach mit dem gleichen Operator gedreht und wir erhalten die gedrehten Eigenzustände (x', y') und (x', y') aus den ursprünglichen Zuständen durch Multiplikation mit einem Phasenfaktor

$$(x', y') = e^{i \phi / 2} (x, y) \text{ und } (x', y') = e^{-i \phi / 2} (x, y) .$$

Eine beliebige Zustandsfunktion, die um die z-Achse rotiert wird, hat somit in der Basis der Eigenzustände von z die oben diskutierte Form

$$\pm(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \\ \pm e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} .$$

Man kann jetzt die Frage stellen, was passiert wenn die Kernkoordinaten zeitabhängig sind (z.B. bei einer Molekülschwingung), so dass das Molekül sich einmal um den Koordinatenursprung dreht. Die Born-Oppenheimer Näherung geht davon aus, dass in einem solchen Fall der elektronische Zustand sich adiabatisch den geänderten Kernkoordinaten anpaßt. Eine direkte Auswertung der quantenmechanischen Bewegungsgleichungen mit der Normierung $E = 0$ erfordert dass die Änderung des Zustandes der Bedingung

$$\langle d | d \rangle = 0$$

gehört, wobei die Änderung d entlang des Pfades erfolgen soll, der durch die adiabatische Änderung der Eigenzustände erzwungen wird. Dies bedeutet dass die Änderung der Zustandsfunktion aufgrund der Bewegung senkrecht zur aktuellen Zustandsfunktion steht. Wir können leicht überprüfen, ob die obige Zustandsfunktion diese Bedingung erfüllt:

$$d | d \rangle = \begin{pmatrix} -i/2 e^{-i\varphi/2} \\ i/2 e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} .$$

Offenbar ist

$$\langle \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} | \begin{pmatrix} -i/2 e^{-i\varphi/2} \\ i/2 e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \rangle = -i/2 + i/2 = 0 ,$$

d.h. die verwendete Basis ist geeignet für die Beschreibung des adiabatischen Transports.

2.3.5. Eindeutigkeit

Wertet man dieses Resultate für eine vollständige Drehung aus ($\varphi = 2\pi$), so findet man aber, dass die Zustandsfunktion nicht wieder den Anfangswert einnimmt, da für einen Drehwinkel von $\varphi = 2\pi$ der Zustand noch mit $e^{i\varphi} = -1$ multipliziert wird. Offenbar ist die Funktion somit zweiwertig, was für die Lösung eines quantenmechanischen Problems natürlich nicht zulässig ist. Allerdings haben wir an dieser Stelle nur den elektronischen Teil der Zustandsfunktion diskutiert. Die Bedingung an die Einwertigkeit kann trotzdem erfüllt werden wenn der Kernanteil ebenfalls das Vorzeichen ändert. Dies bedeutet aber letztlich dass die Born-Oppenheimer Näherung nicht mehr gültig ist, da ja die Kerne von der Entartung der elektronischen Zustände nicht betroffen sein sollten.

Prinzipiell ist es möglich, eine andere Wahl für die Basiszustände zu treffen, so dass die Basiszustände einwertig werden. Im obigen Beispiel entspricht das z.B. den beiden Möglichkeiten

$$\begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i/2} \\ e^{i/2} \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \frac{1}{e^i} .$$

Offensichtlich unterscheiden sich die beiden Funktionen lediglich durch einen Phasenfaktor. Somit sind sie an jedem Ort Eigenfunktionen zum gleichen Eigenwert. Allerdings ist dieser Phasenfaktor abhängig vom Rotationswinkel - somit handelt es sich beim Übergang um eine nichtlokale Eichtransformation. Anders ausgedrückt entspricht der Übergang von der einen zur anderen Basis der Addition eines Vektorpotentials.

Eine genauere Betrachtung zeigt aber, dass die Form $\frac{1}{e^i}$ die Anforderung an einen adiabatischen Transport nicht erfüllt. Sie stellt somit zwar eine Basis dar, aber keine Lösung für die Zeitabhängigkeit des quantenmechanischen Zustandes. Es entspricht statt dessen der Lösung für ein hypothetisches geladenes System, das sich um eine einzelne magnetische Flusslinie bewegt, welche durch den Ursprung läuft. Der Effekt wird deshalb als molekularer Aharonov-Bohm Effekt bezeichnet.

Um dies zu untersuchen und das System formell auf eine bekanntes zurückzuführen erweitern wir es zunächst auf drei Dimensionen: Der Hamiltonoperator für das elektronische System hat dann die Form

$$H_e(x, y, z) = \left(x^2 + y^2 + z^2 \right)$$

erhalten. Hier stellt z einen Parameter dar, welcher eine Aufspaltung durch ein äußeres Feld beschreibt. Die Eigenzustände dieses Problems lassen sich schreiben als

$$| (R) \rangle = U(R) | \cdot \rangle$$

mit

$$U(R) = e^{-i(\cdot/2)} e^{-i(\cdot/2)} e^{i(\cdot/2)}$$

$$R = (x, y, z), \quad q = (x, y), \quad \theta = \tan^{-1}(y/x), \quad \phi = \tan^{-1}(q/z) .$$

Der zweidimensionale Fall ergibt sich als Spezialfall mit $z=0$.

2.3.6. Diskussion

Die Bewegung von Molekülen in der Nähe von konischen Schnittpunkten zeigt dass die Born-Oppenheimer Näherung für die Trennung der Kern- und Elektronenkoordinaten nicht allgemein möglich ist. Gleichzeitig zeigt sie eine Analogie zum Aharonov-Bohm Effekt indem es sich dabei um eine globale Eigenschaft handelt: Die Born-Oppenheimer Näherung kann lokal für jedes Gebiet gemacht werden, mit Ausnahme der unmittelbaren Umgebung des konischen Schnittpunktes. Auch wenn diese Region vom Molekül nie abgetastet wird führt dies doch dazu dass für eine Konsistente Beschreibung der Moleküldynamik dieser Schnittpunkt in Betracht gezogen werden

muss. Wie im Falle des Aharonov-Bohm Effektes ist die quantenmechanische Zustandsfunktion abhängig vom globalen Verhalten des Wechselwirkungsoperators.