# Fortgeschrittene Quantentheorie

Vorlesungsskript zum Modul P9a

# PROF. DR. JAN PLEFKA

# Quantenfeld- und Stringtheorie Institut für Physik



Version 2. Juni 2014

# Inhaltsverzeichnis

I. Bewegung im elektromagnetischen Feld		ıng im elektromagnetischen Feld 1
	I.1.	Klassische Mechanik eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld 1
	I.2.	Hamilton-Operator eines Teilchens im elektromagnetischen Feld
	I.3.	Konstantes Magnetfeld
	I.4.	Der normale Zeeman-Effekt
	Änderung der Wellenfunktion bei Eichtransformationen des elektromagnetischen	
		Feldes
	I.6.	Der Aharonov-Bohm-Effekt (1951)
	I.7.	Landau-Niveaus
II.	Der Sp	in und die Addition von Drehimpulsen
	II.1.	Der Spin $1/2$
	II.1a.	Der Produktraum
	II.2.	Räumliche Freiheitsgrade und Spin16
	II.3.	Das magnetische Moment
	II.4.	Die Pauli-Gleichung
	II.5.	Addition von Drehimpulsen    18
	II.6.	Addition von zwei $s = 1/2$ Operatoren
	II.7.	Allgemeiner Fall der Addition zweier Drehimpulse
III.	Näheru	ngsmethoden
	III.1.	Zeitunabhängige Störungstheorie
	III.2.	Variationsprinzip
	III.3.	Zeitabhängige Probleme: Dyson-Reihe
	III.4.	Dirac'sche oder zeitabhängige Störungstheorie
	III.5.	Übergänge erster Ordnung
	III.6.	Übergänge in ein kontinuierliches Spektrum
	III.7.	Periodische Übergänge
	III.8.	Quasiklassische N\u00e4herung
	III.9.	Die Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Methode
IV.	Quante	entheorie bei unvollständiger Information über den Systemzustand 47
	IV.1.	Phasenraumdichte in der klassischen statistischen Mechanik 47
	IV.2.	Quantentheorie eines gemischten Zustands48
	IV.3.	Der statistische Operator
	IV.4.	von-Neumann Gleichung
	IV.5.	Einige Spezielle statistische Operatoren
	IV.6.	Quantenrealität: Das EPR-Paradoxon    51
	IV.7.	Die Bell'sche Ungleichung
	IV.8.	Quanteninformation
V.	Relativ	istische Quantenmechanik
	V.1.	Elemente der speziellen Relativitätstheorie
	V.2.	Erste Versuche einer relativistischen Wellengleichung
	V.3.	Die Dirac-Gleichung (P.A.M. Dirac, 1928)
	V.4.	Der nichtrelativistische Grenzfall der Dirac-Gleichung

	V.5.	Lorentz-Kovarianz der Diracgleichung	'2
	V.6.	Lösungen der Dirac-Gleichung	8
	V.7.	Diracsches Löcher Bild	3
	V.8.	Relativistisches Teilchen $(s = 0)$ im Coulomb-Potential	35
VI.	Streuth	eorie	;9
	VI.1.	Lippmann-Schwinger-Gleichung	0
	VI.2.	Differentieller Wirkungsquerschnitt	3
	VI.3.	Born'sche Näherung	)5
	VI.4.	Die Born'sche Reihe	17
	VI.5.	Optisches Theorem	8
VII.	Nichtre	lativistische Vielteilchensysteme 10	)1
	VII.1.	Systemzusammensetzung und Austauschentartung	)1
	VII.2.	Permutationsoperatoren 10	)4
	VII.3.	Symmetrisierungs- und Antisymmetrisierungsoperator	)6
	VII.4.	Bosonen und Fermionen 10	)7
	VII.5.	Bosonen: Fock-Raum, Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren 10	9
	VII.6.	Fermionen: Fock-Raum, Erzeuger und Vernichter 11	4
	VII.7.	Feldoperatoren	.6
	VII.8.	Impulsdarstellung	20
	VII.9.	Anwendung I: Elektronengas (nicht und schwach wechselwirkend) 12	23
	VII.10.	Anwendung II: Schwach wechselwirkendes Bosegas	27

# Abbildungsverzeichnis

I.1.	Aufspaltung der Energieniveaus des H-Atoms in einem homegenen Magnetfeld. <b>Er-</b> wartung: Aufspaltung in ungerade Zahl von äquidistanten Niveaus.	4
I.2.	$\vec{B}$ verschwinde im Raumgebiet V	7
I.3.	Interferenzexperiment	8
I.4.	Magnetischer Fluss $\Phi_B$ im umschlossenen Gebiet	8
II.1.	Versuchsanordnung des Stern-Gerlach-Experimentes: Ein Silberstrahl durchmisst ein inhomogenes Magnetfeld	12
II.2.	Entartung der gemeinsamen Eigenzustände der Einzeldrehimpulsoperatoren bezüglich der z-Komponente des Gesamtdrehimpulses	23
II.3.	Schematische Darstellung der <i>m</i> -Eigenräume in der direkten Produktbasis der Ein- zeldrehimpulse	24
II.4.	Entwicklung der Gesamtdrehimpulsmultipletts mittels Anwendung des Gesamtdrehimpulsabsteigers	27
III.1.	Vertauschen der Reihenfolge der Integration ändert, bei Anpassung der Integrati- onsgrenzen, nichts am Wert des Integrals	34
III.2.	Übergang zwischen zwei Energieniveaus innerhalb eines kontinuierlichen Spektrums	38
III.3.	Beispiel für Funktion aus der Folge $\delta_t$	39
III.4.	Absorption und Emission von Photonen durch ein System (z.B. ein Atom)	40
III.5. III.6.	WKB-Näherung für eine Potentialmulde	43
	<i>E</i>	43
III.7.	Komplexe Integrationswege zum Übergang vom klassisch erlaubten in das klassisch verbotene Gebiet	44
III.8.	Zusammenfassung: WKB-Näherung	45
IV.1. IV.2.	Klassische Zustände	$47 \\ 55$
V.1. V.2.	Gedankenexperiment	64
V.3.	ist	81
<b>T</b> T 4	Energie kleiner ist als die Potentialstufe	82
V.4. V.5.	Ubergang eines Elektrons auf einen Zustand negativer Energie	84
Ve	See" ist exakt halb gefüllt.	84
v.o.	wird als Positron interpretiert, das angeregte Teilchen als Elektron	84
VI.1.	Pole des Integranden von (VI.12) und Integrationsweg zu Lösung durch Residuensatz	92

VI.2.	Für ein Potential endlicher Reichweite lässt sich eine Fernfeldnäherung durchführen.	92
VI.3.	Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung für örtlich begrenzte Potentiale ist eine	
	Linearkombinationen von einlaufender Planarwelle und auslaufender Kugelwelle	93
VI.4.	Der differentielle Wirkungsquerschnitt eines Streuprozesses ist definiert als $\frac{1}{N_{\star}} \frac{dN(\Omega)}{d\Omega}$	. 94
VI.5.	Erläuterung der neu eingeführten Variablen $q$ und $\theta$ .	97
VI.6.	$G_+(\vec{x}',\vec{x}'')$ : "Propagator"; propagiert Teilchen von $\vec{x}''$ nach $\vec{x}'$	98
VII.1.	Beispiele für Vielteilchensysteme	101
VII.2.	Aufspaltung der Entartung eines Zweiteilchengrundzustands durch Austauschwech-	
	selwirkung	103
VII.3.	Dynamik von quantenmechanischen Vielteilchensystemen gegenüber klassischen	107
VII.4.	Feynman-Diagramm zum Impulsaustausch. Der Gesamtimpuls bleibt erhalten!	121
VII.5.	Fermikugel eines Elektronengases	123
VII.6.	Erzeugung eines Lochs in der Fermikugel (dem Grundzustand)	124
VII.7.	Angeregter Zustand des Elektronengases, "Teilchen-Loch-Paar"	125

# I. Bewegung im elektromagnetischen Feld

## I.1. Klassische Mechanik eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld

Wiederholung: Hamiltonfunktion des Teilchens:

. .

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e \Phi(\vec{x}, t)$$
(I.1)

mit e: Ladung, m: Masse, c: Lichtgeschwindigkeit,  $\vec{A}(\vec{x}, t)$ : Vektorpotential,  $\Phi(\vec{x}, t)$ : skalares Potential

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \vec{\nabla} \Phi \qquad \text{elektrisches Feld} \\ \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \qquad \text{magnetisches Feld}$$

Bewegungsgleichung:

$$\dot{x}_{i} = \frac{\partial H}{\partial p_{i}} = \frac{1}{m} \left( p_{i} - \frac{e}{c} A_{i}(\vec{x}, t) \right) \quad \text{mit } m\dot{x}: \text{,kinetischer Impuls"}$$
$$\dot{p}_{i} = -\frac{\partial H}{\partial x_{i}} = -\frac{1}{m} \left( p_{j} - \frac{e}{c} A_{j}(\vec{x}, t) \right) \left( -\frac{e}{c} \frac{\partial A_{j}}{\partial x_{i}} \right) - e \frac{\partial \Phi}{\partial x_{i}}$$
$$= \frac{e}{c} \dot{x}_{j} \frac{\partial A_{j}}{\partial x_{i}} - e \frac{\partial \Phi}{\partial x_{i}} \tag{I.2}$$

Newtonsche Bewegungsgleichung:

$$\ddot{x}_{i} = \frac{1}{m} \left( \dot{p}_{i} - \frac{e}{c} \dot{A}_{i} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_{i}}{\partial x_{j}} \dot{x}_{j} \right)$$

$$= \frac{1}{m} \left[ \frac{e}{c} \dot{x}_{j} \underbrace{\left( \frac{\partial A_{j}}{\partial x_{i}} - \frac{\partial A_{i}}{\partial x_{j}} \right)}_{\epsilon_{ijk} B_{k}} + e \underbrace{\left( -\frac{1}{c} \frac{\partial A_{i}}{\partial t} - \frac{\partial \Phi}{\partial x_{i}} \right)}_{E_{i}} \right]$$
(I.3)

$$m\vec{\ddot{x}} = \underbrace{\underbrace{e}_{c}\vec{\dot{x}}\times\vec{B} + e\vec{E}}_{\text{Lorentzkraft}}$$
(I.4)

Eichtransformationen

 $\Rightarrow$ 

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda(\vec{x}, t)$$

$$\Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \partial_t \Lambda(\vec{x}, t)$$
(I.5)

Diese lassen  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$  und die Newtonschen Bewegungsgleichungen unverändert und ermöglichen die Wahl einer Eichung. Populär ist die Coulombeichung:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \tag{I.6}$$

= 0

#### Nebenbemerkung:

Auch nach der Fixierung der Coulombeichung sind weiterhin "residuelle" Eichtransformationen mit harmonischen Funkionen ( $\Lambda(\vec{x},t)$  mit  $\vec{\nabla}^2 \Lambda = 0$ ) möglich, da diese die Coulombeichung nicht verlassen.

$$\vec{A} \to A' = \vec{A} + \vec{\nabla}\lambda$$
 mit  $\vec{\nabla}^2\lambda$   
 $\Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{1}{c}\partial_t\lambda$ 

## I.2. Hamilton-Operator eines Teilchens im elektromagnetischen Feld

Gemäß dem Korrespondenzprinzip definieren wir nun den Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \left( \hat{\vec{x}}, t \right) \right)^2 + e \Phi \left( \hat{\vec{x}}, t \right)$$
(I.7)

### Nebenbemerkung:

 $\overline{\text{Quantisiert werden } x_i} \to \hat{x}_i \text{ und } p_i \to \hat{p}_i$ 

mit  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ 

Die elektromagnetischen Potentiale  $\vec{A}$  und  $\Phi$  werden nicht quantisiert. Dies geschieht erst im Rahmen der Quantenfeldtheorie (hier der Quantenelektrodynamik).

Die zeitabhängige Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung lautet dann:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{x},t) = \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x},t)\right)^2 + e\Phi(\vec{x},t)\right]\Psi(\vec{x},t)$$

Hier wurde noch keine Eichung gewählt! Ausmultiplizieren des quadratischen Terms unter Einführung der Coulombeichung ( $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ) liefert dann:

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi + \frac{i\hbar e}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\Psi + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2\Psi + e\Phi\Psi$$
(I.8)

Dies ist die Schrödingergleichung eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld.

## I.3. Konstantes Magnetfeld

Sei nun  $\vec{B} = \text{const.}$ , also z.B.  $\vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{x} \times \vec{B}).$ 

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})_i = \epsilon_{ijk} \partial_j A_k$$
  
=  $-\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \partial_j (\epsilon_{klm} x_l B_m)$   
=  $-\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} (\epsilon_{klm} \delta_{jl} B_m)$   
=  $-\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \epsilon_{kjm} B_m$   
=  $\frac{1}{2} \epsilon_{jki} \epsilon_{jkm} B_m$   
=  $\frac{1}{2} (\delta_{kk} \delta_{im} - \delta_{km} \delta_{ik}) B_m$   
=  $\frac{1}{2} (3B_i - B_i) = B_i$ 

Ist die Coulombeichung für  $\vec{A}=-\frac{1}{2}(\vec{x}\times\vec{B})$ erfüllt?

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \partial_i \left( -\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} x_j B_k \right)$$
$$= -\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \delta_{ij} B_k = 0$$

Terme in der Schrödingergleichung (I.8) für konstantes Magnetfeld auswerten

$$\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi = -\frac{1}{2} (\vec{x} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla} \Psi$$
$$= \frac{1}{2} (\vec{x} \times \vec{\nabla} \Psi) \cdot \vec{B}$$
$$= \frac{1}{2} \underbrace{(\vec{x} \times \vec{\nabla})}_{\frac{i}{\hbar} \hat{\vec{L}}} \cdot \vec{B} \Psi$$

Bahndrehimpuls!

$$\frac{i\hbar e}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi = -\frac{e}{2mc}\vec{L}\vec{B}$$
(I.9)

$$\vec{A}^2 \Psi = \frac{1}{4} (\vec{x} \times \vec{B}) (\vec{x} \times \vec{B}) \Psi$$
$$= \frac{1}{4} (\vec{x}^2 \vec{B}^2 - (\vec{x} \cdot \vec{B})^2) \Psi$$
$$\Rightarrow \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 \Psi = \frac{e^2}{8mc^2} B^2 (\vec{x}_\perp^2) \Psi \quad \text{mit } \vec{x}_\perp \cdot \vec{B} = 0$$
(I.10)

Das heißt, für konstantes Magnetfeld $\vec{B}=\vec{e}_z\cdot B$ lautet Gl. (I.8):

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi\underbrace{-\frac{eB}{2mc}\hat{L}_z}_{(1)}\Psi\underbrace{+\frac{e^2}{8mc^2}B^2(x^2+y^2)}_{(2)}\Psi + e\Phi\Psi \tag{I.11}$$

1) paramagnetischer Term

<sup>(2)</sup> diamagnetischer Term

 $\Rightarrow$ 

I. Bewegung im elektromagnetischen Feld



Abbildung I.1.: Aufspaltung der Energieniveaus des H-Atoms in einem homegenen Magnetfeld. **Er**wartung: Aufspaltung in ungerade Zahl von äquidistanten Niveaus.

Für schwache Magnetfelder und  $\langle \hat{L}_z \rangle \neq 0$ ist <br/> 0gegenüber 2 dominant und 2 kann damit vernachlässigt werden.

## I.4. Der normale Zeeman-Effekt

Wir betrachten ein H-Atom in einem konstanten Magnetfeld  $\vec{B} = \vec{e}_z B$ : Die Rotationssymmetrie (SO(3)-Symmetrie) des Systems ohne Feld wird nun aufgehoben.  $\Rightarrow$  Die Entartung im Spektrum bzgl.  $m_l$  wird aufgehoben.

$$\begin{split} \hat{H} &= \hat{H}_0 - \frac{eB}{2mc} \hat{L}_z \qquad \hat{H}_0: \text{Hamilton-Operator des H-Atoms ohne Feld} \\ \hat{H} |n, l, m_l \rangle &= (-\frac{R_y}{n^2} - \frac{e\hbar B}{2mc} m_l) |n, l, m_l \rangle \\ &\Rightarrow \boxed{E_{nlm_l} = -\frac{R_y}{n^2} + \hbar \omega_L m_l} \\ &\text{mit } \omega_L = -\frac{eB}{2mc} = \frac{e_0 B}{2mc} \qquad \text{,Larmorfrequenz''} \end{split}$$

 $\Rightarrow$  Aufspaltung von ganzzahligen *l*s in (2l + 1) Niveaus.

Erwartung: Aufspaltung in *ungerade* Zahl von äquidistanten Niveaus (siehe Abb. I.1). Tatsächlich beobachtet man beim H-Atom jedoch die Aufspaltung in eine gerade Zahl von Niveaus!  $\rightarrow$  Erzwingt die Einführung des Spins, dazu mehr in Kapitel II.

Definition I.4.1 (Magnetisches Moment).

$$\mu_i := \frac{\partial H}{\partial B_i}$$

Für paramagnetischen Anteil folgt:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc}\vec{L}$$
  $\frac{e}{2mc}$ : Bohrsches Magneton

Dieser wird um den Spin-Beitrag des Elektrons vervollständigt werden.

## I.5. Änderung der Wellenfunktion bei Eichtransformationen des elektromagnetischen Feldes

### Vorbemerkung:

Aus der Diskussion des klassischen Problems ist der *kinetische Impuls* bekannt. Er ergab sich aus der Ableitung der Hamiltonfunktion nach dem kanonischen Impuls:

$$m\dot{x}_i = m\frac{\partial H}{\partial p_i} = p_i - \frac{e}{c}A_i$$

Definition I.5.1 (Operator des kinetischen Impulses).

$$m\hat{\dot{x}}_i := \hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i(\hat{x}_i, t)$$

Aus den kanonischen Kommutatorrelationen

$$\begin{split} & [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \\ & [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \\ & [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \end{split}$$

folgt:

$$\begin{split} [\hat{x}_i, m\hat{x}_j] &= [\hat{x}_i, \hat{p}_j] - \frac{e}{c} \underbrace{[\hat{x}_i, A_j(\hat{x}, t)]}_{=0} \\ &= i\hbar\delta_{ij} \\ \Rightarrow [m\hat{x}_i, m\hat{x}_j] &= [\hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i, \hat{p}_j - \frac{e}{c}A_j] \\ &= [\hat{p}_i, -\frac{e}{c}A_j] + [-\frac{e}{c}A_i, \hat{p}_j] \\ &= \frac{e}{c} (i\hbar\partial_i A_j - A_j i\hbar\partial_i + A_i i\hbar\partial_j - i\hbar\partial_j A_i) \\ &= \frac{e}{c} i\hbar \big( (\partial_i A_j) - (\partial_j A_i) \big) \\ &= i\hbar \frac{e}{c} \epsilon_{ijk} B_k \end{split}$$

Die Komponenten des kinetischen Impulses vertauschen nicht miteinander! Der Kommutator hängt nicht von  $\vec{A}$  sondern nur von  $\vec{B}$ , ist also eichinvariant.

**Zurück zur Eingangsfrage** Die Schrödingergleichung (I.8) hängt von  $\vec{A}$  und  $\Phi$  ab, wohingegen die Lorentzkraft und somit die Newtonschen Bewegungsgleichungen nur von  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  abhängen.

Frage: Wie verändert sich die Wellenfunktion unter Eichtransformationen?

$$A \to A' + \nabla \lambda$$
$$\Phi \to \Phi' - \frac{1}{c} \partial_t \lambda$$

#### I. Bewegung im elektromagnetischen Feld

Die Schrödingergleichung ohne Wahl einer Eichung lautet

(I.8): 
$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2+e\Phi\right]\Psi=i\hbar\partial_t\Psi$$

Im transformierten System wird  $\Psi'$  die neue Wellenfunktion sein. Wie lautet der Zusammenhang  $\Psi \leftrightarrow \Psi'$ ? Die Eichtransformation wirkt nicht auf die Raum-Zeit-Koordinaten. Im transformierten System lautet die Schrödingergleichung:

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A'}\right)^2 + e\Phi'\right]\Psi' = i\hbar\partial_t\Psi'$$

$$\Rightarrow \qquad \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}-\frac{e}{c}(\vec{\nabla}\lambda)\right)^2 + e\Phi - \frac{e}{c}(\partial_t\lambda)\right]\Psi' = i\hbar\partial_t\Psi'(\vec{x},t)$$

$$\Rightarrow \qquad \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}-\frac{e}{c}(\vec{\nabla}\lambda)\right)^2 + e\Phi\right]\Psi' = i\hbar\partial_t\Psi' + \frac{e}{c}(\partial_t\lambda)\Psi' \qquad (I.12)$$

Wir schreiben nun:

$$\Psi'(\vec{x},t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda(\vec{x},t)\right) \cdot \varphi(\vec{x},t)$$
(I.13)

Dann wird die rechte Seite von (I.12)

$$i\hbar\partial_t\psi' + \frac{e}{c}(\partial\lambda)\psi' = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda(\vec{x},t)\right)i\hbar\partial_t\varphi(\vec{x},t)$$
(I.14)

und die gesamte Gleichung (I.12) lässt sich schreiben als:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda\right)\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}-\frac{e}{c}(\vec{\nabla}\lambda)\right)^2+e\Phi\right]\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda\right)\varphi(\vec{x},t)=i\hbar\partial_t\varphi(\vec{x},t) \tag{I.15}$$

Nun ist

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda\right)\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}(\vec{\nabla}\lambda)-\frac{e}{c}\vec{A}\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda\right) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}$$
(I.16)

und somit

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda\right)\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}(\vec{\nabla}\lambda)-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^{2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{e}{c}\lambda\right)=\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^{2}$$
(I.17)

Daraus sehen wir, dass (I.15) gerade die Form der Schrödingergleichung im ursprünglichen System annimmt:

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\Phi\right]\varphi(\vec{x},t) = i\hbar\partial_t\varphi(\vec{x},t) \tag{I.18}$$

Das heißt  $\varphi(\vec{x}, t)$  ist mit der Wellenfunktion des urspünglichen Systems zu identifizieren.

### Zusammenfassung:

Unter Eichtransformationen  $\vec{A} \to \vec{A'} = \vec{A} + \vec{\nabla}\lambda$ ,  $\Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{1}{c}\partial_t\lambda$  transformiert die Wellenfunktion wie folgt:

$$\Psi(\vec{x},t) \to \Psi'(\vec{x},t) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c}\lambda(\vec{x},t)}\Psi(\vec{x},t)$$
(I.19)

Die Schrödingergleichung ist forminvariant unter Eichtransformationen.



Abbildung I.2.:  $\vec{B}$  verschwinde im Raumgebiet V.

## I.6. Der Aharonov-Bohm-Effekt (1951)

Wir betrachten ein Elektron in einem statischen Magnetfeld  $\vec{B}(\vec{x})$ .  $\vec{B}$  verschwinde insbesondere im Raumgebiet V (siehe Abb. I.2).

Für  $\vec{x} \in V$  gilt dann

$$\begin{split} \vec{A}(\vec{x}) &= \vec{\nabla}\lambda(\vec{x}) \qquad \Rightarrow \ \vec{B} = \operatorname{rot}\vec{A} = 0 \\ \Rightarrow \lambda(\vec{x}) &= \int_{x_o}^x d\vec{s} \cdot \vec{A}(\vec{x}) \end{split}$$

Der Wert dieses Integrals ist unabhängig vom Pfad solange dieser voll in V liegt.

Frage: Wie lautet die Wellenfunktion in V? Schrödingergleichung:

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2 \Psi + e \Phi \Psi = i \hbar \partial_t \Psi$$

 $\vec{A}(\vec{x})$  lässt sich durch Umeichung eliminieren:

$$\vec{A'} = \vec{A} + \vec{\nabla}(-\lambda) = 0$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}\right)^2 \Psi' + e \Phi \Psi' = i \hbar \partial_t \Psi' \qquad (I.20)$$

$$\text{mit } \Psi'(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c}(-\lambda(\vec{x}))\right) \Psi(\vec{x}, t) \quad \text{aus (I.19)}$$

Wir wollen nun ein Interferenzexperiment wie in Abb. I.3 betrachten. *Frage:* Ist das Interferenzbild abhängig von  $\vec{B}$ ?

## Superpositionsprinzip

Weg 1: 
$$\Psi_{1,\vec{B}}(\vec{x}) = \Psi_{1,\vec{B}=0}(\vec{x}) \cdot \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{1}^{1} d\vec{s} \cdot \vec{A}\right)$$
  
Weg 2:  $\Psi_{2,\vec{B}}(\vec{x}) = \Psi_{2,\vec{B}=0}(\vec{x}) \cdot \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{2}^{1} d\vec{s} \cdot \vec{A}\right)$ 



Abbildung I.3.: Interferenzexperiment



Abbildung I.4.: Magnetischer Fluss $\Phi_B$ im umschlossenen Gebiet

Wobei $\Psi_{i,\vec{B}=0}$  die Wellenfunktionen bei ausgeschaltetem Magnetfeld bezeichnen. Sind beide Spalte geöffnet folgt:

$$\begin{split} \Psi_{\vec{B}}(\vec{x}) &= \Psi_{1,\vec{B}}(\vec{x}) + \Psi_{2,\vec{B}}(\vec{x}) \\ &= \left[ \Psi_{1,\vec{B}=0}(\vec{x}) \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \left(\int\limits_{1} d\vec{s} \vec{A} - \int\limits_{2} d\vec{s} \vec{A}\right)\right) + \Psi_{2,\vec{B}=0}(\vec{x}) \right] \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int\limits_{2} d\vec{s} \vec{A}\right) \end{split} \tag{I.21}$$

Nun ist (gemäß dem Satz von Stokes)

$$\int_{1} d\vec{s} \cdot \vec{A} - \int_{2} d\vec{s} \cdot \vec{A} = \oint_{C} d\vec{s} \cdot \vec{A}(\vec{s}) = \int d\vec{f} \cdot \operatorname{rot} \vec{A} = \Phi_{B}$$
(I.22)

mit  $\Phi_B$ : magnetischer Fluss des umschlossenen Gebietes (siehe Abb. I.4). Das heißt, die relative Phase zwischen  $\Psi_{1,\vec{B}}$  und  $\Psi_{2,\vec{B}}$  hängt von  $\Phi_B$  ab:

$$|\Psi_B(\vec{x})|^2 = \left|\Psi_{1,\vec{B}}(\vec{x}) \cdot \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\Phi_B\right) + \Psi_{2,\vec{B}}(\vec{x})\right|^2$$

Eine Änderung des eingeschlossenen magnetischen Flusses  $\Phi_B$  bewirkt eine Verschiebung des Interferenzbildes.

## Nebenbemerkung:

- Das Elektron läuft in diesem Sinne "gleichzeitig" entlang Weg 1 und 2.
- In der Quantentheorie ist das fundamentale Feld das Vektorpotential A. Allerdings hängen die Observablen nur von *eichinvarianten* Größen ab!
  - zum Beispiel $\Phi_B\to \Phi_B$ bei $\vec{A}\to \vec{A'}=\vec{A}+\vec{\nabla}\Lambda$  d<br/>a $\vec{B}\to \vec{B}$

## I.7. Landau-Niveaus

Wir gehen zurück zur Diskussion eines geladenen Teilchens im homogenen Magnetfeld  $\vec{B} = \vec{e}_z B =$  const. aus I.3. Der Hamiltonoperator lautet

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} - \frac{eB}{2mc} \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) + \frac{e^2B^2}{8mc^2} (\hat{x}^2 + \hat{y}^2)}_{\hat{H}_\perp} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}$$

Mithilfe des kinetischen Impulsoperators:

$$\hat{x}_i = \frac{1}{m} \left( \hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i(\hat{\vec{x}}) \right) \tag{I.23}$$

lässt sich  $\hat{H}_{\perp}$  schreiben als

$$\hat{H}_{\perp} = \frac{m}{2} (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2) \tag{I.24}$$

Nun ist (vergleiche I.5)  $[\hat{x}_1, \hat{x}_2] \neq 0$  sondern:

$$[\hat{x}_1, \hat{x}_2] = i\hbar \frac{eB}{c}$$

$$[\hat{x}_1, \hat{x}_1] = [\hat{x}_2, \hat{x}_2] = 0$$

$$(I.25)$$

bzw. mit $\hat{\pi}_i = \frac{m \hat{x}_i}{\sqrt{|e|B/c}}$ :

$$[\pi_2, \pi_1] = i\hbar$$

$$[\pi_1, \pi_1] = [\pi_2, \pi_2] = 0$$

$$\hat{H}_{\perp} = \frac{1}{2} \frac{|e|B}{mc} (\pi_1^2 + \pi_2^2)$$
(I.26)

Diagonalisierung wie bei harmonischen Oszillator. Wir führen ein:

$$\hat{a} = \frac{\pi_2 + i\pi_1}{\sqrt{2}\hbar}$$
$$\hat{H}_{\perp} = \hbar\omega_c (\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2})$$
(I.27)

 $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

## I. Bewegung im elektromagnetischen Feld

mit der Zyclotronfrequenz:  $\omega_c = \frac{|e|B}{mc}$ .

Energiespektrum: 
$$E_n = \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})$$

 $n = 0, 1, 2, \dots$  "Landau-Niveaus"

Noch zu konstruieren:

- Wellenfunktion
- Entartung?

 $\Rightarrow \ddot{\mathrm{U}}\mathrm{bung}$ 

# II. Der Spin und die Addition von Drehimpulsen

## II.1. Der Spin 1/2

**Anomaler Zeemann-Effekt und Stern-Gerlach Experiment** In I.4 hatten wir beim *normalen* Zeeman-Effekt gesehen, dass Elektronen durch ein konstantes Magnetfeld die Wechselwirkung

$$\hat{H}_{\rm INT} = -\frac{e}{2mc}\vec{B}\cdot\hat{\vec{L}} = -\hat{\vec{\mu}}_{\rm Bahn}\cdot\vec{B}$$
(II.1)

erfahren, wobei  $\hat{\vec{\mu}} = \frac{e}{2mc}\hat{\vec{L}}$  das magnetische Moment und  $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}}_{Bahn} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$  der Bahndrehimpulsoperator ist. Dieser Term führt zur Aufspaltung in (2l+1) Linien  $\leftrightarrow$  Drehimpulszustände  $|l, m_l\rangle$  mit  $m_l = -l, ..., l$ . Die Linien sind unabhängig von  $m_l$  separiert um  $\hbar\omega_L$ . Da l ganzzahlig ist, erfolgt eine Aufspaltung in eine **ungerade** Zahl von Zuständen.

Wir wollen nun die Versuchsanordnung des Stern-Gerlach-Experiments (Abb. II.1) betrachten. Kraft auf ein Ag-Atom:

$$\vec{K}=\vec{\nabla}(\vec{\mu}\cdot\vec{B})\approx\mu_z\frac{\partial B_z}{\partial z}\vec{e}_z$$

 $\rightarrow$  Führt zur Aufspaltung verschiedener  $\langle \hat{\mu}_z \rangle$  auf den Schirm. Silber hat ein Valenzelektron. Im  $|l = 0, m = 0\rangle$  Zustand (5s) erwarten wir **keine** Aufspaltung. Beobachtet werden aber *zwei* Linien. Im 5p Zustand  $|l = 1, m\rangle$  würde man drei Linien sehen.

**Erklärung:** Das Elektron besitzt einen inneren Drehimpuls, "Spin", der halbzahlige Werte annehmen kann. (Uhlenbeck und Goudsmit, Pauli (1925))

 $\Rightarrow$  Einführung eines Spin-Operators  $\hat{\vec{S}}$  dessen Komponenten nur die Eigenwerte  $\pm \frac{\hbar}{2}$  einnehmen können.

**Mathematische Beschreibung** Der Spin eines Teilchens ist nicht im Hilbertraum  $\mathcal{H}_{Bahn}$  der Bahnbewegung beschreibbar, der etwa durch die Ortseigenzustände  $|\vec{x}\rangle$  aufgespannt sei. Vielmehr muss ein Spin-Hilbertraum  $\mathcal{H}_{Spin}$ , aufgespannt durch die Spineigenzustände, hinzugenommen werden. Da die Spin-Operatoren mit den Operatoren der Bahnbewegung kommutieren, liegt ein direkter Produktraum für das Gesamtproblem vor:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Bahn} \otimes \mathcal{H}_{Spin} \tag{II.2}$$



Abbildung II.1.: Versuchsanordnung des Stern-Gerlach-Experimentes: Ein Silberstrahl durchmisst ein inhomogenes Magnetfeld

Der Spin  $\hat{\vec{S}}$  ist ein Drehimpulsoperator, die Komponenten  $\hat{S}_i$  erfüllen deshalb:

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k \Leftrightarrow \begin{cases} \left[\hat{S}_z, \hat{S}_{\pm}\right] = \pm\hbar\hat{S}_{\pm} \\ \left[\hat{S}_+, \hat{S}_-\right] = 2\hbar\hat{S}_z \end{cases}$$

Mit  $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm iS_y$ . Das Eigenwertproblem des Spin folgt aus dem gelösten Eigenwertproblem des Drehimpulses aus der Quantenmechanik I Vorlesung (QM I, V.3).

$$\begin{split} \vec{L} &\to \vec{S} \\ l &\to s = 1/2 \\ m &\to m = \pm 1/2 \\ l, m \rangle &\to |\pm\rangle \quad \text{oder auch} \quad \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \end{split}$$

Eigenwertgleichungen:

$$\begin{array}{ll} \hat{\vec{S}}^2 |\pm\rangle &= \frac{3}{4} \hbar^2 |\pm\rangle \\ \hat{S}_z |\pm\rangle &= \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \end{array}$$

Die Zustände  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  spannen den zweidimensionalen Hilbertraum  $\mathcal{H}_{s=1/2}$  auf.

#### Nebenbemerkung:

 $\overline{\mathcal{H}_{s=1/2}}$  ist zweidimensional, obwohl  $\vec{S}$  dreidimensionaler Vektor ist.

Für beliebigen Zustandsvektor  $|\varphi\rangle\in\mathcal{H}_{s=^{1/2}}$  gilt:

$$|\varphi\rangle = \alpha_{+}|+\rangle + \alpha_{-}|-\rangle, \quad \alpha_{\pm} \in C$$

mit  $\alpha_+ = \langle +|\varphi\rangle, \, \alpha_- = \langle -|\varphi\rangle; \, "S_z$ -Darstellung"

und  $|\alpha_{+}|^{2} + |\alpha_{-}|^{2} = 1$ . Die **Wahrscheinlichkeit** im Zustand  $|\varphi\rangle$  bei einer  $S_{z}$ -Messung die Werte  $\pm \hbar/2$  zu finden ist  $W_{\pm} = |\alpha_{\pm}|^{2}$ .

Wirkung von  $|\mp\rangle$  auf  $\hat{S}_{\pm}$ :

$$\begin{aligned}
\hat{S}_{+}|+\rangle &= 0 \qquad \hat{S}_{+}|-\rangle &= \hbar|+\rangle \\
\hat{S}_{-}|+\rangle &= \hbar|-\rangle \qquad \hat{S}_{-}|-\rangle &= 0
\end{aligned}$$
(II.3)

Die Matrixelemente des Spinoperators in der  $S_z$ -Darstellung  $(m, m' = \{+, -\})$  lauten:

$$\langle m|\hat{S}_{z}|m'\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \langle m|\hat{S}^{2}|m'\rangle = \frac{3}{4}\hbar^{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\langle m|\hat{S}_{+}|m'\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \langle m|\hat{S}_{-}|m'\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0\\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle m|\hat{S}_{x}|m'\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \langle m|\hat{S}_{y}|m'\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$(II.4)$$

## Einführung der Pauli-Spinmatrizen $\vec{\sigma}$ :

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$$
(II.5)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(II.6)

## Eigenschaften

i) 
$$(\sigma_x) = \det(\sigma_y) = \det(\sigma_z) = -1$$
 (II.7)

ii) 
$$\operatorname{Tr}(\sigma_x) = \operatorname{Tr}(\sigma_y) = \operatorname{Tr}(\sigma_z) = 0$$
 (II.8)

iii) 
$$\sigma_i^{\dagger} = \sigma_i$$
 (II.9)  
iv)  $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$  "magische Identität" (II.10)

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad \text{,magische Identität"} \tag{II.10}$$

Insbesondere impliziert iv):

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{1}$$
(II.11)

bzw.

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z, \quad \{\sigma_x, \sigma_y\} = 0, \quad \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1} \\ \text{und zyklisch} & \text{und zyklisch} \end{aligned}$$
 (II.12)

**Beweis:** 

$$\begin{split} [\sigma_i, \sigma_j] &= \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i \\ \stackrel{\mathrm{iv})}{=} \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k - \delta_{ji} - i \epsilon_{jik} \sigma_k \\ &= 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k \\ \{\sigma_i, \sigma_j\} &= \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i \\ \stackrel{\mathrm{iv})}{=} \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ji} + i \epsilon_{jik} \sigma_k \\ &= 2\delta_{ij} \end{split}$$

**Spinoren** Der allgemeine Zustand  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_{s=1/2}, |\varphi\rangle = \alpha_+|+\rangle + \alpha_-|-\rangle$  lässt sich auch als zweispaltiger Zahlenvektor darstellen:

$$\varphi = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle + | \varphi \rangle \\ \langle - | \varphi \rangle \end{pmatrix}$$
(II.13)

 $\begin{pmatrix} \alpha_+\\ \alpha_- \end{pmatrix}$  wird als *Spinor* bezeichnet. Die Basisspinoren die den Zuständen  $|+\rangle$  und  $|-\rangle$  entsprechen lauten:

$$\varphi_{+} = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_{-} = \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}$$
 (II.14)

## II.1a. Der Produktraum

(Ergänzung zur Vorlesung) In vielen physikalischen Problemen besteht das betrachtete System aus zusammengesetzten Teilsystemen zwischen denen auch Wechselwirkungen bestehen können.

$\Sigma_1$ $\Sigma_2$ $\Sigma$	$\mathbb{E}_3$
--------------------------------	----------------

Jedem System  $\Sigma_i$  ist ein eigener Hilbertraum  $\mathcal{H}_i$  zugeordnet. Die Beschreibung des Gesamtsystems erfolgt im *Produktraum* 

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2\otimes\mathcal{H}_3\otimes\cdots$$

#### ⊗: Tensorprodukt

*Beispiel:* Teilchen mit Spin:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{Bahn} \otimes \mathcal{H}_{Spin}$ . Im Prinzip kennen wir diese Situation bereits: Teilchen in einer Dimension:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x$ , Teilchen in drei Dimensionen:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$ 

i) Vektoren des Produktraums

Sei  $|\varphi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$  und  $|\varphi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$  dann forme das Produkt

$$|\varphi_1\varphi_2\rangle = |\varphi_1\rangle|\varphi_2\rangle = |\varphi_2\rangle|\varphi_1\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

### Eigenschaften:

- Distributivität: Sei  $|\varphi_1\rangle = \alpha |u_1\rangle + \beta |v_1\rangle \in \mathcal{H}_1$  (mit  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ,  $|u_1\rangle, |v_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ ). Dann ist  $|\varphi_1\varphi_2\rangle = \alpha |u_1\varphi_2\rangle + \beta |v_1\varphi_2\rangle$ . Ebenso für Vektoren in  $\mathcal{H}_2$ .
- Skalarprodukt: Für  $\{|\varphi_1\varphi_2\rangle, |\chi_1\chi_2\rangle\} \in \mathcal{H}$

Definiere:

 $\langle \varphi_1 \varphi_2 | \chi_1 \chi_2 \rangle := \langle \varphi_1 | \chi_1 \rangle \langle \varphi_2 | \chi_2 \rangle$ 

• Basis: Ist  $|l^1\rangle$   $(l \in I)$  Orthonormalbasis von  $\mathcal{H}_1$  und  $|k^2\rangle$   $(k \in I')$  Orthonormalbasis von  $\mathcal{H}_2$  so ist  $|l^1, k^2\rangle$  Orthonormalbasis von  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Die Indexpaare (l, k) nummerieren nun die Basisvektoren.

 $\Rightarrow \dim \mathcal{H} = (\dim \mathcal{H}_1) \cdot (\dim \mathcal{H}_2)$ 

 $|l^{1},k^{2}\rangle \text{ ist Orthonormalbasis da } \langle l^{1}k^{2}|\tilde{l}^{1}\tilde{k}^{2}\rangle = \delta(l,\tilde{l})\delta(k,\tilde{k}) \text{ mit } \delta(l,\tilde{l}) = \begin{cases} \delta_{l\tilde{l}} & \text{diskret} \\ \delta(l-\tilde{l}) & \text{kontinuierlich} \end{cases}$ 

• Zerlegung der 1 in  $\mathcal{H}$ :

$$\mathbb{1} = \sum_{l} \sum_{k} |l^1 k^2 \rangle \langle l^1 k^2| \qquad (\text{II.15})$$

Ein beliebiger Vektor $|\varphi\rangle\in\mathcal{H}$  (der nicht die Struktur $|a^1b^2\rangle$ besitzen muss!) hat also die Zerlegung

$$|\varphi\rangle = \sum_{k} \sum_{l} l^{1} k^{2} \langle \varphi(l,k)$$
 (II.16)

mit  $\varphi(l,k)=\langle l^1k^2|\varphi\rangle$ Funktion beider Variablen <br/> kund l.Ist $|\varphi\rangle$ speziell Tensor<br/>produkt $|\varphi_1\varphi_2\rangle$ gilt

$$\varphi(l,k) = \langle l^1 k^2 | \varphi_1 \varphi_2 \rangle = \langle l | \varphi_1 \rangle \langle k | \varphi_2 \rangle = \varphi_1(l) \cdot \varphi_2(k)$$
(II.17)

Die Verallgemeinerung zu höheren Produkträumen  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \cdots$  ist offenkundig.

### ii) Operatoren im Produktraum

Für einen Operator  $\hat{O}$  in  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  ergeben sich die Matrixelemente

$$O(l,k;l',k') = \langle l^1,k^2 | \hat{O} | l'^1,k'^2 \rangle$$

Für die durch den Operator  $\hat{O}$  vermittelte Abbildung

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\hat{O}\varphi\rangle = \hat{O}|\varphi\rangle$$

ergibt sich in Komponenten:

$$\varphi(l,k) \rightarrow (\hat{O}\varphi)(l,k) = \sum_{l'} \sum_{k'} O(l,k;l',k') \varphi(l',k')$$

• Ein Operator  $\hat{O}_1$ , der zunächst nur in  $\mathcal{H}_1$  definiert ist:

$$\hat{O}_1 |\varphi_1\rangle = |\chi_1\rangle$$

soll im Produktraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  die Wirkung

$$\hat{O}_1|\varphi_1\varphi_2\rangle = |\chi_1\varphi_2\rangle$$

besitzen. Man schreibt für  $\hat{O}_1$  wenn er auf  $\mathcal{H}$  angewandt wird auch  $\begin{vmatrix} \hat{O}_1 \otimes \mathbb{1} \end{vmatrix}$ . Er wirkt wie  $\mathbb{1}$  auf  $\mathcal{H}_2$ . Entsprechend  $\hat{O}_2 |\varphi_2\rangle = |\chi_2\rangle \Rightarrow \hat{O}_2 |\varphi_1 \varphi_2\rangle = |\varphi_1 \chi_2\rangle$  (eigentlich  $\mathbb{1} \otimes \hat{O}_2$ ).

• Für die Matrixelemente von  $\hat{O}_1$  und  $\hat{O}_2$  in  $\mathcal{H}$  gilt:

$$O_1(l,k;l',k') = O_1(l,l')\delta(k,k') \quad \Leftrightarrow \quad \hat{O}_1 \otimes \mathbb{1}$$
$$O_2(l,k;l',k') = \delta(l,l')O_2(k,k') \quad \Leftrightarrow \quad \mathbb{1} \otimes \hat{O}_2$$
(II.18)

• Es gilt:

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0 \tag{II.19}$$

Manifest in Produktsprache:

$$(\hat{O}_1 \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \hat{O}_2) = \hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2$$
$$(\mathbb{1} \otimes \hat{O}_2)(\hat{O}_1 \otimes \mathbb{1}) = \hat{O}_1 \otimes \hat{O}_2$$

## II.2. Räumliche Freiheitsgrade und Spin

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathrm{Bahn}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{Spin}}$$

Deshalb kommutieren Spinoperatoren mit Operatoren der Bahnbewegung:

$$\begin{split} [S_a, \hat{x}_b] &= 0\\ [\hat{S}_a, \hat{p}_b] &= 0\\ [\hat{S}_a, \hat{L}_b] &= 0\\ \forall a, b \in 1, 2, 3 \end{split} \tag{II.20}$$

⇒ Spin und Ort (oder Impuls oder Bahndrehimpuls) eines Teilchens lassen sich gleichzeitig beliebig scharf messen. Der Zustandsvektor eines Spin-1/2 Teilchens (z.B. Elektron) ist Element des Produktraumes:  $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_{Bahn} \otimes \mathcal{H}_{Spin}$  und hat demnach die allgemeine Form

$$|\psi\rangle = \int d^3x \left(\psi_+(\vec{x})|\vec{x}\rangle|+\rangle + \psi_-(\vec{x})|\vec{x}\rangle|-\rangle\right)$$
(II.21)

$$\langle \vec{x} | \psi \rangle = \psi_{+}(\vec{x}) | + \rangle + \psi_{-}(\vec{x}) | - \rangle$$

$$(\langle + |\langle \vec{x} | \rangle) | \psi \rangle = \psi_{+}(\vec{x})$$

$$(\langle - |\langle \vec{x} | \rangle) | \psi \rangle = \psi_{-}(\vec{x})$$

$$(II.22)$$

Weiterhin ist  $|\psi_+(\vec{x})|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte das Teilchen am Ort  $\vec{x}$  mit Spin in positiver z-Richtung zu finden. Entsprechend  $|\psi_-(\vec{x})|^2$ : Wahrscheinlichkeitsdichte für Messung am Ort  $\vec{x}$  und Spin in negativer z-Richtung.

## Normierungsbedingung:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d^3 \left( |\psi_+(\vec{x})|^2 + |\psi_-(\vec{x})|^2 \right) = 1$$

In der kombinierten Orts- und  $S_z$ -Darstellung schreibt man häufig:

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}) \\ \psi_-(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

#### Spinorwellenfunktion

## II.3. Das magnetische Moment

Wie in I.4 besprochen ist mit dem Bahndrehimpuls  $\hat{\vec{L}}$  eines Elektrons ein magnetisches Moment verbunden:

$$\hat{\vec{\mu}}_{\text{Bahn}} = \frac{e}{2mc}\hat{\vec{L}} \tag{II.23}$$

Ebenso führt der Spin zu einem magnetischen Moment

$$\hat{\vec{\mu}}_{\rm Spin} = g \frac{e}{2mc} \hat{\vec{S}}$$

### g: gyromagnetischer Faktor

## **Experiment:** $g = 2.002319... \approx 2$

Aus der Diracgleichung (der relativistische Quantentheorie des Elektrons) folgt g = 2.

Korrekturen lassen sich über die Quantenelektrodynamik bestimmen ( $\widehat{=}$  Wechselwirkung des Elektrons mit dem quantisierten elektromagnetischen Feld). Theorie und Experiment stimmen hier auf 7 Nachkommastellen überein!

$$g = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} - 0.3285\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^2 + 1.183\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^3 + \ldots\right)$$

Auch andere s = 1/2 elementare Teilchen besitzen ein magnetisches Moment.

Wir wollen in Zukunft aber mit g = 2 für das Elektron arbeiten.

## Gesamtes magnetisches Moment des Elektrons:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S})$$
$$= \frac{e}{2mc}(\vec{L} + \hbar\vec{\sigma})$$

Führt uns auf die Wechselwirkungsenergie

$$\hat{H}_{\rm INT} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = \mu_B \left(\frac{\hat{\vec{L}}}{\hbar} + \vec{\sigma}\right) \cdot \vec{B}$$

Definition II.3.1 (Bohr'sches Magneton).

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} \tag{II.24}$$

Damit lässt sich das magnetische Moment als Spinorraum-Operator wie folgt schreiben:

$$\vec{\mu} = \mu_B \left(\frac{\hat{L}_z}{\hbar} + \sigma_z\right) B = \mu_B \left(\frac{1}{\hbar} (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) \mathbb{1}_{2 \times 2} + \sigma_z) B$$
$$= \mu_B B \left(\frac{\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x}{\hbar} + 1 \quad 0 \\ 0 \quad \frac{\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x}{\hbar} - 1\right)$$
(II.25)

## II.4. Die Pauli-Gleichung

Der Hamilton-Operator eines Elektrons in äußerem konstanten Magnetfeld und beliebigem Potential lautet:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{x}) + \mu_B \left(\frac{\vec{L}}{\hbar} + \hat{\vec{\sigma}}\right) \cdot \vec{B}$$
(II.26)

#### Schrödingergleichung:

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle(t) = \hat{H}|\psi\rangle(t)$$
 (II.27)

Projection auf Spinortswellenfunction mittels  $\langle \vec{x} | \langle m |, m = \{+, -\}$ 

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x},t)\\ \psi_-(\vec{x},t) \end{pmatrix} = \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{x}) + \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{B} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla}) \right) \mathbb{1}_{2 \times 2} + \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \right] \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x},t)\\ \psi_-(\vec{x},t) \end{pmatrix}$$
(II.28)

Für ein allgemeines zeitunabhängiges äußeres elektromagnetisches Feld gilt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e \Phi(\vec{x}, t) + \mu_B \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B}$$
(II.29)

und

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x},t)\\ \psi_-(\vec{x},t) \end{pmatrix} = \left[ \left( \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x},t) \right)^2 + e\Phi(\vec{x},t) \right) \mathbb{1}_{2\times 2} + \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x},t)\\ \psi_-(\vec{x},t) \end{pmatrix} \right]$$
(II.30)

## Pauli-Gleichung

Die Pauli-Gleichung ist die nichtrelativistische Schrödingergleichung für Spin-1/2 Teilchen im elektromagnetischen Feld. Hierzu gibt es relativistische Korrekturen, die wir in Kapitel V besprechen werden.

## II.5. Addition von Drehimpulsen

Allgemeines: In physikalischen Systemen müssen oft zusammengesetzte Drehimpulse betrachtet werden: werden:

#### Einschub:

Wieso addieren wir die Drehimpulse? Physikalisch intuitiv klar, aber Herleitung möglich:

Systeme  $\Sigma_1$  und  $\Sigma_2$  mit  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  besitzen Rotationsoperatoren

$$U_1(\delta\vec{\varphi}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{J}_1}\right] \text{ und } U_2(\delta\vec{\varphi}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{J}_2}\right]$$

Eine Rotation im zusammengesetzten System mit Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  lautet dann

$$U(\delta \vec{\varphi}) = U_1(\delta \vec{\varphi}) \otimes U_2(\delta \vec{\varphi})$$

Der Drehimpulsoperator  $\hat{\vec{J}} \in \mathcal{H}$  des zusammengesetzten Systems ist linearer Term in der Ent-

wicklung für kleine  $\delta \vec{\varphi}$  ("Erzeuger der Rotation"):

$$\begin{split} U(\delta\vec{\varphi}) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{J}} + O\big((\delta\vec{\varphi})^2\big) \\ &\stackrel{!}{=} \Big(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{J}}_1 + \cdots\Big) \otimes \Big(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{J}}_2 + \cdots\Big) \\ &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot(\hat{\vec{J}}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1}\otimes\hat{\vec{J}}_2) + O\big((\delta\vec{\varphi})^2\big) \end{split}$$

Somit folgt in der Tat:

$$\vec{J}\big|_{\mathcal{H}} = \vec{J}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{J}_2 \tag{II.31}$$

Wir schreiben verkürzt  $\vec{J} = \vec{J_1} + \vec{J_2}$ .

Da  $[\hat{J}_{1,a}, \hat{J}_{2,b}] = 0, a, b \in \{x, y, z\}$ , ist auch  $\hat{J}_a$  Drehimpulsoperator:

$$[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{J}_c \tag{II.32}$$

**Beweis:** 

$$\begin{split} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= [\hat{J}_{1,x} + \hat{J}_{2,x}, \hat{J}_{1,y} + \hat{J}_{2,y}] \\ &= [\hat{J}_{1,x}, \hat{J}_{1,y}] + [\hat{J}_{2,x}, \hat{J}_{2,y}] \\ &= i\hbar \hat{J}_{1,z} + i\hbar \hat{J}_{2,z} = i\hbar \hat{J}_z \end{split}$$

Eigenwertproblem für Gesamtdrehimpulsoperator  $\hat{\vec{J}}$ : Produktzustände:

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \coloneqq |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \tag{II.33}$$

Sind Eigenzustände zu  $\hat{J}_1^{\natural},\hat{J}_2^{\natural},\hat{J}_{1,z},\hat{J}_{2,z}:$ 

$$\hat{J}_{i}^{2}|j_{1}, m_{1}, j_{2}, m_{2}\rangle = \hbar^{2}j_{i}(j_{i}+1)|j_{1}, m_{1}, j_{2}, m_{2}\rangle$$
$$\hat{J}_{i,z}^{2}|j_{1}, m_{1}, j_{2}, m_{2}\rangle = \hbar m_{i}|j_{1}, m_{1}, j_{2}, m_{2}\rangle$$
(II.34)

aber *nicht* zu  $\hat{\vec{J}}^2$  da  $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_{i,z}] \neq 0$ . Klar, da  $\hat{J}_{i,z}$  Rotation um z-Achse im Unterraum  $\mathcal{H}_i$  erzeugt,  $\hat{\vec{J}}^2$  skalar aber nur für Drehung im Gesamtraum  $\mathcal{H}$  ist. Dennoch muss es Eigenzustände  $|j, m_j, j_1, j_2\rangle$  des Gesamtdrehimpulsproblems geben:

$$\vec{J}^{2}|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle = \hbar^{2}j(j+1)|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle 
J_{z}|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle = \hbar m_{j}|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle 
\vec{J}^{2}_{1}|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle = \hbar^{2}j_{1}(j_{1}+1)|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle 
\vec{J}^{2}_{2}|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle = \hbar^{2}j_{2}(j_{2}+1)|j, m_{j}, j_{1}, j_{2}\rangle$$
(II.35)

Da $\vec{J^2}, J_z, \vec{J_1^2}, \vec{J_2^2}$ miteinander kommutieren.

## II.6. Addition von zwei s = 1/2 Operatoren

Einfachster Fall:  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ . Der betrachtete Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{s=1/2} \otimes \mathcal{H}_{s=1/2}$  ist vierdimensional.

$$\begin{split} |+,+\rangle &= |+\rangle |+\rangle & |-,-\rangle &= |-\rangle |-\rangle \\ |+,-\rangle &= |+\rangle |-\rangle & |-,+\rangle &= |-\rangle |+\rangle \end{split}$$

Aus

$$\begin{split} \hat{S}_{z}|++\rangle &= (S_{z,1}+S_{z,2})|++\rangle = \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2}\right)|++\rangle = \hbar|++\rangle\\ \hat{S}_{z}|--\rangle &= -\hbar|--\rangle\\ \hat{S}_{z}|+-\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2} - \frac{\hbar}{2}\right)|+-\rangle = 0\\ \hat{S}_{z}|-+\rangle &= \left(-\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2}\right)|-+\rangle = 0 \end{split}$$

schließen wir, dass der GesamtspinS die Werte 1 oder 0 annimmt:

$$\begin{split} \hat{\vec{S}}^{2} &= \hat{\vec{S}}_{1}^{2} + \hat{\vec{S}}_{2}^{2} + 2\hat{\vec{S}}_{1} \cdot \hat{\vec{S}}_{2} \\ &= \underbrace{\hbar^{2} \frac{3}{4} + \hbar^{2} \frac{3}{4}}_{=\hbar^{2} \frac{3}{2}} + 2\hat{\vec{S}}_{1,z} \hat{\vec{S}}_{2,z} + \hat{\vec{S}}_{1,+} \hat{\vec{S}}_{2,-} + \hat{\vec{S}}_{1,-} \hat{\vec{S}}_{2,+} \\ \hat{\vec{S}}^{2} &| + + \rangle = \left( \hbar^{2} \frac{3}{2} + 2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2} \right) | + + \rangle \\ &= 2\hbar^{2} | + + \rangle \quad \Rightarrow \quad \mathbf{s} = \mathbf{1} \\ \hat{\vec{S}}^{2} | - - \rangle = \left( \hbar^{2} \frac{3}{2} + 2\left(-\frac{\hbar}{2}\right)^{2} \right) | - - \rangle \\ &= 2\hbar^{2} | - - \rangle \quad \Rightarrow \quad \mathbf{s} = \mathbf{1} \end{split}$$
(II.36)

 $\Rightarrow$ 

Das heißt, dass  $|++\rangle$  und  $|--\rangle$  den Gesamtspins=1 und die z-Komponente $m=\pm 1$  besitzen.

$$\Rightarrow \qquad |1,1\rangle = |+,+\rangle \\ |1,-1\rangle = |-,-\rangle \qquad (II.37)$$

in der Notation  $|s, m\rangle$ .

Mithilfe des Absteige operators  $\hat{S}_{-}$  erhält man  $|1,0\rangle.$ 

$$|1,0\rangle \propto \frac{1}{\hbar} \hat{S}_{-} |1,1\rangle = \frac{1}{\hbar} (\hat{S}_{1,-} + \hat{S}_{2,-}) |+,+\rangle$$
  
=  $|-,+\rangle + |+,-\rangle$   
 $|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+,-\rangle + |-,+\rangle)$  (II.38)

normiert ergibt sich:

Fehlender orthogonaler Zustand:

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle)$$
 da  $\langle 0,0|1,0\rangle = 0$  (II.39)

Test:

$$\begin{split} \hat{S}_{z}|0,0\rangle &= 0\\ \hat{S}_{z}|0,0\rangle &= \left(\frac{3}{2}\hbar^{2} + 2\vec{S}_{1,z}\vec{S}_{2,z} + \vec{S}_{1,+}\vec{S}_{2,-} + \vec{S}_{1,-}\vec{S}_{2,+}\right)|0,0\rangle\\ &= \left(\frac{3}{2}\hbar^{2} - 2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2}\right)|0,0\rangle + \frac{\hbar^{2}}{\sqrt{2}}\left(-|+,-\rangle + |-,+\rangle\right)\\ &= \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} - 1\right)\hbar^{2}|0,0\rangle = 0 \end{split}$$
(II.40)

$$\begin{array}{ll} \text{Singulett:} & |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\ \text{Triplett:} \begin{cases} & |1,1\rangle = |+,+\rangle \\ & |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle) \\ & |1,-1\rangle = |-,-\rangle \end{cases} \end{array}$$

 $D_s$ : Spin s-Darstellung  $\Leftrightarrow$  Basis des  $\mathcal{H}_{\text{Spin }s}$ 

$$D_{1/2} \otimes D_{1/2} = D_1 \oplus D_0 \tag{II.41}$$

Projektionsoperatoren

$$\hat{P}_{1} = \frac{3}{4} + \frac{1}{\hbar^{2}}\hat{\vec{S}}_{1}\cdot\hat{\vec{S}}_{2} \qquad \hat{P}_{0} = \mathbf{1} - \hat{P}_{1} \\ = \frac{1}{4} - \frac{1}{\hbar^{2}}\hat{\vec{S}}_{1}\cdot\hat{\vec{S}}_{2} \qquad (\text{II.42})$$

 $\hat{P}_1$  projiziert auf den Triplettraum  $D_1$ :

$$\begin{split} \hat{P}_1 |1, m\rangle &= \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{2} (\hat{\vec{S}}^2 - \hat{\vec{S}}_1^2 - \hat{\vec{S}}_2^2)\right) |1, m\rangle \\ &= \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{2} \left(2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right)\right) |1, m\rangle \\ &= |1, m\rangle \\ \hat{P}_1 |0, m\rangle &= \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{2} \left(0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right)\right) |0, 0\rangle \\ &= 0 \end{split}$$

## II.7. Allgemeiner Fall der Addition zweier Drehimpulse

Addition zweier beliebiger Drehimpulse  $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ Zwei orthonormale Basen:

~

Es handelt sich um unterschiedliche Orthonormalsysteme, da  $[\vec{J^2}, J_{1,z}] = -[\vec{J^2}, J_{2,z}] \neq 0$  ist. Die Basis <sup>(2)</sup> lässt sich nach der Basis <sup>(1)</sup> entwickeln.

$$|j,m,j_1,j_2\rangle = \sum_{j'_1,j'_2} \sum_{m'_1,m'_2} |j'_1,m'_1,j'_2,m'_2\rangle \times \langle j'_1,m'_1,j'_2,m'_2|j,m,j_1,j_2\rangle$$
(II.43)

#### Zwei Beobachtungen:

1)

Aus  
folgt
$$\begin{aligned}
\left(\langle j'_{1}, m'_{1}, j'_{2}, m'_{2} | \hat{J}_{i}^{2} \rangle | j, m, j_{1}, j_{2} \rangle &= \langle j'_{1}, m'_{1}, j'_{2}, m'_{2} | (\hat{J}_{i}^{2} | j, m, j_{1}, j_{2} \rangle) \\
folgt
$$\begin{aligned}
\left[ j'_{i}(j'_{i}+1) - j_{i}(j_{i}+1) \right] \langle j'_{1}, m'_{1}, j'_{2}, m'_{2} | j, m, j_{1}, j_{2} \rangle &= 0 \\
\langle j'_{1}, m'_{1}, j'_{2}, m'_{2} | j, m, j_{1}, j_{2} \rangle &= \delta_{j'_{1}j_{1}} \delta_{j'_{2}, j_{2}} \langle j_{1}, m'_{1}, j_{2}, m'_{2} | j, m, j_{1}, j_{2} \rangle \\
\end{aligned}$$
Bzw. nur für
$$\begin{aligned}
\left[ j'_{1} = j_{1} \quad \text{und} \quad j'_{2} = j_{2} \right] \quad (II.44)
\end{aligned}$$$$

ergibt sich ein nicht verschwindender Überlapp  $\langle j'_1, m'_1, j'_2, m'_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle \neq 0.$ 

## 2) Weiterhin:

som  $\Rightarrow$ 

$$\begin{split} \hat{J}_z &= \hat{J}_{1,z} + \hat{J}_{2,z} \\ \text{somit} & (\langle j_1, m'_1, j_2, m'_2 | (\hat{J}_{1,z} + \hat{J}_{2,z})) | j, m, j_1, j_2 \rangle = \langle j_1, m'_1, j_2, m'_2 | (\hat{J}_z | j, m, j_1, j_2 \rangle) \\ \Rightarrow & [m'_1 + m'_2 - m] \langle j_1, m'_1, j_2, m'_2 | | j, m, j_1, j_2 \rangle = 0 \\ \text{D.h.} & \langle j_1, m'_1, j_2, m'_2 | | j, m, j_1, j_2 \rangle \neq 0 \text{ nur für } \boxed{m = m'_1 + m'_2}. \end{split}$$

Das heißt, die Summen in (II.43) reduzieren sich auf eine Summe:

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{\substack{m_1 \\ m_2 = m - m_1}} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \times \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2\rangle$$
(II.45)

 $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle$ : "Clebsch-Gordan-Koeffizienten"

Für die Addition zweier Drehimpulse mit  $j_1$  und  $j_2$  fest vorgegeben bleiben zwei Fragen:

- 1) Welche Werte von j sind für gegebenes  $j_1$  und  $j_2$  erlaubt?
- 2) Wie bestimmt man die Clebsch-Gordan-Koeffizienten?

## **1.** Die erlaubten Werte von j

Da

und

Da  

$$m_1 = \{-j_1, -j_1 + 1, \dots, j_1 - 1, j_1\}$$

$$m_2 = \{-j_2, -j_2 + 1, \dots, j_2 - 1, j_2\}$$
und  

$$m = m_1 + m_2 = \{-(j_1 + j_2), \dots, (j_1 + j_2)\}$$
Daraus schließen wir  

$$j \le j_1 + j_2$$
(II.46)

**Behauptung:** Die erlaubten j Werte in der Addition zweier Drehimpulse  $j_1$  und  $j_2$  lauten

$$m = m_1 + m_2 j = \{ |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 \}$$

**Beweis:** OBdA sei  $j_1 \ge j_2$ . Zur Visualisierung des Beweiswegs siehe Abb. II.2.

Wir stellen mithilfe dieser Graphik die Tabelle II.1 auf, aus der sich die erlaubten Werte von j ablesen lassen. Ausgehend vom  $(j_1, j_2)$ -Zustand ist der assoziierte j-Wert gerade  $j_1 + j_2$  und die m-Werte sind  $m = \{-(j_1 + j_2), \dots, (j_1 + j_2)\}$ . Für  $m = j_1 + j_2 - 1$  bleibt dann genau ein Zustand übrig, der der maximal ausgerichtete Zustand des  $j = j_1 + j_2 - 1$ -Multipletts ist. Dieses Schema setzt sich



Abbildung II.2.: Entartung der gemeinsamen Eigenzustände der Einzeldrehimpulsoperatoren bezüglich der z-Komponente des Gesamtdrehimpulses

	m	$(m_1, m_2)$	Entartungsgrad
	$j_1 + j_2$	$(j_1, j_2)$	1
	$j_1 + j_2 - 1$	$(j_1 - 1, j_2), (j_1, j_2 - 1)$	2
	$j_1 + j_2 - 2$	$(j_1 - 2, j_2), (j_1 - 1, j_2 - 1), (j_1, j_2 - 2)$	3
©	•	:	:
	$j_1 - j_2 + 1$	$(j_1 - 2j_2 + 1, j_2), \dots, (j_1, -j_2 + 1)$	$2j_2$
	$j_1 - j_2$	$(j_1 - 2j_2, j_2), \dots, (j_1, -j_2)$	$2j_2 + 1$
	$j_1 - j_2 - 1$	$(j_1 - 2j_2 - 1, j_2), \dots, (j_1 - 1, -j_2)$	$2j_2 + 1$
(B)	•	:	•
0	$-(j_1 - j_2)$	$(-j_1, j_2), \ldots, (-j_1 + 2j_2, -j_2)$	$2j_2 + 1$
	$-(j_1 - j_2) - 1$	$(-j_1, j_2 - 1), \dots, (-j_1 + 2j_2 - 1, -j_2)$	$2j_2$
A	:	:	:
	$-(j_1+j_2)+1$	$(-j_1, -j_2+1), (-j_1+1, -j_2)$	2
	$-(j_1+j_2)$	$(-j_1,-j_2)$	1

Tabelle II.1.: Eigenwerte des  $\hat{J}_z$  Operators sowie Basis der dazugehörigen Eigenräume

©	$m \ge  j_1 - j_2 $	Entartung: $j_1 + j_2 - m + 1$
B	$- j_1 - j_2  < m <  j_1 - j_2 $	Entartung: $j_1 + j_2 -  j_1 - j_2  + 1$
A	$m \le - j_1 - j_2 $	Entartung: $j_1 + j_2 -  m  + 1$

Tabelle II.2.: Entartungsgrad von m (nun  $j_1$  und  $j_2$  nicht mehr geordnet)



Abbildung II.3.: Schematische Darstellung der *m*-Eigenräume in der direkten Produktbasis der Einzeldrehimpulse

fort bis  $j = |j_1 - j_2|$ , dann sind alle  $(m_1, m_2)$ -Zustände verbraucht. Siehe hierzu auch Abb. II.3. Das heißt, die möglichen Werte von j sind:

$$|j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2$$
(II.47)

Zur Kontrolle zählen wir alle Zustände ab. (Sei weiterhin  $j_1 \ge j_2$ )

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = \sum_{k=0}^{2j_2} 2(j_1-j_2+k) + 1 \quad \text{wobei} \quad \sum_{k=0}^n k = \frac{n(n+1)}{2}$$
$$= \left(2(j_1-j_2)+1\right)(2j_2+1) + 2\left(\frac{1}{2}(2j_2)(2j_2+1)\right)$$
$$= (2j_1-2j_2+2j_2+1) \cdot (2j_2+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) \quad \Box \quad (\text{II.48})$$

Stimmt überein!

#### 2. Bestimmung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten

 $\langle j'_1, m'_1, j'_2, m'_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle$  sind tabelliert (z.B. Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics, PUP 1957). Wir wollen das Konstruktionsprinzip verstehen. Wir starten mit dem Zustand mit maximalem  $j = j_1 + j_2$  und wenden dann den Absteigeoperator  $J_-$  an, um das  $j = j_1 + j_2$ -Multiplett aufzubauen ( $m \in \{-j, -j + 1, \dots, j - 1, j\}$ ).

Erinnerung: 
$$J_{\pm}|j,m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}|j,m\pm 1\rangle$$
 (II.49)

Da $j_1$  und  $j_2$  fest sind, schreiben wir zur Vereinfachung:

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \to |m_1, m_2\rangle |j, m, j_1, j_2\rangle \to |j, m\rangle_G$$
 (II.50)

wobei der Index "G" für "Gesamt" steht. Dann gilt:

$$|j,m\rangle_{G} = \sum_{\substack{m_{1},m_{2} \\ m_{1}+m_{2}=m}} \langle m_{1},m_{2}|j,m\rangle_{G}|m_{1},m_{2}\rangle$$
(II.51)

I. Das  $j = j_1 + j_2$ -Multiplett:

$$|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle_G = |j_1, j_2\rangle$$
 (II.52)

Um den nächsten Zustand zu bekommen wenden wir  $J_-$  darauf an:

$$J_{-}|j_{1}+j_{2},j_{1}+j_{2}\rangle_{G} = \hbar\sqrt{2(j_{1}+j_{2})} |j_{1}+j_{2},j_{1}+j_{2}-1\rangle_{G}$$
(II.53)

bzw.

$$\begin{aligned} I_{-}|j_{1}, j_{2}\rangle &= (J_{1-} + J_{2-})|j_{1}, j_{2}\rangle \\ &= \hbar\sqrt{2j_{1}}|j_{1} - 1, j_{2}\rangle + \hbar\sqrt{2j_{2}}|j_{1}, j_{2} - 1\rangle \end{aligned}$$
(II.54)

Durch Gleichsetzen von (II.53) und (II.54) erhalten wir:

e

$$\Rightarrow \qquad |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_G = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2 - 1\rangle \qquad (\text{II.55})$$

Das heißt die ersten Clebsch-Gordan-Koeffizienten lauten:

$$\langle m_1, m_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle_G = \delta_{m_1 j_1} \delta_{m_2, j_2}$$

$$\langle m_1, m_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle_G = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \, \delta_{m_1, j_1 - 1} \delta_{m_2, j_2} + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \, \delta_{m_1, j_1} \delta_{m_2, j_2 - 1}$$

$$(II.56)$$

Dieses Verfahren lässt sich fortsetzen. Zur Übung nächster Schritt:

$$J_{-}|j_{1}+j_{2},j_{1}+j_{2}-1\rangle_{G} = \hbar\sqrt{2(2j_{1}+2j_{2}-1)}|j_{1}+j_{2},j_{1}+j_{2}-2\rangle_{G}$$

gleichzusetzen mit

$$\begin{split} &\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}(J_{1-}+J_{2-})|j_1-1,j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}(J_{1-}+J_{2-})|j_1,j_2-1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\Big(\sqrt{2(2j_1-1)}\;|j_1-2,j_2\rangle + \sqrt{2j_2}\;|j_1-1,j_2-1\rangle\Big) \\ &+ \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\Big(\sqrt{2j_1}\;|j_1-1,j_2-1\rangle + \sqrt{2(2j_2-1)}\;|j_1,j_2-2\rangle\Big) \end{split}$$

## II. Der Spin und die Addition von Drehimpulsen

Hieraus folgt der nächste Koeffizient:

$$\langle m_1, m_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2 \rangle_G = \sqrt{\frac{j_1(2j_2 - 1)}{(j_1 + j_2)(2j_1 + 2j_2 - 1)}} \delta_{m_1, j_1 - 2} \delta_{m_2, j_2} \\ + 2\sqrt{\frac{j_1 j_2}{(j_1 + j_2)(2j_1 + 2j_2 - 1)}} \delta_{m_1, j_1 - 1} \delta_{m_2, j_2 - 1} \\ + \sqrt{\frac{j_2(2j_2 - 1)}{(j_1 + j_2)(2j_1 + 2j_2 - 1)}} \delta_{m_1, j_1} \delta_{m_2, j_2 - 2}$$

**II Das**  $j = j_1 + j_2 - 1$ -**Multiplett** Offensichtlich ist

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_G = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2 - 1\rangle$$
(II.57)

da zum Zustand $|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle_G$ aus (II.55) orthogonal und

$$J_{z}|j_{1}+j_{2}-1,j_{1}+j_{2}-1\rangle_{G} = \hbar(j_{1}+j_{2}-1)|j_{1}+j_{2}-1,j_{1}+j_{2}-1\rangle_{G}$$
(II.58)

Somit

$$\langle m_1, m_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle_G = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \,\delta_{m_1, j_1 - 1} \delta_{m_2, j_2} - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \,\delta_{m_1, j_1} \delta_{m_2, j_2 - 1} \quad \text{(II.59)}$$

Weitere Zustände dieses Multipletts erhalten wir durch Anwendung von  $J_-$ . Weitere Multipletts erhalten wir durch Orthogonalisierung. Das Prinzip der Berechnung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten ist in Abb. II.4 dargestellt.



Abbildung II.4.: Entwicklung der Gesamtdrehimpulsmultipletts mittels Anwendung des Gesamtdrehimpulsabsteigers

# III. Näherungsmethoden

## III.1. Zeitunabhängige Störungstheorie

Ziel ist die pertubative (störungstheoretische) Bestimmung der stationären Zustände und Eigenenergiewerte für "kleine" Störungen

 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$  Störterm:  $\lambda \hat{H}_1$  (III.1)

Das Eigenproblem von  $\hat{H}_0$  sei gelöst:

$$\hat{H}_0|n_i^0\rangle = E_n^0|n_i^0\rangle \qquad i = 1, \dots, g \quad \text{Entartungsgrad}$$
(III.2)

Gesucht: Lösung des Eigenwertproblems im gestörten Fall:

$$\hat{H}|n_i\rangle = E_n|n_i\rangle$$

**Annahme:**  $E_n(\lambda)$  und  $|n(\lambda)\rangle$  seien analytisch in  $\lambda$ :

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots$$
(III.3)

$$|n_i\rangle = |n_i^0\rangle + \lambda |n_i^1\rangle + \lambda^2 |n_i^2\rangle + \cdots$$
(III.4)

### Nebenbemerkung:

i) Im Allgemeinen konvergiert diese Entwicklung nicht. In vielen Fällen ist sie aber eine asymptotische Reihe, das heißt, die ersten Terme der Entwicklung geben eine gute Approximation, ab einer gewissen Ordnung wird die Approximation sogar schlechter!

Asymptotische Reihe einer Funktion  $f(\lambda)$ : Sei  $f(\lambda) = \sum_{k=0}^{m} a_k \lambda^k + R_m(\lambda)$ . Falls das Restglied  $R_m(\lambda)$  die Bedingung  $\lim_{\lambda \to 0} \frac{R_m(\lambda)}{\lambda^m} = 0$ und  $\lim_{m \to \infty} R_m(\lambda \neq 0) = \infty$  (Divergenz) erfüllt, ist

$$f_m(\lambda) = \sum_{k=0}^m a_k \lambda^k$$

die asymptotische Reihe vom Grad m zu  $f(\lambda)$ .

ii) In manchen Fällen kann man $E(\lambda)$ nicht in  $\lambda$ entwickeln. Beispiel: $E_n=\exp\left[-\frac{1}{\lambda}n\right]$ 

## III. Näherungsmethoden

## Nicht-entartete Störungstheorie:

$$\hat{H}|n\rangle = E|n\rangle$$

$$\Rightarrow \quad (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) (|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \cdots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \cdots) (|n^0\rangle + \lambda |n^1\rangle + \lambda^2 |n^2\rangle + \cdots)$$
(III.5)

Koeffizientenvergleich (von  $\lambda^0, \lambda^1, \dots$ ):

$$\lambda^{0}: \qquad \hat{H}_{0}|n^{0}\rangle = E_{n}^{0}|n^{0}\rangle$$
  
$$\lambda^{1}: \qquad \hat{H}_{0}|n^{1}\rangle + \hat{H}_{1}|n^{0}\rangle = E_{n}^{0}|n^{1}\rangle + E_{n}^{1}|n^{0}\rangle \qquad (\text{III.6})$$

$$\lambda^{2}: \qquad \hat{H}_{0}|n^{2}\rangle + \hat{H}_{1}|n^{1}\rangle = E_{n}^{0}|n^{2}\rangle + E_{n}^{1}|n^{1}\rangle + E_{n}^{2}|n^{0}\rangle \qquad (\text{III.7})$$

### Normierung von $|n\rangle$

Es ist bequem,  $|n\rangle$  nicht auf 1 zu normieren sondern durch  $\langle n^0|n\rangle = 1$  ( $\langle n^0|n^0\rangle = 1$ ) festzulegen. Das heißt:

$$\lambda \langle n^0 | n^1 \rangle + \lambda^2 \langle n^0 | n^2 \rangle + \dots = 0$$
  
$$\langle n^0 | n^1 \rangle = \langle n^0 | n^2 \rangle = \dots = 0$$
 (III.8)

woraus

folgt. Nun projizieren wir (III.6) mit  $\langle n^0 |$ :

$$\underline{\langle n^0 | \hat{H}_0 | n^1 \rangle} + \langle n^0 | \hat{H}_1 | n^0 \rangle = \underline{\langle n^0 | E_0 | n^1 \rangle} + E_n^1$$

$$E_n^1 = \langle n^0 | \hat{H}_1 | n^0 \rangle$$
(III.9)

 $\Rightarrow$ 

 $|n^1\rangle$  hat die Form

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} c_m |m^0\rangle \quad \text{mit } c_m = \langle m^0 |n^1\rangle$$
 (III.10)

da die  $\{|m^0\rangle\}$  ein vollständiges Orthonormalsystem bilden. Die Anwendung  $\langle m^0|(\text{III.6}) \text{ mit } m \neq n$ ergibt  $(m^0|n^1)E^0 + (m^0|\hat{H}|n^0) = E^0(m^0|n^1)$ 

$$\langle m^{\circ}|n^{1}\rangle E_{m}^{\circ} + \langle m^{\circ}|H_{1}|n^{\circ}\rangle = E_{n}^{\circ}\langle m^{\circ}|n^{1}\rangle$$
$$c_{m} = \langle m^{0}|n^{1}\rangle = \frac{\langle m^{0}|\hat{H}_{1}|n^{0}\rangle}{E_{n}^{0} - E_{m}^{0}}$$
(III.11)

Das heißt:

 $\Rightarrow$ 

$$|n_{1}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^{0} | \hat{H}_{1} | n^{0} \rangle}{E_{n}^{0} - E_{m}^{0}} | m^{0} \rangle \tag{III.12}$$

 $E_n^2$ erhält man nun aus  $\langle n^0|$  (III.7) unter Ausnutzung von (III.9) und (III.12):

$$E_n^2 = \langle n^0 | \hat{H}_1 | n^1 \rangle$$

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle n^0 | \hat{H}_1 | m^0 \rangle \langle m^0 | \hat{H}_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} = \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle m^0 | \hat{H}_1 | n^0 \rangle \right|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$
(III.13)

Korrektur des Energieeigenwertes in zweiter Ordnung Störungstheorie.

 $\Rightarrow$
### Nebenbemerkung:

- i) Für den Grundzustand ist  $E_{n=0}^2 < 0$
- ii) Falls die Matrixelemente von  $\hat{H}_1$  alle vergleichbar groß sind, liefern benachbarte Energieniveaus dominanten Beitrag zu  $E_n^2$ .
- iii) Im kontinuierlichen Fall des Spektrums ist die obige Summe durch ein Integral zu ersetzen.

#### Entartete Störungstheorie

$$\hat{H}_0|n_i^0\rangle = E_n^0|n_i^0\rangle \qquad i = 1, \dots, g_n$$
 (III.14)

mit  $\langle m_i^0 | n_j^0 \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij}$ . Die  $| n_i^0 \rangle$  für festes *n* spannen den  $g_n$ -dimensionalen Eigenraum  $U_n$  des Eigenwerts  $E_n^0$  auf. Sie sind jedoch nur bis auf unitäre Transformationen innerhalb von  $U_n$  bestimmt.

Das volle System ist durch  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$  beschrieben. Wir suchen die Lösung zu

$$\hat{H}|n_{\alpha}\rangle = E_{n,\alpha}|n_{\alpha}\rangle \qquad \alpha = 1,\dots,g_n$$
 (III.15)

Im Allgemeinen wird die Störung die Entartung aufheben, wie zum Beispiel beim Zeeman-Effekt. Das heißt, die Eigenwerte  $E_{n,\alpha}$  tragen zusätzlich den Index  $\alpha$ . Wie uns bekannt ist, besteht ein Zusammenhang zwischen Symmetrie und Entartung.

Nehmen wir an, (III.15) ist gelöst, dann ergibt

$$\lim_{\lambda \to 0} |n_{\alpha}\rangle = |n_{\alpha}^{0}\rangle \tag{III.16}$$

eine spezielle "der Störung angepasste" Basis des  $U_n$ . In dieser Basis wollen wir arbeiten und setzen an:

$$E_{n,\alpha} = E_n^0 + \lambda E_{n,\alpha}^1 + \lambda^2 E_{n,\alpha}^2 + \cdots$$
  

$$|n_{\alpha}\rangle = |n_{\alpha}^0\rangle + \lambda |n_{\alpha}^1\rangle + \lambda^2 |n_{\alpha}^2\rangle + \cdots$$
(III.17)

Dies setzen wir in (III.15) ein und führen einen Koeffizientenvergleich Ordnung für Ordnung in  $\lambda$  durch:

$$\lambda^{0}: \qquad \hat{H}_{0}|n_{\alpha}^{0}\rangle = E_{n}^{0}|n_{\alpha}^{0}\rangle$$
$$\lambda^{1}: \qquad \hat{H}_{0}|n_{\alpha}^{1}\rangle + \hat{H}_{1}|n_{\alpha}^{0}\rangle = E_{n}^{0}|n_{\alpha}^{1}\rangle + E_{n,\alpha}^{1}|n_{\alpha}^{0}\rangle \qquad (\text{III.18})$$

Wir entwickeln der Störung angepasste, uns noch nicht bekannte Eigenvektoren  $|n_{\alpha}^{0}\rangle$  nach den ursprünglichen orthonormierten Eigenvektoren  $|n_{i}^{0}\rangle$  des Eigenraums  $U_{n}$ :

$$|n_{\alpha}^{0}\rangle = \sum_{i=1}^{g_{n}} \langle n_{i}^{0} | n_{\alpha}^{0} \rangle | n_{i}^{0} \rangle \tag{III.19}$$

Die Eigenvektorkorrektur erster Ordnung wird noch der ursprünglichen Basis aller  $\{|n_i^0\rangle\}$  entwickelt:

$$|n_{\alpha}^{1}\rangle = \sum_{m,i_{m}} \langle m_{i_{m}}^{0} | n_{\alpha}^{1} \rangle | m_{i_{m}}^{0} \rangle$$
(III.20)

#### III. Näherungsmethoden

mit  $i_m = 1, \ldots, g_m$ . Einsetzen von (III.19) und (III.20) in (III.18) und Multiplikation von links mit  $\langle m_j^0 |$ :

Für m = n ergibt sich das homogene Gleichungssystem für  $\langle n_i^0 | n_\alpha^0 \rangle$ :

$$\sum_{i=1}^{g_n} \left\{ \langle n_j^0 | \hat{H}_1 | n_i^0 \rangle - E_{n,\alpha}^1 \delta_{ij} \right\} \langle n_i^0 | n_\alpha^0 \rangle = 0$$
(III.22)

Dies hat nur dann eine von Null verschiedene Lösung  $(\langle n_i^0 | n_{\alpha}^0 \rangle \neq 0)$  falls

$$\det \underbrace{\left[ \langle n_j^0 | \hat{H}_1 | n_i^0 \rangle - E_{n,\alpha}^1 \delta_{ij} \right]}_{\text{Säkulardeterminante}} = 0 \tag{III.23}$$

Das heißt, die Eigenwerte der  $g_n \times g_n$ -Matrix  $A_{ij} = \langle n_i^0 | \hat{H}_1 | n_j^0 \rangle$  liefern die Energiekorrekturen erster Ordnung  $E_{n,\alpha}^1$ .

Eigenvektoren der Matrix  $\langle n_i^0 | \hat{H}_1 | n_j^0 \rangle$  sind gemäß (III.22) die  $\langle n_i^0 | n_\alpha^0 \rangle$  Koeffizienten  $\hat{=}$  Entwicklungskoeffizienten der der Störung angepassten Basis.

Die Koeffizienten  $\langle m_j^0 | n_{\alpha}^0 \rangle$  schließlich folgen nach Einsetzung der gewonnenen  $E_{n,\alpha}^1$  und  $\langle n_i^0 | n_{\alpha}^0 \rangle$  in (III.21).

## III.2. Variationsprinzip

Das Ritz'sche Variationsprinzip ist ein Näherungsverfahren für das Abschätzen der Grundzustandsenergie eines Hamilton-Operators.

 $\hat{H}$  sei von unten beschränkt, das heißt, dass die Grundzustandsenergie existiert. Für  $\hat{H}$  mit unbekannter Eigenbasis  $|n\rangle$  gilt für beliebiges  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ .

$$\begin{split} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_{n} \langle \psi | n \rangle \langle n | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{n} E_{n} | \langle n | \psi \rangle |^{2} \\ &\geq E_{0} \sum_{n} | \langle n | \psi \rangle |^{2} = E_{0} \langle \psi | \psi \rangle \\ E_{0} &\leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \end{split}$$
(III.24)

 $\Rightarrow$ 

Betrachten wir nun eine Schar  $|\psi(\mu)\rangle$  mit  $\mu \in \mathbb{R}$  geeignet gewählter Zustände, dann ist das Minimum der Funktion

$$E(\mu) = \frac{\langle \psi(\mu) | H | \psi(\mu) \rangle}{\langle \psi(\mu) | \psi(\mu) \rangle}$$
(III.25)

eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie.

$$E_0 \lesssim \min_{\mu} (E(\mu)) \tag{III.26}$$

"Ritz'sches Variationsverfahren"

# III.3. Zeitabhängige Probleme: Dyson-Reihe

Bisher wurden Probleme mit zeitunabhängigen Hamilton-Operatoren diskutiert. Mit Auffinden der stationären Zustände  $|n\rangle$  war das quantenmechanische Anfangswertproblem durch

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|n\rangle\langle n|\psi(t_0)\rangle$$
(III.27)

gelöst worden.

Nun wollen wir explizit zeitabhängige Potentiale V(t) betrachten:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$
 (III.28)

Gesucht: Lösungen  $|\psi(t)\rangle$  der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$
 (III.29)

Alternative Formulierung im Heisenbergbild:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{III.30}$$

wobei  $\hat{U}(t, t_0)$  der Zeitentwicklungsoperator ist, für den gilt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0) \qquad \text{mit } \hat{U}(t_0,t_0) = \mathbb{1}$$
(III.31)

Für ein zeitunabhängiges  $\hat{H}$  folgt sofort

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$$
(III.32)

und führt auf (III.27).

## Lösung von $\left( III.31\right)$ für zeitabhängigen Hamilton-Operator

Umwandlung von (III.31) in Integralgleichung:

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1,t_0)$$
(III.33)



Abbildung III.1.: Vertauschen der Reihenfolge der Integration ändert, bei Anpassung der Integrationsgrenzen, nichts am Wert des Integrals

Diese erfüllt die Randbedingung  $\hat{U}(t_0, t_0) \stackrel{!}{=} \mathbb{1}$  und die Differentialgleichung (III.31). Wir wollen nun die Integralgleichung (III.33) iterativ lösen:

$$U_0(t,t_0) = 1$$
 (III.34)

$$\hat{U}_{n}(t,t_{0}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' \,\hat{H}(t') \hat{U}_{n-1}(t',t_{0})$$
(III.35)

$$\Rightarrow \qquad \hat{U}_1(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \, \hat{H}(t_1)$$

$$\hat{U}_{2}(t,t_{0}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \hat{H}(t_{1}) \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t_{1}} dt_{2} \hat{H}(t_{2}) \right]$$
$$= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \hat{H}(t_{1}) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2} \int_{t_{0}}^{t} dt_{1} \int_{t_{0}}^{t_{1}} dt_{2} \hat{H}(t_{1}) \hat{H}(t_{2})$$

Allgemein ergibt sich die Dyson-Reihe:

$$\hat{U}(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n)$$
(III.36)

Diese Reihe lässt sich noch kompakter schreiben. Wir betrachten wieder  $\hat{U}_2(t, t_0)$ :

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \,\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \,\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 \,\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^t dt_2 \,\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_2 \,\hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) + \frac{1}{2$$

Da (wie in Abb. III.1 dargestellt)

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots = \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 \dots$$
(III.37)

**Definition III.3.1** (Zeitordnungsoperator  $\mathcal{T}$ ).

$$\mathcal{T}\{\mathcal{O}(t_1), \mathcal{O}(t_2)\} := \begin{cases} \mathcal{O}(t_1)\mathcal{O}(t_2) & \text{für } t_1 \ge t_2 \\ \mathcal{O}(t_2)\mathcal{O}(t_1) & \text{für } t_1 \le t_2 \end{cases}$$
(III.38)

=

III.4. Dirac'sche oder zeitabhängige Störungstheorie

Dann gilt:

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt \int_{t_0}^t dt' \mathcal{T}\{\hat{H}(t)\hat{H}(t')\}$$
(III.39)

und allgemein:

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \mathcal{T}\left\{\int_{t_0}^t dt_1 \cdots dt_n \,\hat{H}(t_1) \cdots \hat{H}(t_n)\right\}$$
(III.40)

bzw. formal geschrieben:

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathcal{T}\left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right] \right\}$$
(III.41)

 $\operatorname{mit}$ 

 $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

$$\mathcal{T}\{\mathcal{O}(t_1)\cdots\mathcal{O}(t_n)\} = \begin{cases} \mathcal{O}(t_n)\mathcal{O}(t_{n-1})\cdots\mathcal{O}(t_1) & \text{falls } t_n > t_{n-1} > \cdots > t_1 \\ \vdots \\ i\hbar\partial_t \hat{U}(t,t_0) = i\hbar\partial_t \mathcal{T} \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right] \right\} \\ = i\hbar \mathcal{T} \left\{ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \hat{H}(t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right] \right\} \\ = \hat{H}(t) \mathcal{T} \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right] \right\} \\ \hat{U}(t,t_0) \neq \hat{U}(t,t_0) \neq \hat{U}(t,t_0) \neq \hat{U}(t,t_0) \neq \hat{U}(t,t_0) \end{cases}$$
(III.42)

III.4. Dirac'sche oder zeitabhängige Störungstheorie

Wir betrachten nun die störungstheoretische Situation, dass  $\hat{V}(t)$  im Hamilton-Operator klein (im Sinne der Eigenwerte) gegenüber  $H_0$  sei. Außerdem sei  $\hat{V}(t) = 0$  für  $t \leq t_0$ , das heißt die Störung wird zum Zeitpunkt  $t_0$  eingeschaltet.

Für  $t < t_0$  befindet sich das System im Zustand  $|\psi_0(t)\rangle$ , der der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t |\psi_0(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi_0(t)\rangle \qquad (t < t_0)$$
 (III.43)

genügt. Mit dem Einschalten der Störung entwickelt sich hieraus der Zustand  $|\psi(t)\rangle$  mit

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right) |\psi(t)\rangle \qquad (t > t_0)$$
(III.44)

#### III. Näherungsmethoden

und der Anfangsbedingung  $|\psi(t)\rangle = |\psi_0(t)\rangle$  für  $t < t_0$ . Als Methode wollen wir für  $t > t_0$  das WECHSELWIRKUNGSBILD verwenden.

$$|\psi(t)\rangle_I := e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}|\psi(t)\rangle$$
(III.45)

 $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

$$\begin{split} i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle_I &= -\hat{H}_0 |\psi(t)\rangle_I + e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)} \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right) |\psi(t)\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)} \hat{V}(t) \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)} |\psi(t)\rangle_I} \end{split}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle_I &= \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \\
\hat{V}_I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}\hat{V}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}
\end{aligned}$$

Die störungstheoretische Lösung für  $|\psi(t)\rangle_I$  erhalten wir über die Dyson-Reihe, die nun auf das Wechselwirkungsbild angewandt wird. Dazu betrachten wir zunächst den Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_{I} &= \hat{U}_{I}(t,t_{0})|\psi(t_{0})\rangle_{I} \end{aligned} \tag{III.46} \\ (\text{III.46}) \Rightarrow & i\hbar\partial_{t}\hat{U}_{I}(t,t_{0}) = \hat{V}_{I}(t)\hat{U}_{I}(t,t_{0}) \\ \Rightarrow & \hat{U}_{I}(t,t_{0}) = \mathcal{T}\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{0}}^{t}dt'\,\hat{V}_{I}(t')\right)\right\} \end{aligned} \tag{III.47}$$

$$|\psi(t)\rangle_{I} = |\psi(t_{0})\rangle_{I} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_{0}}^{t} dt' \,\hat{V}_{I}(t') |\psi(t_{0})\rangle_{I} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{2} \int_{t_{0}}^{t} dt' \int_{t_{0}}^{t'} dt'' \,\hat{V}_{I}(t') \hat{V}_{I}(t'') |\psi(t_{0})\rangle_{I} + \cdots$$
$$= \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' \,\hat{V}_{I}(t')\right) \right\} |\psi(t_{0})\rangle_{I}$$
(III.48)

Diese Reihe erlaubt es, den Zustand  $\psi(t)\rangle_I$  in beliebiger Ordnung im Störoperator  $\hat{V}(t)$  zu berechnen.

# III.5. Übergänge erster Ordnung

• Wir betrachten ein System mit

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$
(III.49)

mit 
$$\hat{V}(t) = \begin{cases} = 0 & t < t_0 \\ \neq 0 & t \ge t_0 \end{cases}$$
 (III.50)

Beschreibung im Wechselwirkungsbild.

$$|\psi(t)\rangle_{I} = \mathcal{T}\left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{0}}^{t}dt'\,\hat{V}_{I}(t')\right]\right\}$$
(III.51)

$$\mathcal{O}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} \mathcal{O}e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$$
(III.52)

Insbesondere ist  $\hat{H}_{0I}(t) = \hat{H}_0 = \text{const.}$  Die Eigenzustände von  $\hat{H}_0, \hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$ , sind deshalb auch im Wechselwirkungsbild zeitunabhängig!

- Das System sei für  $t < t_0$  im Energieeigenzustand  $|m\rangle$ ,  $\hat{H}_0|m\rangle = E_m|m\rangle$ . Das heißt  $|\psi(t_0)\rangle_I = |\psi(t_0)\rangle = |m\rangle$ .
- **Frage:** Wie groß ist die Übergangswahrscheinlichkeit in den Zustand  $|n\rangle$  mit  $n \neq m$  durch die Störung  $\hat{V}(t)$  zu einem späteren Zeitpunkt?  $(|m\rangle \xrightarrow{\hat{V}} |n\rangle)$
- Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang:

$$_{I}\langle n(t)|\psi(t)\rangle_{I} = \langle n|\psi(t)\rangle_{I} = \langle n|\hat{U}_{I}(t,t_{0})|\psi(t_{0})\rangle_{I}$$
(III.53)

Da  $|\psi(t_0)\rangle_I = |m\rangle$  ist

$$|\psi(t)
angle_I = \mathcal{T}\left\{\exp\left[-rac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^t dt'\,\hat{V}_I(t')
ight]
ight\}|m
angle$$

### Übergangsamplitude bis 1. Ordnung Störungstheorie:

$$I\langle n(t)|\psi(t)\rangle_{I} = \langle n|m\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' \underbrace{\langle n|\hat{V}_{I}(t)|m\rangle}_{=\langle n|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0}t'}\hat{V}(t')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0}t'}|m\rangle}_{=\langle n,m-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{0}}^{t} dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n}-E_{m})t'}\langle n|\hat{V}(t')|m\rangle}$$
(III.54)

Für die Übergangswahrscheinlichkeit  $P_{|m\rangle \rightarrow |n\rangle}(t)$  folgt:

$$P_{|m\rangle \to |n\rangle}(t) = \left|\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t'} \langle n|\hat{V}(t')|m\rangle\right|^2$$
(III.55)

mit  $m \neq n$ .

# III.6. Übergänge in ein kontinuierliches Spektrum

Wir betrachten nun Übergänge  $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$  innerhalb eines kontinuierlichen Spektrums, z.B. Streuprozesse, optische Übergänge. Die Situation entspricht Abbildung III.2. Die Störung werde bei t = 0 eingeschaltet und sei konstant:

$$\hat{V}(t) = \theta(t)\hat{V}_0 \tag{III.56}$$



Abbildung III.2.: Übergang zwischen zwei Energieniveaus innerhalb eines kontinuierlichen Spektrums

Aus (III.55) ergibt sich dann für die Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P_{|m\rangle \to |n\rangle}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t'} \right|^2 \cdot \left| \langle n | \hat{V}_0 | m \rangle \right|^2$$
$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{nm}t} - 1}{\omega_{nm}} \right|^2 \cdot \left| \langle n | \hat{V}_0 | m \rangle \right|^2 \quad \text{mit } \omega_{nm} := \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$

\_

Da  $|e^{ix} - 1|^2 = (e^{ix} - 1)(e^{-ix} - 1) = (e^{ix/2} - e^{-ix/2})(e^{-ix/2} - e^{ix/2}) = 4\sin^2(\frac{x}{2})$ 

$$=\frac{1}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\frac{\omega_{nm}t}{2})}{(\frac{\omega_{nm}}{2})^2}\cdot\left|\langle n|\hat{V}_0|m\rangle\right|^2\tag{III.57}$$

Hier taucht die Funktionenfolge

$$\delta_t(\alpha) = \frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi \alpha^2 t} \tag{III.58}$$

auf. Diese Funktionen haben folgende Eigenschaften:

$$\delta_t(\alpha) = \begin{cases} \frac{t}{\pi} & ; \alpha = 0\\ \leq \frac{1}{\pi\alpha^2 t} & ; \alpha \neq 0 \end{cases}$$
(III.59)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \, \frac{\sin^2 y}{y^2} = \pi \tag{III.60}$$

ergibt sich für eine beliebige Testfunktion  $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ :

$$\lim_{t \to \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \,\delta_t(\alpha) F(\alpha) = \lim_{\alpha = \frac{y}{t}} \lim_{t \to \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy \, \frac{\sin^2 y}{\pi y^2} F\left(\frac{y}{t}\right) = F(0)$$
(III.61)

Das heißt

Da

$$\lim_{t \to \infty} \delta_t(\alpha) = \delta(\alpha)$$
(III.62)

Ein Plot einer Funktion aus der Folge  $\delta_t$  ist in Abb. III.3 gegeben. Für lange Zeiten t folgt deswegen aus (III.57):

$$\lim_{t \to \infty} P_{|m\rangle \to |n\rangle}(t) = t \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) |\langle n | \hat{V}_0 | m \rangle|^2$$
(III.63)



Abbildung III.3.: Beispiel für Funktion aus der Folge  $\delta_t$ 

bzw. für die Übergangsrate, also die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit:

$$\Gamma_{|m\rangle \to |n\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m) \left| \langle n | \hat{V}_0 | m \rangle \right|^2$$
(III.64)

"Fermis goldene Regel"

Nur Übergänge, für die Energieerhaltung gilt, sind erlaubt!

# III.7. Periodische Übergänge

Weiterer recht einfach behandelbarer Spezialfall einer zeitabhängigen Störung:

$$\hat{V}(t) = \theta(t)\hat{V}_0 \cdot \cos(\omega t) \tag{III.65}$$

Periodische Störung, zum Beispiel realisiert durch Koppelung an monochromatisches elektromagnetisches Feld. Aus (III.55) folgt (mit  $E_{nm} = E_n - E_m$ ):

$$P_{|m\rangle \to |n\rangle}(t) = \frac{\left|\langle n|\hat{V}_{0}|m\rangle|^{2}}{4\hbar^{2}} \left| \int_{0}^{t} dt' \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{nm}+\hbar\omega)t'} + \int_{0}^{t} dt' \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_{nm}-\hbar\omega)t'} \right|^{2} \\ = \frac{1}{4} \left|\langle n|\hat{V}_{0}|m\rangle|^{2} \left| \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_{nm}+\hbar\omega)t} - 1}{E_{nm}+\hbar\omega} + \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_{nm}-\hbar\omega)t} - 1}{E_{nm}-\hbar\omega} \right|^{2}$$
(III.66)

Jeder einzelne Summand entspricht der Struktur (III.57). Für  $t \to \infty$  besitzt der erste Term ein scharfes Maximum bei  $E_{nm} - \hbar \omega$ , wohingegen der zweite Term bei  $E_{nm} + \hbar \omega$  sein Maximum hat. Das heißt, im Betragsquadrat tragen die gemischten Terme kaum bei und wir bekommen effektiv die Summe zweier  $\delta$ -Funktionen:

$$\lim_{t \to \infty} P_{|m\rangle \to |n\rangle}(t) = \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle n | \hat{V}_0 | m \rangle \right|^2 \cdot t \cdot \left\{ \delta(E_{nm} + \hbar\omega) + \delta(E_{nm} - \hbar\omega) \right\}$$
(III.67)

Das bedeutet für die Übergangsrate:

$$\Gamma_{|m\rangle \to |n\rangle} = \frac{\pi}{2\hbar} \left\{ \delta(E_{nm} + \hbar\omega) + \delta(E_{nm} - \hbar\omega) \right\} \left| \langle n | \hat{V}_0 | m \rangle \right|^2$$
(III.68)

Das heißt, wenn das Energiequant  $\hbar\omega$  der Störung gerade den exakten Wert einer Anregungsenergie  $E_n - E_m$  des ungestörten Systems trifft, werden Übergänge besonders wahrscheinlich. Es handelt sich um ein *Resonanzphänomen*. Abhängig vom Vorzeichen von  $E_n - E_m$  tritt Absorption oder Emission auf, wie in Abbildung III.4 erläutert.



Abbildung III.4.: Absorption und Emission von Photonen durch ein System (z.B. ein Atom)

## III.8. Quasiklassische Näherung

Die typische Wellenlänge eines stationären Zustandes der Energie E ist durch die De-Broglie-Wellenlänge  $\lambda(\vec{x})$  gegeben.

Definition III.8.1 (De-Broglie-Wellenlänge).

$$\lambda(\vec{x}) := \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - V(\vec{x}))}} \tag{III.69}$$

Für große Energien kann  $\lambda(\vec{x})$  sehr viel kleiner werden als die charakteristische Distanz auf der sich  $V(\vec{x})$  ändert. Dies nennt man die *quasiklassischen Grenzfall*:

Der  $\hbar \to 0$  Grenzfall der Schrödinger'schen Quantenmechanik Die klassische analytische Mechanik lässt sich in der Hamilton-Jacobi-Theorie über die Wirkungsfunktion  $S(\vec{q}, \vec{P}, t)$  formulieren, die die erzeugende Funktion der kanonischen Transformation  $(\vec{q}, \vec{p}) \to (\vec{Q}, \vec{P})$  ist. Dabei sind die neuen  $\vec{Q}$  und  $\vec{P}$  Integrale der Bewegung genau dann, wenn gilt:

$$H\left(q_1,\ldots,q_s,\frac{\partial S}{\partial q_1},\ldots,\frac{\partial S}{\partial q_s},t\right) = -\frac{\partial S}{\partial t}$$
(III.70)

"HAMILTON-JACOBI-DIFFERENTIALGLEICHUNG"

Insbesondere ist für ein Teilchen im Potential  $V(\vec{x}, t)$ 

$$\frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2 + V(\vec{x},t) = -\frac{\partial S}{\partial t}$$
(III.71)

In der Ortsdarstellung der Quantenmechanik ist das zentrale Objekt die Wellenfunktion  $\psi(\vec{x}, t)$ , die der Schrödingergleichung genügt. Wir wollen nun folgenden Ansatz machen:

$$\psi(\vec{x},t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\vec{x},t)\right]$$

Dann führt uns

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi + V(\vec{x},t)\psi$$
(III.72)

auf

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{\nabla}S\right)^2 + V(\vec{x},t) - \frac{i\hbar}{2m} \Delta S = -\frac{\partial S}{\partial t}$$
(III.73)

Für  $\hbar \to 0$  geht die Schrödingergleichung in die Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung (III.71) über! Systematische quasiklassische Entwicklung ( $\hbar$ -Entwicklung):

$$S(\vec{x},t) = \sum_{n=0}^{\infty} (i\hbar)^n S_n(\vec{x},t) \qquad \text{mit } S_n \in \mathbb{R}$$
(III.74)

(III.74) in (III.73) eingesetzt liefert:

$$\hbar^{0}: \qquad \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S_{0})^{2} + V(\vec{x},t) = -\frac{\partial S_{0}}{\partial t} \qquad (\text{Hamilton-Jacobi})$$

$$\hbar^{1}: \qquad \frac{1}{m}(\vec{\nabla}S_{0}\cdot\vec{\nabla}S_{1}) - \frac{1}{2m}\Delta S_{0} = -\frac{\partial S_{1}}{\partial t}$$

$$\hbar^{2}: \qquad \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S_{1})^{2} + \frac{1}{m}(\vec{\nabla}S_{0}\cdot\vec{\nabla}S_{2}) - \frac{1}{2m}\Delta S_{1} = -\frac{\partial S_{2}}{\partial t}$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

 $\Rightarrow$  Iteratives Lösungsverfahren für die Wellenfunktion!

# III.9. Die Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Methode

Quasiklassische Bestimmung der stationären Lösung der Schrödingergleichung. Dieses Verfahren ist am transparentesten im (effektiv) eindimensionalen Fall:

$$i\hbar\partial_t u(\rho,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{\rho}^2 + \overline{V}(\rho)\right]u(\rho,t)$$

Betrifft sowohl eindimensionale Systeme:

$$\rho = x \qquad u(\rho) = \psi(x) \qquad \overline{V}(\rho) = V(x) \qquad (\text{III.75})$$

als auch dreidimensionale Systeme in Zentralfeldern mit effektivem eindimensionalem Schrödingerproblem:

$$\rho = r \qquad \qquad u(\rho) = rR(r) \qquad \qquad \overline{V}(\rho) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \qquad (\text{III.76})$$

wobe<br/>iR(r)den Radialanteil der Wellenfunktion<br/>  $\psi(\vec{x},t)$  bezeichnet. Stationäre Lösungen:

$$u(\rho, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}u(\rho)$$

$$u''(\rho) + k^{2}(\rho)u(\rho) = 0$$

$$k^{2}(\rho) = \frac{2m}{\hbar^{2}} \left(E - \overline{V}(\rho)\right)$$
(III.77)

mit

 $\Rightarrow$ 

## III. Näherungsmethoden

Quasiklassischer Ansatz:

$$u(\rho) = c \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}W(\rho)\right]$$
$$W(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} (i\hbar)^n W_n(\rho)$$
$$\Rightarrow \qquad W'(\rho)^2 - (i\hbar)W''(\rho) = \hbar^2 k^2(\rho)$$
(III.78)

$$\hbar^{0}: \qquad W_{0}^{\prime 2} - \hbar^{2} k^{2}(\rho) = 0 \qquad \text{n.b.:} \ \hbar^{2} k^{2}(\rho) \sim \mathcal{O}(\hbar^{0})$$
  
 
$$\hbar^{1}: \qquad i \hbar (2W_{0}^{\prime} W_{1}^{\prime} - W_{0}^{\prime \prime}) = 0$$

$$\hbar^{2}: \qquad -\hbar^{2}(W_{1}^{\prime 2} + 2W_{0}^{\prime}W_{2}^{\prime} - W_{1}^{\prime \prime}) = 0 \qquad (\text{III.79})$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

• Lösung nullter Ordnung:

$$W_0(\rho) = \pm \hbar \int^{\rho} d\rho' \, k(\rho') + c_1$$

(unbestimmtes Integral mit Integrationskonstante  $c_1$ )

• Lösung erster Ordnung:

 $\Rightarrow$ 

$$W_{1}'(\rho) = \frac{1}{2} \frac{W_{0}''(\rho)}{W_{0}'(\rho)} = \frac{1}{2} \frac{k'(\rho)}{k(\rho)}$$

$$W_{1}(\rho) = \ln \sqrt{k(\rho)} + c_{2}$$
(III.80)

Somit folgen die zwei Lösungen für  $u(\rho)$ :

$$u_{\pm}(\rho) = \frac{c_{\pm}}{\sqrt{k(\rho)}} \exp\left[\pm i \int d\rho' \, k(\rho') + \mathcal{O}(\hbar)\right]$$

Die allgemeine Lösung in der WKB-Näherung ist Superposition:

$$u(\rho) = \frac{c_+}{\sqrt{k(\rho)}} \exp\left[i\int^{\rho} d\rho' \, k(\rho')\right] + \frac{c_-}{\sqrt{k(\rho)}} \exp\left[-i\int^{\rho} d\rho' \, k(\rho')\right]$$
(III.81)

٦

Für eine Potentialmulde erhalten wir eine Situation wie in Abbildung III.5.

Bedingung: 
$$\lambda(\rho) = \frac{2\pi}{|k(\rho)|} = \left|\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - V(\rho))}}\right| \ll \Delta V$$
(III.82)

- Ist *erfüllt* im Inneren des klassisch erlaubten Gebietes und für  $\rho \to \pm \infty$  im klassischen verbotenen Bereich.
- Ist nicht erfüllt an den klassischen Wendepunkten V(a) = E und V(b) = E, da dort  $\lambda(\rho) \to \infty$ !

•



Abbildung III.5.: WKB-Näherung für eine Potentialmulde



Abbildung III.6.: Muldenpotential mit klassischen Wendepunkten eines Bindungszustands mit Energie ${\cal E}$ 

**Problem der Anschlussbedingungen:** Für einen Bindungszustand einer Potentialmulde liegt eine Situation wie in Abbildung III.6 vor.

$$\rho \gg a: \qquad \qquad \psi(\rho) = \frac{c}{\sqrt{|k(\rho)|}} \exp\left[-\int^{\rho} d\rho' |k(\rho')|\right] \\ E < V(\rho) \Rightarrow k = i|k| \\ 0 < \rho \ll a: \qquad \qquad \psi(\rho) = \frac{c_1}{\sqrt{k(\rho)}} \exp\left[i\int^{\rho} d\rho' |k(\rho')|\right] + \frac{c_2}{\sqrt{k(\rho)}} \exp\left[-i\int^{\rho} d\rho' |k(\rho')|\right] \\ E > V(\rho) \Rightarrow k \in \mathbb{R}$$
(III.83)

Bestimmung von Beziehung zwischen Koeffizienten  $c_1, c_2$  und c über Anschlussbedingungen bei  $\rho \simeq a$  nicht möglich, da WKB-Näherung bei  $\rho \simeq a$  zusammenbricht. D.h. wir kennen die stationäre Wellenfunktion  $\psi(\rho = a)$  dort nicht. Zunächst lässt sich in der Nähe von  $\rho = a$  das Potential linear nähern.

$$-E + \overline{V}(\rho) \approx F_0 \cdot (\rho - a) + \mathcal{O}((\rho - a)^2)$$
(III.84)

Diesen Ansatz setzen wir analytisch in  $\rho$  fort: Wir erweitern formal die reelle Ortskoordinate  $\rho$  nach C. Dann lässt sich aus dem klassisch verbotenen Gebiet über Weg I bzw. Weg II in das klassisch erlaubte Gebiet übergehen, *ohne* die Gültigkeit der WKB-Näherung zu verlassen. Die Integrationswege sind in Abbildung III.7 dargestellt. Dabei sind die Wege so gewählt, dass die lineare Näherung für  $-E + \overline{V}(\rho)$  gültig ist. Das heißt im klassisch verbotenen Bereich  $\rho \gg a$  ist

$$|k(\rho)| \simeq \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}} (\rho - a)^{1/2}$$
$$\int^{\rho} d\rho' \ |k(\rho')| = \sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}} \frac{2}{3} (\rho - a)^{3/2}$$
(III.85)

#### III. Näherungsmethoden



Abbildung III.7.: Komplexe Integrationswege zum Übergang vom klassisch erlaubten in das klassisch verbotene Gebiet

in der Nähe von  $\rho = a$  mit  $\rho > a$  ist deshalb

$$\psi(\rho) = \frac{\tilde{c}}{(\rho - a)^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}(\rho - a)^{3/2}\sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar^2}}\right]$$
(III.86)  
$$\tilde{c} = \left(\frac{\hbar^2}{2mF_0}\right)^{1/4} c$$

 $\operatorname{mit}$ 

Nun verfolgen wir diese Funktion entlang Weg I:

$$(\rho - a) =: |\rho - a|e^{i\phi} \qquad \phi \in [0, \pi]$$
$$(\rho - a)^{3/2} = |\rho - a|^{3/2} e^{i\frac{3}{2}\phi}$$

 $\Rightarrow$ 

$$(\rho - a)^{-1/4} = |\rho - a|^{-1/4} e^{-i\frac{1}{4}\phi}$$
(III.87)

Die analytische Fortsetzung von (III.86) entlang Weg I in den klassisch erlaubten Bereich  $b < \rho < a$  liefert ( $\phi \rightarrow \pi$  und  $e^{\frac{3}{2}\pi i} = -i$ ):

$$\psi(\rho) = \frac{\tilde{c}}{|\rho - a|^{1/4}} e^{-i\pi/4} \exp\left[i\frac{2}{3}|\rho - a|^{3/2}\sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar}}\right]$$
(III.88)

Vergleich mit (III.83) ergibt:

$$c_1 = c \ e^{-i\pi/4}$$
 (III.89)

Wählt man die analytische Fortsetzung entlang Weg 2 folgt hingegen:

$$\psi(\rho) = \frac{\tilde{c}}{|\rho - a|^{1/4}} e^{-i\pi/4} \exp\left[-i\frac{2}{3}|\rho - a|^{3/2}\sqrt{\frac{2mF_0}{\hbar}}\right]$$

$$c_2 = c \ e^{i\pi/4}$$
(III.90)

 $\Rightarrow$ 

Somit folgt für die Form der Wellenfunktion im klassisch erlaubten Bereich:

$$\psi(\rho) = \frac{c}{\sqrt{k(\rho)}} \cos\left[\int_{a}^{\rho} d\rho' \, k(\rho') - \frac{\pi}{4}\right]$$
(III.91)

Am anderen Umkehrpunkt  $\rho = b$  ergibt sich durch Spiegelung von (III.91):

$$\psi(\rho) = \frac{c'}{\sqrt{k(\rho)}} \cos\left[\int_{\rho}^{b} d\rho' \, k(\rho') - \frac{\pi}{4}\right]$$
$$= \frac{c'}{\sqrt{k(\rho)}} \cos\left[\int_{a}^{\rho} d\rho' \, k(\rho') - \left(\int_{a}^{b} d\rho' \, k(\rho') - \frac{\pi}{4}\right)\right]$$
(III.92)

Die Bedingung, dass diese beiden Ausdrücke bis auf ein beliebiges Vorzeichen übereinstimmen, führt auf die Phasenbedingung

$$\int_{a}^{b} d\rho' k(\rho') = \frac{\pi}{2} + n \cdot \pi \qquad n \in \mathbb{Z}$$
(III.93)

Mit dem Impuls  $p(\rho) = \hbar k(\rho) = \sqrt{2m|\overline{V}(\rho) - E|}$  folgt:

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_{a}^{b} d\rho \, p(\rho) = n + 1/2 \tag{III.94}$$

was einen Spezialfall der BOHR-SOMMERFELD-QUANTISIERUNGSBEDINGUNG

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\oint dx\,p(x) = n + 1/2 \tag{III.95}$$

darstellt. Diese wurde bereits von Bohr 1913 bzw. Sommerfeld 1916 als Vorbote der Quantentheorie postuliert.

Aus dieser Formel lassen sich die Energieniveaus der Bindungszustände approximativ bestimmen. Die Näherung ist gut für große n, das heißt hohe Anregungen bzw. den semiklassischen Bereich.

Die Resultate sind in Abbildung III.8 zusammengefasst.



$$\psi(\rho) = \frac{c}{\sqrt{k(\rho)}} \cos\left[\int_{a}^{\rho} d\rho' \ k(\rho') - \frac{\pi}{4}\right]$$

 $\psi(\rho) = rac{c}{\sqrt{k(
ho)}} \exp\left[-\int\limits_{-\infty}^{
ho} d
ho' |k(
ho')|
ight]$ 

Bereich II:

Abbildung III.8.: Zusammenfassung: WKB-Näherung

# IV. Quantentheorie bei unvollständiger Information über den Systemzustand

## IV.1. Phasenraumdichte in der klassischen statistischen Mechanik

In der klassischen Mechanik wird der Zustand eines (Vielteilchen-)Systems durch einen *Phasenraum*punkt  $(x_1, \ldots, x_s, p_1, \ldots, p_s)$  bestimmt (Abbildung IV.1a).

Für makroskopische Systeme (Ideales Gas, Festkörper) ist die Kenntnis des exakten Zustands jedoch meist unmöglich, zum Beispiel lassen sich nicht alle  $10^{23}$  Koordinaten eines makroskopischen Systems mit großer Genauigkeit angeben. Stattdessen kann man Aussagen über die Wahrscheinlichkeit des Aufenthalts des Systems in bestimmten Phasenraumbereichen machen. Es liegt ein sogenannter gemischter Zustand vor (Abbildung IV.1b).

 $\rho$  ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das System im Phasenraumpunkt  $(x_1, \ldots, x_s, p_1, \ldots, p_s)$  befindet;  $0 \le \rho(x_1, \ldots, x_s, p_1, \ldots, p_s)$ . Es gilt demnach

$$1 = \int dx_1 \cdots dx_s dp_1 \cdots dp_s \rho(x_1, x_2, \dots, x_s, p_1, p_2, \dots, p_s)$$
(IV.1)

Beispiele:

i) System ist irgendwo im Bereich B: 
$$\rho = \begin{cases} const & \text{in B} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

- ii) System hat Gesamtenergie  $E_0$  ("mikrokanonische Gesamtheit"):  $\rho = A \cdot \delta(E E_0)$
- iii) Reiner Zustand:  $\rho = \delta(x_1 x_1^0)\delta(x_2 x_2^0)\cdots\delta(p_1 p_1^0)\cdots\delta(p_s p_s^0)$



Abbildung IV.1.: Klassische Zustände  $\rho = \rho(x_1, \dots, x_s, p_1, \dots, p_s)$ : "Phasenraumdichte"

Bei einer Messungen der klassischen Größe  $\mathcal{L}$  in einem gemischten Zustand gilt für den Mittelwert:

$$\langle \mathcal{L} \rangle = \int dx_1 \cdots dx_s dp_1 \cdots dp_s \ \rho(x_1, \dots, x_s, p_1, \dots, p_s) \mathcal{L}(x_1, \dots, x_s, p_1, \dots, p_s)$$

## IV.2. Quantentheorie eines gemischten Zustands

In der Quantentheorie ist das Äquivalent eines Phasenraumpunktes als reiner Zustand der Zustandsvektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , der sich aus der Messung eines vollständigen Satzes kommutierender Observablen bestimmen lässt. Bei einem makroskopischen System bestehend aus vielen Teilchen (etwa einem Atomstrahl oder Festkörper) ist dies realistisch nicht möglich. Vielmehr ist nur die Messung einer Reihe von hochgradig entarteten Observablen, etwa der Energie, des Drucks, der Magnetisierung, etc. möglich. Demnach muss den Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantentheorie eine zweite Statistik übergestülpt werden, die unsere Unkenntis über den Systemzustand quantifiziert:

Wir betrachten einen Satz von Zustandsvektoren  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_\alpha\rangle, \ldots\}$ , die jeweils mit der Wahrscheinlichkeit  $\{p_1, p_2, \ldots, p_\alpha, \ldots\}$  vorliegen. Es gilt:

$$0 \le p_{\alpha} \le 1 \qquad \qquad \sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1$$

Die  $|\psi_{\alpha}\rangle$  sind normiert aber nicht notwendigerweise orthogonal. Für den Erwartungswert der Observablen  $\hat{\mathcal{L}}$  gilt dann:

$$\langle \hat{\mathcal{L}} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \hat{\mathcal{L}} \rangle_{\alpha} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \psi_{\alpha} | \hat{\mathcal{L}} | \psi_{\alpha} \rangle$$
  
= 
$$\sum_{\alpha} p_{\alpha} \operatorname{Sp}(\hat{P}_{|\psi_{\alpha}\rangle} \hat{\mathcal{L}})$$
 (IV.2)

mit  $\hat{P}_{|\psi_{\alpha}\rangle} = |\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}|$ 

## IV.3. Der statistische Operator

(IV.2) legt Definition des statistischen Operators  $\hat{\rho}$  nahe: **Definition IV.3.1** (Statistischer Operator).

$$\hat{\rho} := \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle\psi_{\alpha}| = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \hat{P}_{|\psi_{\alpha}\rangle}$$
(IV.3)

Der statistische Operator ist das quantentheoretisches Analogon zur klassischen Phasenraumdichte  $\rho(x_1, \ldots, x_s, p_1, \ldots, p_s)$ .

• Matrixelemente von  $\hat{\rho}$  in beliebiger Basis  $|k\rangle$  lauten:

$$\rho_{kk'} = \langle k | \hat{\rho} | k' \rangle \qquad "Dichtematrix" \qquad (IV.4)$$

• Diagonalelemente der Dichtematrix sind positiv:

$$\rho_{kk} = \langle k | \hat{\rho} | k \rangle$$
$$= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle k | \psi_{\alpha} \rangle \langle \psi_{\alpha} | k \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} | \langle k | \psi_{\alpha} \rangle |^{2} \ge 0$$
(IV.5)

• Im reinen Fall ist

$$p_{\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{für } \alpha = I \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$
$$\hat{\rho}_{\text{rein}} = |\psi_I\rangle \langle \psi_I| = \hat{P}_{|\psi_I\rangle} \tag{IV.6}$$

 $\Rightarrow$ 

• Erwartungswert der Observablen  $\hat{\mathcal{L}}$ :

$$\langle \hat{\mathcal{L}} \rangle = \operatorname{Sp}(\hat{\rho}\hat{\mathcal{L}})$$
 (IV.7)

• Wahrscheinlichkeit für das Eintreten des Messwertes  $\Lambda$ :  $\hat{\mathcal{L}}|\Lambda\rangle = \Lambda|\Lambda\rangle$ :

$$W_{\Lambda} = \langle \hat{P}_{|\Lambda\rangle} \rangle = \operatorname{Sp}(\hat{\rho}\hat{P}_{|\Lambda\rangle})$$
 (IV.8)

## Eigenschaften des statistischen Operators

- $\operatorname{Sp}(\hat{\rho}) = 1$
- $0 \le \rho_{kk} \le 1$
- Sp(ρ<sup>2</sup>) < 1 und ρ<sup>2</sup> ≠ ρ falls p<sub>α</sub> ≠ 0 für mehr als ein α, das heißt es liegt kein reiner Zustand vor.
   Beweis:

$$Sp(\rho^{2}) = \sum_{n} \langle n | \sum_{\alpha} p_{\alpha} | \psi_{\alpha} \rangle \langle \psi_{\alpha} | \sum_{\beta} p_{\beta} | \psi_{\beta} \rangle \langle \psi_{\beta} | n \rangle$$
$$= \sum_{n,\alpha,\beta} p_{\alpha} p_{\beta} \langle \psi_{\alpha} | \psi_{\beta} \rangle \langle \psi_{\beta} | n \rangle \langle n | \psi_{\alpha} \rangle$$
$$= \sum_{\alpha,\beta} p_{\alpha} p_{\beta} | \langle \psi_{\alpha} | \psi_{\beta} \rangle |^{2}$$
$$< \sum_{\alpha,\beta} p_{\alpha} p_{\beta} = \left(\sum_{\alpha} p_{\alpha}\right)^{2} = 1$$

• 
$$\hat{\rho}^{\dagger} = \hat{\rho}$$
  
Beweis:

$$Sp(\hat{\rho}) = \sum_{n} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle n | \psi_{\alpha} \rangle \langle \psi_{\alpha} | n \rangle$$
$$= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \psi_{\alpha} | \sum_{n} | n \rangle \langle n | \psi_{\alpha} \rangle$$
$$= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \psi_{\alpha} | \psi_{\alpha} \rangle$$
$$= \sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1$$

## IV.4. von-Neumann Gleichung

Wir suchen eine dynamische Gleichung für die zeitliche Entwicklung des statistischen Operators. Die individuellen Zustandsvektoren  $|\psi^{\alpha}\rangle$  genügen der Schrödingergleichung:

$$\begin{split} & i\hbar\partial_t |\psi_{\alpha}(t)\rangle = \hat{H} |\psi_{\alpha}(t)\rangle \\ \Rightarrow & -i\hbar\partial_t \langle\psi_{\alpha}(t)| = \langle\psi_{\alpha}(t)|\hat{H} \end{split}$$

Daraus folgt:

$$i\hbar\partial_t\hat{\rho} = i\hbar\sum_{\alpha} \left(\dot{p}_{\alpha}|\psi_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}| + p_{\alpha}|\dot{\psi}_{\alpha}\rangle\langle\psi_{\alpha}| + p_{\alpha}|\psi_{\alpha}\rangle\langle\dot{\psi}_{\alpha}|\right)$$
(IV.9)

Da sich an unserer Kenntnis über den Systemzustand ohne Messung nichts ändern kann ist  $\dot{p}_{\alpha} = 0$ .

$$\Rightarrow \qquad i\hbar\partial_t \hat{\rho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \hat{H} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| + p_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| \hat{H}$$
  
$$\Rightarrow \qquad i\hbar\partial_t \hat{\rho}(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}] \qquad \text{,von-Neumann Gleichung"} \qquad (IV.10)$$

Die zeitliche Entwicklung des statistischen Operators im Schrödingerbild lässt sich mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators t = t

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathcal{T}\left\{\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right]\right\}$$
(IV.11)

angeben:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}(t, t_0)^{\dagger} = \hat{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}(t_0, t)$$
(IV.12)

Insbesondere ist dann Sp( $\hat{\rho}^2$ ) zeitunabhängig, weswegen ein reiner (gemischter) Zustand rein (gemischt) bleibt:

Beweis:

$$Sp(\hat{\rho}^{2}(t)) = Sp(U(t,t_{0})\hat{\rho}(t_{0})\underbrace{U(t_{0},t)U(t,t_{0})}_{=1}\hat{\rho}(t_{0})U(t_{0},t))$$
$$= Sp(\hat{\rho}^{2}(t_{0}))$$
(IV.13)

und

$$1 = \text{Sp}(\hat{\rho}^{2}(t_{0})) = \text{Sp}(\hat{\rho}^{2}(t))$$
(IV.14)

Das heißt, ein reiner (gemischter) Zustand bleibt rein (gemischt) in der zeitlichen Entwicklung.

Im Heisenbergbild ist der statistische Operator zeitlich konstant:

$$\hat{\rho}^{\rm H}(t) = U^{\dagger}(t, t_0)\hat{\rho}(t)U(t, t_0) = \hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}^{\rm H}(t_0)$$
(IV.15)

Der Erwartungswert einer Observablen ist in beiden Bildern identisch:

$$\langle \hat{A} \rangle = \operatorname{Sp}(\hat{\rho}(t)\hat{A})$$
 (Schrödingerbild) (IV.16)

$$= \operatorname{Sp}(\hat{\rho}^{\mathrm{H}}(t)\hat{A}^{\mathrm{H}}(t))$$
 (Heisenbergbild) (IV.17)

mit  $\hat{\rho}^{\mathrm{H}}(t) = \hat{\rho}(t_0)$  und  $\hat{A}^{\mathrm{H}}(t) = U^{\dagger}(t, t_0)\hat{A}U(t, t_0).$ 

## IV.5. Einige Spezielle statistische Operatoren

i) Komplette Unkenntnis über den Zustand des Systems:

$$\hat{\rho} = \frac{\mathbb{1}}{\operatorname{Sp}(\mathbb{1})}$$

ii) Bei einem System mit kontinuierlichen Energiewerten sei die Gesamtenergie bekannt ("mikrokanonische Gesamtheit"):

$$\hat{\rho} = \frac{\delta(H - E_0 \mathbb{1})}{\operatorname{Sp}(\delta(\hat{H} - E_0 \mathbb{1}))}$$

iii) System befindet sich im thermischen Gleichgewicht mit dem Temperatur T ("kanonische Gesamtheit"):

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta H}}{\operatorname{Sp}(e^{-\beta \hat{H}})}$$

mit  $\beta = \frac{1}{k_{\rm B}T}$ ,  $k_{\rm B}$ : Boltzmannkonstante

## IV.6. Quantenrealität: Das EPR-Paradoxon

"Gott würfelt nicht." Albert Einstein

Vielen Physikern behagt(e) die nicht-deterministische, intrinsisch probabilistische Natur der Quantenmechanik nicht.

Einstein-Podolsky-Rosen (1935) zeigten auf, dass QM das *Lokalitätsprinzip* der Physik verletzt. Modifiziertes Argument nach Bohm: Zerfall eines neutralen Pions mit Spin 0 in ein Elektron und ein Positron.

$$\begin{array}{c}
 \pi^{0} \rightarrow e^{-} + e^{+} \\
 \text{Detektor} \begin{bmatrix} \overleftarrow{e^{-}} & \pi_{0} & e^{+} \\
 & \bullet & & & \\
 & \text{Alice} & & & \text{Bob} \\
\end{array}$$

 $\pi^0$  sei in Ruhe  $\rightarrow e^+$  und  $e^-$  fliegen in entgegengesetzte Richtungen. Die Spins des  $e^+-e^-$  Systems müssen in der Singulett Konfiguration vorliegen (Addition von 2 Spin <sup>1</sup>/<sub>2</sub> Systemen).

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_{e^{-}}|\downarrow\rangle_{e^{+}} - |\downarrow\rangle_{e^{-}}|\uparrow\rangle_{e^{+}}\right)$$

Alice misst Spin von e<sup>-</sup>, Bob misst Spin von e<sup>+</sup>, beide räumlich separiert.

• Messung  $\hat{S}_z$  von e<sup>-</sup>:

$$p = 0.5 \qquad S_z = +\hbar/2$$
$$p = 0.5 \qquad S_z = -\hbar/2$$

• Jedoch Messung  $\hat{S}_z$  von e<sup>+</sup> korreliert mit Messung von e<sup>-</sup>: Ergebnis  $(\hat{S}_z)_{e^+} = -(\hat{S}_z)_{e^-}$ .

#### IV. Quantentheorie bei unvollständiger Information über den Systemzustand

• Grund: Zustandsreduktion bei Messung ("Kollaps der Wellenfunktion")

$$(\hat{S}_{z})_{e^{+}} \xrightarrow{h/2} p = 0, 5$$

$$(\hat{S}_{z})_{e^{-}} \xrightarrow{h/2} p = 0, 5$$

$$(\hat{S}_{z})_{e^{-}} \xrightarrow{h/2} p = 0, 5$$

$$(\hat{S}_{z})_{e^{-}} \xrightarrow{h/2} p = 0, 5$$

$$(\hat{S}_{z})_{e^{+}} \xrightarrow{h/2} p = 1, 0 |+\rangle_{e^{+}} |+\rangle_{e^{+}}$$

Messapparationen  $(\hat{S}_z)_{e^-}$  und  $(\hat{S}_z)_{e^+}$  können räumlich beliebig weit entfernt sein! Dennoch beeinflusst die Messung von Alice *instantan* den Zustand des Systems auch bei Bob! Insbesondere kann Bob beliebig kurz nach Alice messen, kürzer als Laufzeit von Licht Alice  $\rightarrow$  Bob!  $\Rightarrow$  Nichtlokalität "Spukhafte Fernwirkung" A. Einstein

- Kein Widerspruch zur Speziellen Relativitätstheorie: Es findet keine Informationsübertragung mit Überlichtgeschwindigkeit von Alice zu Bob statt. Alice hat keinen Einfluss auf Ausgang ihrer Messung → Das Ergebnis kann nicht zur Informationsübertragung genutzt werden.
- *Entscheidend:* Herstellung eines verschränkten Zustands über große räumliche Distanzen. Gelingt experimentell extrem gut mit verschränkten Photonen.

## IV.7. Die Bell'sche Ungleichung

EPR (und viele andere Kritiker) zweifeln nicht an der *Korrektheit* der Quantenmechanik, sondern an deren *Vollständigkeit*.

Absatz "Behauptung einer Theorie versteckter Variablen" weglassen?

BELL konnte mit folgendem Argument zeigen, dass *jede* beliebige Theorie mit verborgenen Variablen inkompatibel zur Quantenmechanik ist!

• Verallgemeinerung des EPR-Bohm Experiments



Wir messen den Mittelwert der Spinkorrelationen  $P(a,b) = \frac{4}{\hbar^2} \langle (\vec{a} \cdot \vec{S}_A) (\vec{b} \cdot \vec{S}_B) \rangle$ .

			Bei gleich ausgerichteten Polarisationen liegt
A	B	Produkt	ein gewöhnliches EPR-Experiment vor:
1 1 _1	-1 1 -1	-1 1 1	$P(ec{a},ec{a})=-1$
:	:	:	

Ebenso bei anti-parallelen Polarisationen  $P(\vec{a}, -\vec{a}) = 1 \leftrightarrow$  Spinerhaltung.

Allgemeine Lösung (siehe Übung) für beliebige  $\vec{a} \& \vec{b}$ :

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \left\langle 0, 0 \mid (\vec{a} \cdot \vec{S}_a)(\vec{b} \cdot \vec{S}_b) \mid 0, 0 \right\rangle$$
(IV.18)

Wir zeigen nun, dass dies *inkompatibel* mit jeder lokalen Theorie unter Zuhilfenahme versteckter Variabler ist!

In einer lokalen, deterministischen Theorie (LDT) existieren Variable  $\lambda$  die den Zustand von e<sup>+</sup> & e<sup>-</sup> vollständig beschreiben. Diese wurden bereits beim Zerfall von  $\pi^0$  festgelegt.

Alice und Bob messen *unabhängig* voneinander den Zustand von e<sup>-</sup> respektive e<sup>+</sup>. Dann gibt es eine Funktion  $A(\vec{a}, \lambda)$ , die den Ausgang der  $(\vec{a} \cdot \vec{S}_{A})$  Messung am e<sup>-</sup>, sowie  $B(\vec{b}, \lambda)$ , die den Ausgang der  $(\vec{b} \cdot \vec{S}_{B})$  Messung angibt:

$$A(\vec{a},\lambda) = \pm 1$$
  $B(\vec{b},\lambda) = \pm 1$ 

• Wenn  $\vec{b} = \vec{a}$  sind die Ergebnisse wegen der Spinerhaltung perfekt antikorreliert:

$$A(\vec{a},\lambda) = -B(\vec{a},\lambda) \tag{IV.19}$$

• Mittelwert der Messungen in einer LDT:

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda \, \rho(\lambda) \, A(\vec{a}, \lambda) \, B(\vec{b}, \lambda)$$

 $\rho(\lambda)$ : Wahrscheinlichkeitsdichte für verborgene Variablen mit  $\rho(\lambda) \ge 0$  und  $\int d\lambda \rho(\lambda) = 1$ . Analog zur *Phasenraumdichte* in der klassischen Beschreibung eines Gemischs!

• Mit (IV.19) folgt:

$$P(\vec{a},\vec{b}) = -\int d\lambda \,\rho(\lambda) \,A(\vec{a},\lambda) \,A(\vec{b},\lambda)$$

Für beliebigen dritten Einheitsvektor  $\vec{c}$  gilt:

$$P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{c}) = -\int d\lambda \,\rho(\lambda) \left[ A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda) - A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right]$$
$$= -\int d\lambda \,\rho(\lambda) \left[ 1 - A(\vec{b}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right] A(\vec{a}, \lambda) A(\vec{b}, \lambda)$$

wegen  $A(\vec{a},\lambda)^2 = 1$ . Nun ist  $\left[1 - A(\vec{b},\lambda)A(\vec{c},\lambda)\right] \ge 0$  und  $A(\vec{a},\lambda)A(\vec{b},\lambda) = \pm 1$ 

$$\Rightarrow \qquad \left| P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{c}) \right| \le \int d\lambda \, \rho(\lambda) \left[ 1 - A(\vec{b}, \lambda) A(\vec{c}, \lambda) \right]$$

bzw.

$$|P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{c})| \le 1 + P(\vec{b}, \vec{c})$$
 (IV.20)

Bell'sche Ungleichung für Spin-Spin-Korrelationsfunktion einer LDT

Dies steht im Widerspruch zur Quantentheorie mit (IV.18):

$$P(\vec{a},\vec{b}) = -\vec{a}\cdot\vec{b}$$

Da: Sei  $\vec{a} \perp \vec{b}$  und  $\vec{a} \cdot \vec{c} = \vec{b} \cdot \vec{c} = \cos \pi/4$ 



Das heißt die Korrektheit der Quantenmechanik lässt sich experimentell durch Messung von  $\langle (\vec{a} \cdot \hat{S}_z)_{e^-} (\vec{b} \cdot \hat{S}_z)_{e^+} \rangle \rangle$  überprüfen:

Was soll denn dieser letzte Ausdruck bedeuten? Sieht aus wie Skalarprodukt von Vektor mit Komponente???

Aspeit, Grangier, Roger "Experimental realization von the EPR Gedankenexperiment", PRL <u>49</u>, 91-94, (1982).

Ergebnis:  $QM \checkmark$ , Versteckte Variablen ×

**Verschränkung** Entscheidend im EPR Paradoxon ist die Verschränkung der Spinzustände von Alice und Bob:

2-Spin System mit  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \text{Span}\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$  ist im Zustand:

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

Erster Spin gehöre Alice, zweiter Spin gehöre Bob.

Frage: In welchem Zustand ist Alice Spin?

**Antwort:** Alice Spin befindet sich in keinem *reinen* Zustand sondern liegt als Gemisch mit statistischem Operator  $\hat{\rho}_{A} = \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| + \frac{1}{2} |-\rangle \langle -|$  vor.

**Beweis:** 

$$\rho_{\text{tot}} = |0,0\rangle\langle 0,0| \qquad = \frac{1}{2} (|+-\rangle\langle +-|+|-+\rangle\langle -+|-|+-\rangle\langle -+|-|-+\rangle\langle +-|)$$

Reiner Zustand in  $\mathcal{H}$ ! Statistischer Operator für Alice durch Spurbildung über  $\mathcal{H}_2$ :

$$\hat{\rho}_{\mathrm{A}} = \mathrm{Sp}_{2}(\hat{\rho}_{\mathrm{tot}}) = \sum_{m=\pm} {}_{2}\langle m | \hat{\rho}_{\mathrm{tot}} | m \rangle_{2} = \frac{1}{2} \left( |+\rangle \langle +|+|-\rangle \langle -| \right) \qquad \Box$$

Ebenso für Bob:

$$\hat{\rho}_{\rm B} = \operatorname{Sp}_1(\hat{\rho}_{\rm tot}) = \sum_{m=\pm 1} \langle m | \hat{\rho}_{\rm tot} | m \rangle_1 = \frac{1}{2} \left( |+\rangle \langle +|+|-\rangle \langle -| \right)$$

## **IV.8.** Quanteninformation

(auch: Quanteninformatik, Quantencomputing, ...)

• Kleinste Informationseinheit:

klassischer Computer Bit:  $b \in \{0, 1\} \rightarrow 2$  Zustände



Abbildung IV.2.: 2-Bitaddierer aus XOR und AND Gattern

**Quantencomputer:** Qubit:  $|b\rangle \in \{c_0|0\rangle + c_1|1\rangle\}$   $c_i \in \mathbb{C}$  mit  $c_i \sim z \cdot c_i, z \in \mathbb{C}$  beliebig.  $\rightarrow$  Kontinuum an Zuständen.  $\binom{c_0}{c_1} \in \mathbb{CP}^1$  = Blochsphäre

• Register:

klassischer Computer: N Bits

$$\left. \begin{array}{cccc} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 10 \\ & & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{array} \right\} 2^{N} \text{ Zustände kodiert durch } N \text{ Bits}$$

**Quantencomputer:** N Qubits

$$|\psi\rangle = c_{0...000}|0...00\rangle + \dots + c_{1...11}|1...11\rangle$$

Kontinuum an Zuständen  $[CP^{2^N-1}]$  kodiert durch  $2^N$  komplexe Zahlen. Aber: All diese  $c_i$  sind nicht gleichzeitig messbar (= auslesbar)! Dennoch können wir alle während der Rechnung benutzen.

Klassischer Computer Durchlaufen Algorithmen, die aus Eingaben deterministisch Ausgaben erzeugen. Bausteine: Logische Gatter.

 $b_1$	$b_2$	AND	XOR		
0	0	0	0		
0	1	0	1		
1	0	0	1		
1	1	1	0		

Damit kann zum Beispiel ein 2-Bitaddierer (Halbaddierer) gebaut werden (Abb. IV.2).

#### Quantencomputer

**Prinzip:** Quantengatter durch Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$  (unitärer Operator). Quantengatter müssen umkehrbar sein, das heißt,  $\hat{U} \cdot \hat{U}^{\mathrm{T}} = \mathbb{1}$ , im Gegensatz zum klassischen Computer.

**Qubit:** Realisiert durch Spin-1/2 System

$$|0\rangle = |\uparrow\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}$$
$$|1\rangle = |\downarrow\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$

## **Typisch Ein-Qubit Gatter**

- Pauli-z  $Z = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  Z $Z(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) = c_0|0\rangle - c_1|1\rangle$

## Typische Zwei-Qubit Gatter

• Kontrolliertes UErstes Qubit ist Testbit. • Kontrolliertes NOT Als Matrix  $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$  im  $\{|0,0\rangle, |0,1\rangle, |1,0\rangle, |1,1\rangle\}$ -Raum.

No-Cloning-Theorem Eine "Klonungsmaschine" wäre

$$\begin{array}{c|c} |\psi\rangle & & \\ \hline \hat{K} & & \\ |0\rangle & & \\ \hline & |\psi\rangle \end{array}$$
 für beliebiges  $|\psi\rangle$ 

mit  $\hat{K}$  = unitärer Operator. Es gibt  $\hat{K}$ s, die bestimmte Zustände klonen, z.B.  $|\psi\rangle = |0\rangle$  könnte mit  $\hat{K} = \mathbb{1}$  geklont werden.

Aber man kann zeigen, dass ein Operator  $\hat{K}$ , ein bestimmtes  $|\psi_0\rangle$  klonen kann, keine Zustände  $|\phi\rangle \neq |\psi_0\rangle$  klonen kann, die nicht orthogonal zu  $|\psi_0\rangle$  sind (also solche für die  $\langle \phi | \psi_0 \rangle \neq 0$ ).

Beweis:

$$\hat{K}|\psi_0 0\rangle = |\psi_0 \psi_0\rangle$$
$$\hat{K}|\phi 0\rangle = |\phi \phi\rangle$$

Inneres Produkt (unter Ausnutzung von  $\hat{K}^{\dagger}\hat{K} = \hat{1}$ )

$$\begin{array}{l} \langle \phi 0 | \psi_0 0 \rangle = \langle \phi \phi | \psi_0 \psi_0 \rangle \\ \langle \phi | \psi_0 \rangle = \left( \langle \phi | \psi_0 \rangle \right)^2 \quad (\text{weil } \langle 0 | 0 \rangle = 1) \\ \Rightarrow \quad \text{entweder } \underbrace{\langle \phi | \psi_0 \rangle = 0}_{\rightarrow |\phi\rangle \perp |\psi_0\rangle} \quad \text{oder } \underbrace{\langle \phi | \psi_0 \rangle = 1}_{\rightarrow |\phi\rangle = |\psi_0\rangle} \end{array}$$

**Bemerkung:** Wenn der Zustand  $|\psi\rangle$  bekannt ist, dann kann man ihn natürlich ein zweites mal herstellen, aber das ist kein klonen. Beim No-cloning Theorem geht es um *unbekannte* Zustände.

Aber: Einen unbekannten Zustand kann man zwar nicht klonen, aber man kann ihr teleportieren.

**Quantenteleportation** Alice habe ein Qubit (z.B. ein Spin-1/2-Teilchen) im (unbekannten) Zustand  $|\psi\rangle$ . Bob habe auch ein Qubit und möchte seinen in denselben Zustand  $|\psi\rangle$  versetzen. Was dabei mit Alices Qubit passiert ist den beiden egal. (Er kann sicherlich nicht im Zustand  $|\psi\rangle$  verbleiben, denn das widerspräche dem No-Cloning-Theorem.)

**Lösung:** Alices Qubit  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ . Alice und Bob haben zusätzlich noch ein verschränktes Qubit-Paar  $|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$ .

#### Gesamtsystem:

$$|\psi_{\text{tot}}\rangle = |\psi\rangle|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a|000\rangle + a|011\rangle + b|100\rangle + b|111\rangle)$$

Wende kontrolliertes-Nicht auf das mittlere Qubit an mit dem ersten Qubit als Kontrollbit:

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{tot}}\rangle' &= \text{CNOT} |\psi_{\text{tot}}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a|000\rangle + a|011\rangle + b|110\rangle + b|101\rangle) \end{aligned}$$

Wende Hadamard auf das erste Qubit an

$$\begin{split} |\psi_{\text{tot}}\rangle'' &= H |\psi_{\text{tot}}\rangle' \\ &= \frac{1}{2} \left( a |000\rangle + a |100\rangle + a |011\rangle + a |111\rangle \\ &\quad + b |010\rangle - b |110\rangle + b |001\rangle - b |101\rangle \right) \end{split}$$

Dies lässt sich auch schreiben als

$$\psi_{\text{tot}}\rangle'' = \frac{1}{2} \Big[ |00\rangle (a|0\rangle + b|1\rangle) + |01\rangle (a|1\rangle + b|0\rangle) + |10\rangle (a|0\rangle - b|1\rangle) + |11\rangle (a|1\rangle - b|0\rangle) \Big]$$

Nun misst Alice die ersten zwei Qubits (quasi  $\hat{S}_{1,z}\hat{S}_{2,z}).$ 

Falls sie 00 misst, sagt sie zu Bob:	"Mache nichts"
Falls sie 01 misst, sagt sie zu Bob:	"Wende X an"
Falls sie 10 misst, sagt sie zu Bob:	"Wende Z an"
Falls sie 11 misst, sagt sie zu Bob:	"Wende XZ an"

#### IV. Quantentheorie bei unvollständiger Information über den Systemzustand



Dieses Protokoll erfordert die Übertragung von zwei klassischen Bits Information, um ein Qubit zu teleportieren. Diese Tatsache bedeutet u.a., dass die Kausalität bewahrt bleibt. (Keine instantane Teleportation möglich.)

Theoretische Idee:	1993 Bennett, Brassard, Crépeau, Jozsa, Peres und Wootters
Erste Umsetzung:	1997 in Innsbruck, A. Zeilinger et al., $\approx 1 \mathrm{m}$ weit (Photon)
	2004: 600 m über die Donau
Rekord:	2012: 143 km zwischen den kanarischen Inseln La Palma und Teneriffa.

**Bell-Zustände** Verschränkte Zustände spielen in der Quanteninformatik eine zentrale Rolle. Wir kennen schon zwei Basen für den Hilbertraum zweier Spins  $\hat{=}$  Qubits:

Produktbasis	$\left\{  00 angle,  01 angle,  10 angle,  11 angle  ight\}$	mit $0 = up, 1 = down$
Gesamtspinbasis	$\{ 0,0\rangle, 1,1\rangle, 1,0\rangle, 1,-1\rangle$	$ l\rangle$ entspricht $ l,m\rangle$

Nun führen wir eine Basis aus verschränkten Zuständen ein:

Bell-Basis  $\{|\beta_{00}\rangle, |\beta_{01}\rangle, |\beta_{10}\rangle, |\beta_{11}\rangle\}$ 

$$\operatorname{mit} |\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$$
$$|\beta_{01}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle)$$
$$|\beta_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle)$$
$$|\beta_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle)$$

Alle drei Basen sind gleichwertig zur Beschreibung der Zustände in  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  und können durch unitäre Transformationen aufeinander abgebildet werden. Die Bell-Basis ist aber in der Hinsicht besonders, dass man jeden der Basis-Zustände in jeden anderen überführen kann durch eine Transformation, die *nur* auf  $\mathcal{H}_1$  wirkt (oder nur auf  $\mathcal{H}_2$ ). Diese Eigenschaft macht man sich in der "dichten Kodierung" zunutze  $\rightarrow$  siehe Übungsblatt 8.

**Deutsch-Algorithmus** (David Deutsch, \* 1953 Israel, jetzt England) Eine Münze hat zwei Seiten.

Gültige Münze:	eine Seite 0 (Kopf), eine Seite 1 (Zahl)
Ungültige Münze:	beide Seiten 0 oder beide Seiten 1.

 $\begin{array}{l} \text{Eine Münze kann durch eine Funktion } f: \{0,1\} \rightarrow \{0,1\}. \text{ Es gibt vier Typen von Münzen/Funktionen} \\ {}_{\{\text{Vorderseite}, \text{Rückseite}\}} \rightarrow \{0,1\}. \text{ Es gibt vier Typen von Münzen/Funktionen} \end{array}$ 

Vorderseite   Rückseite				0   1				
$M_1$	Kopf	Kopf	ungültig		$f_1$	0	0	konstant
$M_2$	Kopf	$\operatorname{Zahl}$	gültig	$\iff$	$f_2$	0	1	balanciert
$M_3$	Zahl	Kopf	gültig		$f_3$	1	0	balanciert
$M_4$	Zahl	Zahl	ungültig		$f_4$	1	1	konstant

Hierbei bedeutet "balanciert", dass gleich oft 0 wie 1 vorkommt.

Zu bestimmen, ob eine Münze gültig ist, ist äquivalent dazu, zu bestimmen, ob eine Funktion  $f : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$  balanciert ist. Klassisch muss man sich beide Seiten der Münze anschauen bzw. f zweimal aufrufen, um die Antwort zu finden. Der Deutsch-Algorithmus ist ein Protokoll für einen Quantenalgorithmus, der die Antwort mit nur einem Funktionsaufruf findet.

Zunächst bauen wir uns aus der Funktion f eine unitäre Transformation, die wir auf Qubits loslassen können. (Die Funktion f kann nur auf klassische Bits wirken. Man bedenke beispielsweise, dass ein konstantes f nicht umkehrbar ist.) Sei nun

$$u_f|x,y\rangle := |x,y \oplus f(x)\rangle$$
 wobei  $\oplus$  für XOR bzw. ",+ mod 2" steht

Der Algorithmus ist folgender



Beachte:  $u_f$ wird nur einmalaufgerufen! Warum funktioniert's? Sei $|\psi_0\rangle=|01\rangle$ der Anfangszustand. Dann

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= (H \otimes H)|\psi_0\rangle = \frac{1}{2} \big(|0\rangle + |1\rangle\big) \big(|0\rangle - |1\rangle\big) \\ &= \frac{1}{2} \big(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle\big) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= u_f |\psi_1\rangle = \frac{1}{2} \Big[ |0, \underbrace{0 \oplus f(0)}_{f(0)}\rangle - |0, 1 \oplus f(0)\rangle + |1, \underbrace{0 \oplus f(1)}_{f(1)}\rangle - |1, 1 \oplus f(1)\rangle \Big] \\ &= \frac{1}{2} \Big[ |0\rangle \underbrace{\left(|f(0)\rangle - |1 \oplus f(0)\rangle\right)}_{\dagger} + |1\rangle \underbrace{\left(|f(1)\rangle - |1 \oplus f(1)\rangle\right)}_{\ddagger} \Big] \end{aligned}$$

† und ‡ haben die Form  $|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle$ .

Nun gilt aber falls  $|f(x)\rangle = |0\rangle$ , dann  $|1 \oplus f(x)\rangle = |1\rangle$ falls  $|f(x)\rangle = |1\rangle$ , dann  $|1 \oplus f(x)\rangle = |0\rangle$ 

Das heißt  $|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle$  ist in jedem Fall proportional zur Differenz aus  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$ , und nur das globale Vorzeichen hängt von f(x) ab:

$$|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle = (-1)^{f(x)} [|0\rangle - |1\rangle]$$

Damit haben wir

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2} \left[ (-1)^{f(0)} |0\rangle + (-1)^{f(1)} |1\rangle \right] \left[ |0\rangle - |1\rangle \right]$$

Würden wir jetzt das Qubit messen, dann bekämen wir für egal welches f 50%  $|0\rangle$  und 50%  $|1\rangle$  ohne dabei irgendwas über f gelernt zu haben. Ganz anders ist die Situation, wenn wir vorher ein Hadamard-Gatter auf das erste Qubit, also auf  $|\psi_2\rangle_1 := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( (-1)^{f(0)} |0\rangle + (-1)^{f(1)} |1\rangle \right)$  anwenden.

$$\begin{aligned} H|\psi_2\rangle_1 &= \frac{1}{2} \Big[ (-1)^{f(0)} \big( |0\rangle + |1\rangle \big) + (-1)^{f(1)} \big( |0\rangle - |1\rangle \big) \Big] \\ &= \frac{1}{2} \Big[ \big( (-1)^{f(0)} + (-1)^{f(1)} \big) |0\rangle + \big( (-1)^{f(0)} - (-1)^{f(1)} \big) |1\rangle \Big] \\ &= \begin{cases} \pm |0\rangle & \text{für } f(0) = f(1) \text{ (konstant)} \\ \pm |1\rangle & \text{für } f(0) \neq f(1) \text{ (balanciert)} \end{cases} \end{aligned}$$

Wenn wir jetzt das erste Qubit messen, dann können wir schleißen:

 $\begin{array}{l} |0\rangle \Rightarrow f \text{ ist konstant (Münze ungültig)} \\ |1\rangle \Rightarrow f \text{ ist balanciert (Münze gültig)} \end{array}$ 

**Komplexität** Die Schwierigkeit von Problemen wir definiert als die Laufzeit von Algorithmen (Programmen), die diese Probleme lösen. Schritte, die nur eine konstante Anzahl Male durchlaufen werden müssen, sind dabei nicht so relevant. Ins Gewicht fallen Schleifen und Rekursionen. (vgl. klassische Münze  $2 \times$  hinschauen, Deutsch-Algorithmus  $1 \times$  hinschauen.)

Jedes Problem hat eine Eingabe. Sei die Größe der Eingabe charakterisiert durch die Anzahl Bits/Qubits N, die man benötigt um die Eingabe anzugeben. Dann interessieren wir uns für das asymptotische Wachstum der Laufzeit als Funktion von N.

- Such in einer unsortierten Liste mit  $M \sim 2^N$  Einträgen.
  - klassisch ~ $e^N \sim M$
  - Quantenal gorithmus nach Grover  $\sim e^{N/2} \sim \sqrt{M}$
- Faktorisierung von Zahlen der Größe $M\sim 2^N$ 
  - klassisch (naiv) ~  $\sqrt{M} \sim e^{N/2}$
  - Quanten<br/>algorithmus nach Shor $\sim N^3$

Literatur: Matthias Homeister: Quantum Computing verstehen.

# V. Relativistische Quantenmechanik

## Prinzipien der nichtrelativistischen Quantenmechanik

1.) Ein gegebenes physikalisches (Ein-)Teilchensystem wird durch einen Zustandsvektor  $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ ( $\mathcal{H}$ : Hilbertraum, das heißt ( $d \leq \infty$ )-dimensionaler unitärer Vektorraum) vollständig beschrieben. In Spin- und Ortsdarstellung lautet die Wellenfunktion:

$$\langle s, \vec{q} | \psi \rangle(t) = \psi(s, \vec{q}, t)$$
 "Wellenfunktion" (V.1)

Diese hat keine direkte physikalische Interpretation, aber die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\langle s, \vec{q} | \psi \rangle(t)|^2 = \psi^*(s, \vec{q}, t)\psi(s, \vec{q}, t) = \rho(s, \vec{q}, t) \ge 0$$
 (V.2)

besitzt diese.

2.) Physikalische Observablen sind durch lineare hermitische Operatoren in  $\mathcal{H}$  repräsentiert. Zum Beispiel der Impuls  $\hat{p}|x\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} |x\rangle$ . Das heißt, der Impuls in der Ortsdarstellung ist gegeben durch

$$\hat{p} \to \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$
 (V.3)

denn:

$$\langle x|\hat{p}|\varphi\rangle = \langle \hat{p}x|\varphi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\varphi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x)$$

3.) Mögliche Messwerte einer Observablen  $\hat{A}$  sind ihre Eigenwerte  $a_n$ :

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$
 (V.4)

Das Spektrum (die Werte der  $a_n$ ) kann diskret oder kontinuierlich sein.

4.) Entwicklungssatz: Ein vollständiger Satz von kommutierenden Operatoren  $\mathcal{O}_n$  mit  $n \in I$  und  $[\mathcal{O}_n, \mathcal{O}_m] = 0 \forall n, m \in I$  induziert ein Orthonormalsystem von  $\mathcal{H}$  über den Eigenkets  $|\psi_n\rangle$ :

$$\mathbb{1} = \sum_{n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \tag{V.5}$$

Das heißt:

$$|\psi\rangle = \sum_{n} c_n |\psi_n\rangle \quad \text{mit } c_n = \langle \psi_n |\psi\rangle$$
 (V.6)

- $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} = \int d^3q \, \sum_s \psi_n^*(\vec{q}, s) \psi_m(\vec{q}, s) \tag{V.7}$
- $\psi_n(\vec{q},s) = \langle \vec{q},s | \psi_n \rangle$  (V.8)

### V. Relativistische Quantenmechanik

5.) Das Messergebnis  $a_n$  bei einer Messung der Observablen  $\hat{A}$  für in System im Zustand  $|\psi\rangle$  stellt sich mit der Wahrscheinlichkeit  $|\langle a_n |\psi\rangle|^2 = w_{a_n}$  ein. Der Mittelwert vieler Messungen von  $\hat{A}$  ist durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{n} a_{n} |c_{n}|^{2}$$
(V.9)

gegeben.

6.) Die zeitliche Entwicklung eines physikalischen Systems kann durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben werden:

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$
 (V.10)

mit  $\hat{H}$ : Hamilton-Operator, für den  $\hat{H}^{\dagger} = \hat{H}$  gilt. Für abgeschlossene Systeme mit  $\frac{\partial}{\partial t}\hat{H} = 0$  gilt der Erhaltungssatz für die Wahrscheinlichkeit:

$$\frac{d}{dt} \int d^3q \sum_s \psi^*(s,\vec{q},t)\psi(s,\vec{q},t) = \int d^3q \sum_s (\dot{\psi}^*\psi + \psi^*\dot{\psi})$$

$$= \int d^3q \sum_s \frac{i}{\hbar} \Big[ (H\psi)^*\psi - \psi^*(H\psi) \Big] = 0 \quad (V.11)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte gilt:

$$\rho(\vec{q}, s, t) = \psi^*(\vec{q}, s, t)\psi(\vec{q}, s, t)$$
(V.12)

Beim Übergang zur *relativistischen Quantentheorie* wollen wir versuchen diese vertrauten sechs Prizipien beizubehalten.

## V.1. Elemente der speziellen Relativitätstheorie

Raum-Zeit-Koordinaten:

$$\begin{aligned} x^{\mu} &= (x^{0}, x^{1}, x^{2}, x^{3}) \\ &= (ct, x, y, z) \\ x^{\mu} : \text{ Kontravarianter Vektor} \\ x_{\mu} &= \eta_{\mu\nu}x^{\nu} \\ x^{\mu} &= (x_{0}, x_{1}, x_{2}, x_{3}) \\ &= (x^{0}, -x^{1}, -x^{2}, -x^{3}) \\ &= (ct, -x, -y, -z) \\ \text{mit} \quad \eta_{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & -1 \\ 0 & & -1 \\ 0 & & -1 \end{pmatrix} & \text{Metrischer Tensor} \\ \eta^{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & -1 \\ 0 & & -1 \\ 0 & & -1 \end{pmatrix} & \text{Inverser metrischer Tensor} \\ \eta^{\mu\nu}\eta_{\nu\rho} &= \delta^{\mu}_{\rho} \\ \delta^{\mu}_{\rho} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & 1 \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Wir benutzen die Einstein'sche Summenkonvention:

$$\eta_{\mu\nu}x^{\nu} = \sum_{\nu=0}^{3} \eta_{\mu\nu}x^{\nu} \qquad x^{\nu} \in \mathbb{R}^{1,3}$$
(V.13)

Invariante Länge:

$$x^2 = x_\mu x^\mu = c^2 t^2 - \vec{x}^2 \tag{V.14}$$

 ${\it Grund}:$  Licht breitet sich in allen gleichförmig zu<br/>einander bewegten Bezugssystemen gleich schnell aus!

Wir wollen nun ein Gedankenexperiment anstellen (Abbildung V.1). Für t = 0 fallen beide Systeme zusammen, das heißt es gilt  $\mathcal{O} = \mathcal{O}'$  und wir senden einen Lichtblitz am Ursprung aus:

$$\mathcal{O}: c^2 t^2 = \vec{x}^2 \qquad \qquad \mathcal{O}': c^2 t'^2 = \vec{x'}^2$$

 $\Rightarrow$ 

$$x_{\mu}x^{\mu} = x^{2} = 0 = x'_{\mu}x'^{\mu} = x'^{2} =: s^{2}$$
(V.15)

Definition V.1.1 (Raum-Zeit-Abstand).

$$s^{2} := (x_{1}^{\mu} - x_{2}^{\mu})(x_{1\mu} - x_{2\mu})$$

$$s^{2} = \begin{cases} > 0 : & \text{zeitartiger Abstand} \\ = 0 : & \text{lichtartiger Abstand} \\ < 0 : & \text{raumartiger Abstand} \end{cases}$$
(V.16)

V. Relativistische Quantenmechanik



Abbildung V.1.: Gedankenexperiment

**Lorentztransformation** Wir such n eine lineare Transformation  $x^{\mu} \rightarrow x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}x^{\nu}$ , die  $s^2$  invariant lässt:

## Klassifizierung von Lorentztransformationen

• Eintrag  $\rho = 0$ ,  $\kappa = 0$  von (V.17):

$$(\Lambda^{0}{}_{0})^{2} - (\Lambda^{i}{}_{0})^{2} = \eta_{00} = 1$$
  $(i = 1, 2, 3)$   
 $\Rightarrow |\Lambda^{0}{}_{0}| \ge 1$ 

für den Fall $\Lambda^0{}_0 \geq 1$ hat man "orthochrone Lortentztransformationen"

 $\det \Lambda = 1$  "eigentliche" Lortentztransformation

 $\det \Lambda = -1$  "uneigentliche" Lortentz transformation

Beispiele:

•

1.) Rotationen im  $\mathbb{R}^3$ :

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \Omega \end{pmatrix}$$
(V.18)  
$$\det \Omega = 1$$
$$\Omega^{T} \Omega = 1$$

2.) Boosts: zum Beispiel Boost in x-Richtung mit Geschwindigkeit v des Systems  $\mathcal{O}'$  relativ zu  $\mathcal{O}$ .

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cosh \eta & -\sinh \eta & 0 & 0 \\ -\sinh \eta & \cosh \eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\det \Lambda = \cosh^2 \eta - \sinh^2 \eta = 1$$
$$\Lambda^0{}_0 = \cosh \eta \ge 1$$
(V.19)

Wobei man $\eta = {\rm atanh}\, \frac{v}{c}$ als Rapidität bezeichnet. Damit ergibt sich:

$$\cosh \eta = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$
$$\sinh \eta = \frac{v/c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

#### 3.) Zeitinversion:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$
(V.20)

Nicht orthochrone uneigentliche Lortentztransformation

4.) Parität:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$
(V.21)

Orthochrone uneigentliche Lortentztransformation

**Der Viererimpuls** Die Energie E und die Impulse  $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$  bilden die Komponenten eines kontravarianten Impulsvierervektors  $p^{\mu} = (E/c, p_x, p_y, p_z)$  mit der invarianten Länge:

$$p_{\mu}p^{\mu} = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p} \cdot \vec{p} = m^2 c^2 \tag{V.22}$$

Bzw.

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \tag{V.23}$$

im nichtrelativistischen Limes $mc^2 \gg |\vec{p}| \cdot c$ 

$$\Rightarrow \quad E = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m^2 c^2}} \simeq mc^2 \left( 1 + \frac{\vec{p}^2}{2m^2 c^2} + \cdots \right)$$
(V.24)

Sämtliche physikalischen Gesetze müssen unter Lorentztransformationen invariant sein!

# V.2. Erste Versuche einer relativistischen Wellengleichung

Freies nichtrelavistisches Teilchen:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tag{V.25}$$

Übergang zur Quantenmechanik in der Ortsdarstellung mittels Korrespondenzprinzip.

$$H \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \qquad \qquad \vec{p} \to \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Nichtrelativistische Wellengleichung (Schrödingergleichung):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x},t)$$
(V.26)

(V.26) ist offensichtlich *nicht kovariant*: Die linke Seite transformiert anders als rechte Seite. Der Ursprung dessen liegt in der Verwendung der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung  $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ 

#### Freies relativistisches Teilchen:

$$H = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \tag{V.27}$$

Offensichtlicher Versuch: Übergang zur Quantenmechanik weiterhin durch Korrespondenzprinzip angewandt auf Viererimpuls:

$$p_{\mu} \to i\hbar \frac{\partial}{\partial x^{\mu}}$$
  $x^{\mu} = (ct, x, y, z)$  (V.28)

Das heißt:

$$p_0 = p^0 = \frac{E}{c} \to i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_i = -p^i \to i\hbar \frac{\partial}{\partial x^i} \quad \Leftrightarrow \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \qquad (i = 1, 2, 3)$$
(V.29)

Relativistisches Analogon zu (V.26):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4}\psi \tag{V.30}$$

**Problematisch:**  $\sqrt{-}$  liefert nichtlokale Wellengleichung, das heißt alle Potenzen des Differentialoperators  $\vec{\nabla}^2$  treten auf!

Besserer Ansatz: Quadrieren

$$H^{2} = \vec{p}^{2}c^{2} + m^{2}c^{4}$$
$$-\hbar^{2}\frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}}\psi = \left(-\hbar^{2}c^{2}\vec{\nabla}^{2} + m^{2}c^{4}\right)\psi$$
(V.31)

"Klein-Gordon-Gleichung" (1926/1927)

Bzw. kovariant geschrieben:

$$\left[\partial_{\mu}\partial^{\mu} + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^{2}\right]\psi = 0 \tag{V.31}$$

Mit  $\partial_{\mu} := \frac{\partial}{\partial x^{\mu}}$  und  $\partial^{\mu} = \eta^{\mu\nu} \partial_{\nu} = \frac{\partial}{\partial x_{\mu}}$ .

 $\Rightarrow$
#### Nebenbemerkung:

Durch Quadrieren von (V.27) wurde die Positivität der Energie geopfert. Die Klein-Gordon-Gleichung (V.31) besitzt Lösungen mit positiver und negativer Energie! Letztere lassen sich als Antiteilchen interpretieren.

### Erinnerung: Kontinuitätsgleichung für Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der nichtrelativistischen

QuantenmechanikWahrscheinlichkeitsdichte:<br/>Wahrscheinlichkeitsstromdichte: $\rho(\vec{x},t) = \psi^*(\vec{x},t)\psi(\vec{x},t)$ Gemeinsam erfüllen beide die Kontinuitätsgleichung: $\vec{j}(\vec{x},t) = -\frac{\hbar}{2mi}[\psi^*\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\psi^*)\psi]$ 

$$\partial_t \rho = \vec{\nabla} \vec{j} \tag{V.32}$$

Siehe hierzu auch Kapitel I.10 in QM I.

Frage: Lässt sich eine relativistische Kontinuitätsgleichung der Wahrscheinlichkeit angeben?

aus (V.31) 
$$\Rightarrow \qquad \psi^* \left[ \partial^{\mu} \partial_{\mu} + \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi - \psi \left[ \partial^{\mu} \partial_{\mu} + \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi^* = 0$$
$$\Rightarrow \qquad \qquad \partial^{\mu} \left[ \underbrace{\psi^* \partial_{\mu} \psi - \psi \partial_{\mu} \psi^*}_{=:j_{\mu} \text{ erhaltener Vierestrom}} \right] = 0 \qquad (V.33)$$

 $\Rightarrow$ 

$$\partial^{\mu} j_{\mu} = \partial_{0} j_{0} - \partial_{i} j_{i}$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \left[ \underbrace{\frac{1}{c} (\psi^{*} \dot{\psi} - \dot{\psi}^{*} \psi)}_{\rho_{\mathrm{R}}} \right] - \operatorname{div} \left[ \underbrace{\psi^{*} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^{*}}_{\vec{j}} \right] = 0 \qquad (V.34)$$

Es ist nun naheliegend  $\rho_{\rm R} = \frac{1}{c}(\psi^*\dot{\psi} - \psi\dot{\psi}^*)$  als relativistische Wahrscheinlichkeitesdichte zu interpretieren, da  $\partial_t \rho_{\rm R} = \vec{\nabla}\vec{j}$  ist. Dies ist jedoch nicht möglich, da  $\rho_{\rm R}$  nicht stets positiv ist. Vergleiche den nichtrelativistischen Fall:

$$\rho_{\rm NR} = \psi^* \psi \quad 4$$

*Ursprung des Problems:* Differentialgleichung 2. Ordnung in Zeit t. Historisch war dies der Grund für Dirac, nach einer relativistischen Wellengleichung erster Ordnung zu suchen, was ihm auch gelang ("Dirac-Gleichung"). Allerdings wird sich herausstellen, dass auch dort eine positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte für *ein einziges* Teilchen *nicht* existiert.

Das heißt, obwohl historisch zunächst verworfen, hat die Klein-Gordon-Gleichung (V.31) heute den gleichen Status wie die Dirac-Gleichung. Sie beschreibt skalare Teilchen von Spin (s = 0) (Bosonen), die Dirac-Gleichung beschreibt s = 1/2-Teilchen (Fermionen).

### V.3. Die Dirac-Gleichung (P.A.M. Dirac, 1928)

Linearer Ansatz:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3}\right)\psi + \beta m c^2 \psi$$
$$=: \hat{H}\psi \tag{V.35}$$

Die  $\alpha_i$  können nicht einfach Zahlen sein, da sonst die Rotationssymmetrie gebrochen wäre! *Idee:* Interpretiere (V.35) als *N*-Komponentengleichung mit  $\alpha_i$  und  $\beta N \times N$ -Matrizen

- $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ : hermitische  $N \times N$ -Matrizen
- $\psi$ : N-komponentige Spaltenmatrix ("Spinor")

$$\psi \to \psi_{\alpha} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

#### Forderungen

1.) (V.35) muss auf die relativistische Energie-Impuls-Beziehung für jede Komponente  $\psi_{\alpha}$  führen:

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

- 2.) (V.35) muss eine Kontinuitätsgleichung der Wahrscheinlichkeit implizieren.
- 3.) (V.35) muss *Lorentz-Kovariant* sein!

Zu Forderung 1: Relativistische Energie-Impuls-Beziehung: Aus Iteration der Gleichung (V.35) folgt:

$$-\hbar^{2}\partial_{t}^{2}\psi = \left(\frac{\hbar c}{i}\alpha_{i}\frac{\partial}{\partial x^{i}} + \beta mc^{2}\right)\left(\frac{\hbar c}{i}\alpha_{j}\frac{\partial}{\partial x^{j}} + \beta mc^{2}\right)\psi$$
$$= -(\hbar c)^{2}\frac{\alpha_{i}\alpha_{j} + \alpha_{j}\alpha_{i}}{2}\frac{\partial^{2}\psi}{\partial x^{i}\partial x^{j}} + \frac{\hbar mc^{3}}{i}(\alpha_{i}\beta + \beta\alpha_{i})\frac{\partial\psi}{\partial x^{i}} + \beta^{2}m^{2}c^{4}\psi$$
$$\stackrel{!}{=} \mathbb{1}_{N\times N}\left(-(\hbar c)^{2}\vec{\nabla}^{2}\psi + m^{2}c^{4}\psi\right)$$
(V.36)

Das heißt die Matrizen  $\alpha_i$  ud<br/>n $\beta$  müssen die folgenden Beziehungen erfüllen:

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \mathbb{1}_{N \times N}$$
  

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0$$

$$\beta^2 = \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \mathbb{1}_{N \times N}$$
(V.37a)

Äquivalent geschrieben:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2 \,\delta_{ij} \mathbb{1}$$
  

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0$$
  

$$\{\beta, \beta\} = 2 \mathbb{1}$$
  
(V.37b)

(V.37) impliziert:

- i)  $\operatorname{Sp}(\beta) = \operatorname{Sp}(\alpha_i) = 0$
- ii)  $\beta$  und  $\alpha_i$  haben die Eigenwerte  $\pm 1$  $\Rightarrow N$  ist gerade.
- ${\bf N=2}$ ? Ausgeschlossen, da nur 3 anti-kommutierende hermitesche Matrizen der Dimension $2\times 2$ existieren: Die Pauli-Matrizen  $\sigma_1,\,\sigma_2,\,\sigma_3$

Alternatives Argument: Basis der hermiteschen 2 × 2-Matrizen: {1,  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ }, wir benötigen aber vier spurfreie Matrizen  $\alpha_i, \beta$ 

N = 4? Minimale Dimension zur Realisierung der Algebra (V.37) Explizite Darstellung (in Blockmatrix-Notation):

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix} \qquad \qquad i = 1, 2, 3 \qquad (V.38)$$

mit den Pauli-Matrizen  $\sigma_i$ :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Mit dieser Wahl gilt die Klein-Gordon-Gleichung für jede der vier Komponenten  $\psi_{\alpha}(\vec{x}, t)$ , die Lösung der Dirac-Gleichung (V.35) ist:

$$-\hbar^2 \partial_t^2 \psi_A(\vec{x},t) = \left(-(\hbar c)^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4\right) \psi_A(\vec{x},t)$$

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right] \psi_A(\vec{x},t) = 0$$
(V.39)

Jede Komponente  $\psi_{\alpha}$  erfüllt die Klein-Gordon-Gleichung. Das heißt für Lösungen  $\psi_{\alpha} \sim e^{\pm i(Et-\vec{p}\vec{x})}$ in Form ebener Wellen folgt die relativistische Energie-Impuls-Beziehung.

Zur Forderung 2: Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeit Wir betrachten nun die hermitesch konjugierte Wellenfunktion  $\psi^{\dagger} = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$ , einen Zeilenvektor, und multiplizieren diese von links an die Dirac-Gleichung (V.35) heran:

$$i\hbar(\psi^{\dagger}\partial_{t}\psi) = \frac{\hbar c}{i} \left(\psi^{\dagger}\alpha_{k}\frac{\partial}{\partial x^{k}}\psi\right) + mc^{2}(\psi^{\dagger}\beta\psi) \tag{V.40}$$

Entsprechend  $(V.35)^{\dagger} \cdot \psi$ 

 $\Rightarrow$ 

$$-i\hbar(\partial_t\psi^{\dagger}\psi) = -\frac{\hbar c}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x^k}\psi^{\dagger}\underbrace{(\alpha_k)^{\dagger}}_{=\alpha_k}\psi\right) + mc^2(\psi^{\dagger}\beta^{\dagger}\psi) \tag{V.41}$$

Hierbei bezeichnet  $(\partial_t \psi^{\dagger} \psi)$  das Skalarprodukt des Zeilenvektors  $(\dot{\psi}_1^*, \dot{\psi}_2^*, \dot{\psi}_3^*, \dot{\psi}_4^*)$  mit dem Spaltenvektor  $(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T$ .

Differenz beider Gleichungen:

$$i\hbar\partial_t(\psi^{\dagger}\psi) = \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\frac{\hbar c}{i}\psi^{\dagger}\alpha_k\psi\right) \tag{V.42}$$

$$\Leftrightarrow \qquad \frac{\partial}{\partial t}\rho = \operatorname{div}\vec{j} \tag{V.43}$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho=\psi^{\dagger}\psi=\sum_{A=1}^{4}\psi_{A}^{*}\psi_{A}$ 

und dem Wahrscheinlichkeitsstrom  $\vec{j} = c (\psi^{\dagger} \vec{\alpha} \psi)$  (mit  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), j^k = \vec{e}_k \cdot \vec{j}$ ) Nun ist  $\rho \ge 0$  positiv und die Wahrscheinlichkeit bleibt erhalten:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \psi^{\dagger} \psi = 0 \tag{V.44}$$

Zu zeigen:  $j_{\mu} = (\rho, j_k)$  bilden einen Vierervektor und (V.35) ist kovariant unter Lorentz-Transformation.

### V.4. Der nichtrelativistische Grenzfall der Dirac-Gleichung

Zunächst wollen wir sehen, ob die Dirac-Gleichung einen sinnvollen nichtrelativistischen Grenzfall besitzt. Dazu betrachten wir zunächst ein ruhendes Elektron: (Elektron mit  $\vec{p} = 0$ , nicht lokalisiert)

4 Lösungen:

$$\begin{split} \psi^{(1)} &= e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{pmatrix} \quad ; \qquad \qquad \psi^{(2)} &= e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0\\1\\0\\0 \end{pmatrix} \\ \psi^{(3)} &= e^{i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0\\0\\1\\0 \end{pmatrix} \quad ; \qquad \qquad \psi^{(4)} &= e^{i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0\\0\\0\\1 \end{pmatrix} \end{split}$$

 $\psi^{(1)}$  und  $\psi^{(2)}$  haben  $E=-mc^2$ : positive Energielösung  $\psi^{(3)}$  und  $\psi^{(4)}$  haben  $E=-mc^2$ : negative Energielösung

Interpretation der Lösungen  $\psi^{(3)}$  und  $\psi^{(4)}$  mit E < 0 ist zunächst unklar. Die Lösungen der oberen Komponenten führen auf die Pauli'sche Spintheorie im nichtrelativistischen Limes.

#### Kopplung an das elektromagnetische Feld

Viererpotential :  $A^{\mu} = (\Phi, \vec{A})$ 

Die Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld folgt aus der minimalen Kopplung an das Feld durch die Substitution

$$p^{\mu} \to p^{\mu} - \frac{e}{c} A^{\mu} \tag{V.46}$$

Die Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld kann dann mittels

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \to i\hbar \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - \frac{e}{c} A_{\mu}$$
$$di\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[ c\vec{\alpha} \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta m c^{2} + e\Phi \right] \psi \tag{V.47}$$

 $\Rightarrow$ 

geschrieben werden. Der kinetische Impuls  $\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$  taucht auf.

**Der nichtrelativistische Grenzfall der Gleichung** (V.47) Wir schreiben  $\psi_A$  als zwei 2-komponentige Spaltenmatrizen  $\tilde{\varphi}_{\alpha}$  und  $\tilde{\chi}_{\dot{\alpha}}$  mit  $\alpha = 1, 2, \dot{\alpha} = 1, 2$  und A = 1, 2, 3, 4.

$$\psi_A = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_\alpha \\ \tilde{\chi}_{\dot{\alpha}} \end{pmatrix} \tag{V.48}$$

Aus der Darstellung  $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$  und  $\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$  ergibt sich dann (V.47) zu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\chi}\\\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\tilde{\varphi}\end{pmatrix} + e\Phi\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}\\\tilde{\chi}\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix}\tilde{\varphi}\\-\tilde{\chi}\end{pmatrix} \tag{V.49}$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall ist die Ruheenergie  $mc^2$  die größte auftretende Energie. Ansatz zur Separation der Ruheenergie:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{V.50}$$

mit  $|\partial_t \varphi| \ll \frac{mc^2}{\hbar}$  und  $|\partial_t \chi| \ll \frac{mc^2}{\hbar}$ . Das heißt  $\varphi$  und  $\chi$  sind langsam veränderlich in der Zeit. Dann folgt aus (V.49):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\chi\\\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\,\varphi\end{pmatrix} + e\,\Phi\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix} - 2mc^2\begin{pmatrix}0\\\chi\end{pmatrix} \tag{V.51}$$

Weiterhin sollte im nichtrelativistischen Limes auch  $|e\Phi| \ll mc^2$  (schwache Felder) sein. Mit  $|\dot{\chi}| \ll mc^2$  führt dann die untere Komponente von (V.51) auf

$$\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \varphi + \mathcal{O}\left(\frac{E}{mc^2}\right) \qquad \text{das heißt } |\chi| \ll |\varphi| \tag{V.52}$$

 $\chi$  beschreibt die "kleinen" Komponenten im nichtrelativistischen Limes. Einsetzen dieser Lösung in die oberen Komponenten von (V.51) liefert die zweikomponentige Spinorgleichung (V.53).

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \left(\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\ \vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}}{2m} + e\,\Phi\right)\varphi\tag{V.53}$$

Diese ist unabhängig von c! Weiterhin gilt die magische Identität:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k \tag{V.54}$$
$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = \vec{\pi}^2 + i\epsilon_{ijk} \sigma_i \pi_j \pi_k$$

bzw. mit

$$= \vec{\pi}^2 - \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$
(V.55)  
$$B_i = \epsilon_{ijk} \partial_j A_k$$

mit

Somit gilt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \left[\frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B} + e\Phi\right]\varphi \tag{V.56}$$

#### (Pauli-Gleichung aus Kapitel II.4)

Dies ist die nichtrelativistische Wellengleichung eines Spin-1/2 Teilchens im elektromagnetischen Feld mit  $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$  und Magnetfeldkopplung  $\frac{e}{mc}\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B}$ . Die Dirac-Gleichung ist die relativistische Wellengleichung eines Elektrons. Historisch zentraler Erfolg der Dirac-Theorie.

• Identifikation der Spinzustände: Für die Komponenten gilt:

$$\varphi_1 \sim |\uparrow\rangle \qquad \varphi_2 \sim |\downarrow\rangle \tag{V.57}$$

 $ec{\pi} = i \hbar ec{
abla} - rac{e}{c} ec{A}$ 

• Gyromagnetisches Verhältnis g = 2 aus der homogenen schwachen Feldnäherung:

$$\vec{B} = \text{const.} = \text{rot}\,\vec{A} \quad \Rightarrow \quad \vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$$
 (V.58)

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = \vec{p}^2 - \frac{e}{c}\vec{B} \cdot \underbrace{\left(\vec{r} \times \vec{p}\right)}_{\vec{r}} + \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{4} \underbrace{\left(\vec{B} \times \vec{r}\right)^2}_{\vec{r}} \tag{V.59}$$

$$\simeq \vec{p}^2 - \frac{e}{c}\vec{L}\cdot\vec{B} \tag{V.60}$$

Somit folgt aus (V.56):

$$i\hbar\partial_t\varphi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}\right]\varphi \implies \mathbf{g} = \mathbf{2}$$
 (V.61)

#### Nebenbemerkung:

In der Quantenelektrodynamik (Quantisierung von  $A_{\mu}$  im Rahmen der Quantenfeldtheorie) lassen sich pertubative Korrekturen in  $\frac{e^2}{4\pi\hbar c} = \alpha \approx \frac{1}{137}$  berechnen:

$$g_{\mathrm{e}^-} = 2\left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \cdots\right]$$
 Bekannt bis  $\mathcal{O}(\alpha^5)$ 

# V.5. Lorentz-Kovarianz der Diracgleichung

Zwingende Eigenschaft einer relativistischen Wellengleichung! *Forderung:* 

System 
$$\Sigma$$
:  $x^{\mu}$  System  $\Sigma'$ :  $x'^{\mu}$ 

Durch Lorentz-Transformation verbunden:  $x^\mu \to x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ 

 $\begin{array}{ll} \text{Transformation der Wellenfunktion:} & \psi(x^{\mu}) \rightarrow \psi'(x'^{\mu}) \\ \text{Dirac-Gleichung im System } \Sigma : & i\hbar \partial_t \psi(x) = \mathcal{D} \circ \psi(x) \\ \text{Dirac-Gleichung im System } \Sigma' : & i\hbar \partial_{t'} \psi'(x') = \mathcal{D}' \circ \psi'(x') \end{array}$ 

In jedem Fall sollten  $\mathcal{D}$  und  $\mathcal{D}'$  die gleiche Gestalt haben!

#### Vierernotation der Dirac-Gleichung

**Definition V.5.1** (Dirac'sche  $\gamma$ -Matrizen).

$$\gamma^{0} := \beta \qquad \gamma^{i} := \beta \alpha_{i} \qquad i = 1, 2, 3 \quad (V.62)$$

$$\Rightarrow \qquad \gamma^{0} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \qquad \gamma^{i} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{i} \\ -\sigma_{i} & 0 \end{pmatrix} \qquad (V.63)$$

Weiterhin ist  $(\gamma^0)^{\dagger} = \gamma^0, (\gamma^i)^{\dagger} = -\gamma^i$  Die Dirac-Gleichung lässt sich dann kompakt schreiben als:

$$i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}}\psi - mc\,\psi = 0 \tag{V.64}$$

72

=

Die Vertauschungsrelationen der  $\alpha_i$  und  $\beta$  führen dann auf die elegante Antikommutatorrelation

$$\{\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}\} = \gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2\eta^{\mu\nu}\mathbb{1}_{4\times4}$$
(V.65)

die "Clifford-Algebra".

#### Feynmansche Notation ("slash"-Schreibweise):

$$A := \gamma^{\mu} A_{\mu} \tag{V.66}$$

(V.67)

bzw.

$$\Rightarrow \qquad (i\hbar\partial \!\!/ - mc)\psi = 0 \qquad (V.68)$$

 $\not \! \partial = \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ 

 $(\not p - mc)\psi = 0 \tag{V.69}$ 

und gekoppelt and das e.m. Feld

$$(\not p - q \not A - mc)\psi = 0 \tag{V.70}$$

#### Nachweis der Kovarianz

$$\Sigma : \qquad (i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - mc)\psi(x) = 0$$
  

$$\Sigma' : \qquad (i\hbar\gamma'^{\mu}\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} - mc)\psi'(x') = 0 \qquad (V.71)$$

• Auch die  $\gamma'^{\mu}$  müssen der Clifford-Algebra  $\{\gamma'^{\mu}, \gamma'^{\nu}\} = 2\eta^{\mu\nu}$  und  $(\gamma'^{0})^{\dagger} = \gamma'^{0}$  sowie  $(\gamma'^{i})^{\dagger} = -\gamma'^{i}$  genügen. Man kann zeigen, dass alle derartigen  $4 \times 4$ -Matrizen bis auf unitäre Transformationen gleich sind!

$$\gamma'_{\mu} = U^{\dagger} \gamma_{\mu} U \qquad \text{mit } U^{\dagger} U = 1 \qquad (V.72)$$

Das heißt, alle Darstellungen der Clifford-Algebra in vier Dimensionen sind unitär äquivalent. Wir wählen  $\gamma'^{\mu} = \gamma^{\mu}$ .

• Die Transformation  $\psi(x) \to \psi'(x')$  sei linear:

$$\psi'(x') = \psi'(\Lambda x) = S(\Lambda)\psi(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x')$$
(V.73)  
$$x' = \Lambda x$$

wobei

 $S(\Lambda)$  ist eine zu bestimmende 4  $\times$  4-Matrix die im Spinorraum operiert.

Achtung:

$$\begin{split} \Lambda^{\mu}{}_{\nu} & \text{wirkt im Konfigurationsraum} & \mu, \nu = 0, 1, 2, 3 \\ S(\Lambda)_{AB} & \text{wirkt im Spinorraum} & A, B = 1, 2, 3, 4 = (\alpha, \dot{\alpha}) \end{split}$$

• Hintereinanderausführung von  $\Lambda$  und  $\Lambda^{-1}$  ist die Identität.

$$S(\Lambda^{-1})S(\Lambda) = \mathbb{1} \qquad \Rightarrow \qquad S^{-1}(\Lambda) = S(\Lambda^{-1}) \qquad (V.74)$$

• Die Dirac-Gleichung im System  $\Sigma$ :

$$\left[i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - mc\right]\underbrace{\psi(x)}_{=S^{-1}(\Lambda)\psi'(x')}$$
(V.75)

 $\Rightarrow$ 

$$\left[i\hbar \left(S(\Lambda)\gamma^{\mu}S^{-1}(\Lambda)\right)\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - mc\right]\psi'(x') = 0 \tag{V.76}$$

Nun ist

$$\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = \frac{\partial x^{\prime\nu}}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial}{\partial x^{\prime\nu}} = \Lambda^{\nu}{}_{\mu} \frac{\partial}{\partial x^{\prime\nu}}$$
$$x^{\prime\nu} = \Lambda^{\nu}{}_{\rho} x^{\rho} \tag{V.77}$$

 $\Rightarrow$ 

$$\left[i\hbar\left(\underbrace{S(\Lambda)\gamma^{\mu}S^{-1}(\Lambda)\Lambda^{\nu}}_{\stackrel{\perp}{=}\gamma^{\nu}}\right)\frac{\partial}{\partial x'^{\nu}} - mc\right]\psi'(x') = 0 \tag{V.78}$$

Aussage: Die Dirac-Gleichung ist genau dann forminvariant unter Lorentztransformation, wenn

$$S(\Lambda)\gamma^{\mu}S^{-1}(\Lambda)\Lambda^{\nu}{}_{\mu} \stackrel{!}{=} \gamma^{\nu}$$
$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda) = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}$$
(V.79)

 $\operatorname{oder}$ 

gilt. Dies ist eine Bestimmungsgleichung für  $S(\Lambda)$ ! Ansatz: Wir betrachten zunächst eine Infinitesimale Lösung (das heißt, eine eigentliche, orthochrone Lorentz-Transformation):

$$\begin{aligned}
& \Lambda^{\mu}{}_{\nu} = \delta^{\mu}{}_{\nu} + \omega^{\mu}{}_{\nu} & \text{mit } \omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu} \quad (V.80) \\
& \text{Da} & \Lambda^{\mu}{}_{\rho}\Lambda^{\nu}{}_{\kappa}\eta_{\mu\nu} = \eta_{\rho\kappa} \\
& \text{infinitesimal} & \omega^{\mu}{}_{\rho}\eta_{\mu\kappa} + \omega^{\nu}{}_{\kappa}\eta_{\rho\nu} = 0 \\
& \Rightarrow & \omega_{\kappa\rho} + \omega_{\rho\kappa} = 0 \quad (V.81)
\end{aligned}$$

 $\omega^{\mu}{}_{\nu}:$  Parameter der Lorentz-Transformation. Weiterhin ist:

$$S(\Lambda)_{AB} = \delta_{AB} - \frac{i}{4} (\sigma_{\mu\nu})_{AB} \omega^{\mu\nu}$$
$$S^{-1}(\Lambda)_{AB} = \delta_{AB} + \frac{i}{4} (\sigma_{\mu\nu})_{AB} \omega^{\mu\nu}$$

 $(\sigma_{\mu\nu})_{AB}$  ist zu bestimemnde 4 × 4-Matrix im Spinorraum und trägt zwei Raumzeitindizes. Wegen  $\sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu}$  gibt es sechs unabhängige Matrizen, was der Dimensionalität der Lorentzgruppe entspricht. Einsetzen in die Bestimmungsgleichung (V.79) liefert:

$$\Rightarrow \qquad [\gamma^{\nu}, \sigma_{\rho\kappa}] = 2i(\delta^{\nu}_{\rho}\gamma_{\kappa} - \delta^{\nu}_{\kappa}\gamma_{\rho}) \qquad (V.82)$$

Lösung:  $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}]$ (V.83)

Somit gilt infinitesimal:

$$S(\Lambda = 1 + \omega) = 1 + \frac{1}{8} [\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}] \omega^{\mu\nu}$$
(V.84)

Nun wollen wir *endliche* Lorentz-Transformationen betrachten. Dies geschieht über die Erzeuger der Lorentzgruppe:

$$\hat{\Lambda} = \exp[-\vec{\varphi} \cdot \vec{J}] \exp[-\eta \, \hat{\vec{w}} \cdot \vec{\vec{K}}] \tag{V.85}$$

•  $\hat{\vec{J}} = (\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$ : Erzeuger der Rotation im Raum

$$\hat{J}_{i} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_{i} & \end{pmatrix}$$

$$J_{1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$J_{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$J_{3} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(V.86)

wobe<br/>i $|\vec{\varphi}| \in [0,2\pi[$ der Drehwinkel und die Richtung von<br/>  $\vec{\varphi}$  die Drehachse ist.

•  $\vec{K} = (K_1, K_2, K_3)$ : Erzeuger der Boosts in Richtung  $\hat{\vec{w}}$  und "Rapidität"  $\eta = \operatorname{atanh}\left(\frac{|\vec{v}|}{c}\right) \in [0, \infty[$ , wobei  $\vec{v}$  die Geschwindigkeit des Boosts ist.

$$K_{1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad K_{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & & \\ 1 & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$
$$K_{3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & & \\ 1 & & 0 \end{pmatrix}$$

Beispiele:

• Rotation um  $x_3$ -Achse mit Winkel  $\varphi$ :

$$\hat{\Lambda} = \exp[-\varphi \hat{J}_3] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ 0 & \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(V.87)  
$$\hat{J}_3^2 = \begin{pmatrix} 0 & | \\ \hline -1 & 0 \end{pmatrix}$$

 $\mathrm{da}$ 

• Boost in  $x_1$ -Richtung:

$$\hat{\Lambda} = \exp[-\eta \hat{K}_1] = \begin{pmatrix} \cosh \eta & -\sinh \eta & 0 & 0\\ -\sinh \eta & \cosh \eta & 0 & 0\\ \hline 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(V.88)  
$$\hat{K}_1^2 = \left(\frac{\mathbb{1}_{2 \times 2} \mid 0}{0 \mid 0}\right)$$

 $\mathrm{da}$ 

Endliche Spinortransformationen erhalten wir ebenfalls aus der Exponentiation der infinitesimalen Transformation.

• Rotation um die  $x_3$ -Achse mit Winkel  $\varphi$ :

$$S(\Lambda) = \exp\left[\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\,\omega^{\mu\nu}\right] \tag{V.89}$$
$$\omega^{\mu\nu} = \varphi \cdot (\hat{J}_1)^{\mu\nu} = \varphi \left(\begin{array}{c|c} 0 & | \\ \hline 0 & 1 \\ \hline -1 & 0 \\ \hline \end{array}\right)$$
$$\omega^{12} = \varphi, \quad \omega^{21} = -\varphi \quad \text{alle anderen Null.} \tag{V.90}$$

bzw.

Damit ist  $\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu} = 2\varphi\sigma_{12}$  und:

$$S = \exp\left[\frac{i}{2}\varphi\,\sigma_{12}\right] \tag{V.91}$$

Nun ist  $\sigma_{12} = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$  in unserer Darstellung

$$\Rightarrow \qquad \qquad \psi(x) \to \psi'(x') = \exp\left[\frac{i}{2}\varphi\begin{pmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & \sigma_3\end{pmatrix}\right]\psi(x) \qquad (V.92)$$

In den oberen beiden Komponenten erkennen wir die Drehung des zweikomponentigen Paulispinors wieder!

$$\varphi'(x') = \exp\left[+\frac{i}{2}\vec{\varphi}\cdot\vec{\sigma}\right]\varphi(x)$$
 (V.93)

(Verallgemeinerung zu beliebigen Drehachsen)

#### Nebenbemerkung:

Drehung um  $2\pi$  führt  $\varphi(x)$  auf  $-\varphi(x)$ , Drehung um  $4\pi$  führt  $\varphi(x)$  auf sich selbst zurück!

• Boost in die  $x_1$ -Richtung:

$$\psi'(x') = \exp\left[-\frac{i}{2}\eta \,\sigma_{01}\right]\psi(x) \tag{V.94}$$
$$\sigma_{0i} = i\alpha^{i} = i\begin{pmatrix}0 & \sigma_{i}\\\sigma_{i} & 0\end{pmatrix}$$

 $\operatorname{mit}$ 

Zusammenfassung: Allgem	eine Form der Spinortransformationen:	
Rotation in $\vec{\varphi}$ -Richtung		
	$S_{ m R} = \exp \left[rac{\imath}{2} arphi_i egin{pmatrix} \sigma_i & 0 \ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} ight]$	(V.95)
<i>Boost</i> in $\hat{\vec{w}}$ -Richtung		
	$S_{\rm B} = \exp\left[\frac{1}{2}\eta  \hat{w}_i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}\right]$	(V.96)

**Invarianz der Kontinuitätsgleichung** Wir hatten die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho = \psi^{\dagger}(x)\psi(x)$  und den Wahrscheinlichkeitsstrom  $j_k = c \psi^{\dagger} \alpha_k \psi$  identifiziert. Das können wir zusammenfassen in den *Viererstrom*:

$$j^{\mu} = (c\rho, j_k) = c\psi^{\dagger}\gamma^0\gamma^{\mu}\psi \tag{V.97}$$

Dieser transformiert wie ein Vierervektor:

$$j^{\prime\mu}(x^{\prime}) = c \,\psi^{\prime\dagger}(x^{\prime})\gamma^{0}\gamma^{\mu}\psi^{\prime}(x^{\prime}) = c \,\psi^{\dagger}(x)S^{\dagger}\gamma^{0}\gamma^{\mu}S\psi(x) \tag{V.98}$$

$$S^{-1}(\Lambda) = \gamma^0 S^{\dagger} \gamma^0 \text{ oder } S^{\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 S^{-1}$$
(V.99)

somit:

Nun gilt

$$j^{\prime\mu}(x^{\prime}) = c \psi^{\dagger} \gamma^{0} \underbrace{S^{-1} \gamma^{\mu} S}_{\Lambda^{\mu}{}_{\nu} \gamma^{\nu}} \psi(x) \tag{V.100}$$

$$= \Lambda^{\mu}{}_{\nu} \underbrace{\left(c \psi^{\dagger} \gamma^{0} \gamma^{\nu} \psi(x)\right)}_{=j^{\nu}(x)} \tag{V.101}$$

$$=\Lambda^{\mu}{}_{\nu}j^{\nu}(x) \quad \checkmark \tag{V.102}$$

Somit ist auch die Kontinuitätsgleichung  $\frac{\partial j^{\mu}(x)}{\partial x^{\mu}(x)} = 0$  invariant unter Lorentz-Transformationen, da sie eine skalare Größe ist und somit in allen Inertialsystemen den gleichen Wert besitzt.

### Nebenbemerkung:

Man schreibt

 $\bar{\psi}(x) := \psi^{\dagger}(x)\gamma^{0}$  "konjugierter Spinor"

Betrachten wir die Lorentz-Transformation desselben:

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}$$
$$\psi'(x') = S\psi(x)$$

Somit ist  $\bar{\psi}\psi$  lorentz invariant.

$$\begin{array}{ccc} \bar{\psi}\psi & \text{Skalar} \\ \bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi & \text{Vektor} \\ (\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi)(\bar{\psi}\gamma^{\nu}\psi)\eta_{\mu\nu} & \text{Skalar} \\ (\bar{\psi}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}\psi) & \text{Tensor zweiter Stufe} \\ \bar{\psi}\partial\!\!\!/\psi = \bar{\psi}\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}}\psi & \text{Skalar} \end{array}$$

	$\hbar = c = 1$	$tats \ddot{a} chlich$
Masse	${ m GeV}$	$\frac{\text{GeV}}{c^2}$
Länge	${\rm GeV}^{-1}$	$\frac{\hbar c}{\text{GeV}}$
Zeit	${\rm GeV}^{-1}$	$\frac{\hbar}{\text{GeV}}$
Ladung	dimensionslos	$\sqrt{\hbar c}$

Tabelle V.1.: Einheiten von Masse, Länge und Zeit zwischen natürlichen Einheiten und SI-Einheiten

### V.6. Lösungen der Dirac-Gleichung

Wir wollen von nun an in *natürlichen Einheiten* arbeiten. Das heißt wir messen Geschwindigkeiten  $\left[\frac{L}{T}\right]$  in Einheiten von c. Weiterhin messen wir die Wirkung  $\left[M\frac{L^2}{T}\right]$  in Einheiten von  $\hbar$ . Das Maßsystem definiert man über Einheiten der Energie  $\left[M\frac{L^2}{T^2}\right]$ . Im SI-System ist

$$\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34} \,\mathrm{Js}$$
  $c = 2.998 \cdot 10^8 \,\mathrm{m/sec}$  (V.103)

Nun können wir  $\hbar = c = 1$  setzen und Masse, Länge und Zeit in Einheiten der Energie (eV) messen (Tabelle V.1). Die Ladung ist nun eine dimensionslose Zahl. Dann ist die Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi} \approx \frac{1}{137} \tag{V.104}$$

#### Lösungen der Dirac-Gleichung: ebene Wellen

Dirac-Gleichung:

 $(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi = 0 \tag{V.105}$ 

Wir erwarten Lösungen mit *positiver* und *negativer* Energie: *Ansatz:* 

$$\begin{split} \psi(x) &= u_r(p) \exp(-i p_\mu x^\mu) \\ &= u_r(p) \exp(-i E x^0 + i \vec{p} \cdot \vec{x}) \\ \psi(x) &= v_r(p) \exp(i p_\mu x^\mu) \\ &= v_r(p) \exp(i E x^0 - i \vec{p} \cdot \vec{x}) \end{split} \quad \text{ negative Energielösung } E < 0 \ (V.107) \end{split}$$

mit  $E = p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ . Die Spinoren  $u_r(p)$  und  $v_r(p)$  müssen dann

$$(p - m)u_r(p) = 0$$
 und  $(p + m)v_r(p) = 0$  (V.108)

erfüllen. Lösungsidee: Wir kennen bereits die Lösungen für Teilchen in Ruhe aus Kapitel V.4. Ein Boost dieses Ruhesystems in ein gleichförmig bewegtes System welches sich mit der Geschwindigkeit  $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{E}$  bewegt liefert dann die allgemeine Lösung.

$$\begin{array}{c} \Sigma \\ \xrightarrow{\vec{v} = \frac{\vec{p}}{E}} & \Sigma' \end{array}$$
 (V.109)

Ergebnis:

$$u_r(p) = B(p)w_r$$
 (r = 1, 2)  
 $v_r(p) = B(p)\tilde{w}_r$  (V.110)

V.6. Lösungen der Dirac-Gleichung

$$w_{1} = \begin{pmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{pmatrix}, \quad w_{2} = \begin{pmatrix} 0\\1\\0\\0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{w}_{1} = \begin{pmatrix} 0\\0\\1\\0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{w}_{2} = \begin{pmatrix} 0\\0\\0\\1 \end{pmatrix}$$
(V.111)

mit

und

$$B(p) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \, \mathbb{1}_{2 \times 2} & \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{\sqrt{2m(E+m)}} \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{\sqrt{2m(E+m)}} & \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \, \mathbb{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}$$
(V.112)

B(p) ist die Boost-Transformation im Spinorraum, die das Teilchen aus seinem Ruhesystem in das bewegte System mit Geschwindigkeit  $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{E}$  überführt.

Beweis:

$$S_{\text{Boost}} = \exp\left[\frac{1}{2}\eta \begin{pmatrix} 0 & \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \cdot \vec{\sigma} \\ \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \cdot \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}\right] \stackrel{!}{=} B(p) \tag{V.113}$$

mit  $\eta = \operatorname{atanh}\left(\frac{|\vec{p}|}{E}\right)$  und  $|\vec{p}| = \sqrt{E+m} \sqrt{E-m}$ . Da  $\left(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}\right)^2 = \underbrace{\sigma_i \sigma_j}_{\mathbb{1}\delta_{ij}+i\epsilon_{ijk}\sigma_k} \frac{p_i p_j}{|\vec{p}|^2} = \mathbb{1}\delta_{ij} \frac{p_i p_j}{\vec{p}^2} = \mathbb{1}$ 

ist, folgt somit

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|} \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|} & 0 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1$$
(V.114)

$$S_{\text{Boost}} = \cosh\left(\frac{\eta}{2}\right) \cdot \mathbb{1}_{4 \times 4} + \sinh\left(\frac{\eta}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & \hat{p} \cdot \vec{\sigma} \\ \hat{p} \cdot \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$
(V.115)

mit  $\hat{p} = \frac{\vec{p}}{\sqrt{E+m}\sqrt{E-m}}$ . Nun ist

$$\cosh\left(\frac{\eta}{2}\right) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\cosh(\eta) + 1\right)} = \sqrt{\frac{E+m}{2m}}$$
$$\sinh\left(\frac{\eta}{2}\right) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\cosh(\eta) - 1\right)} = \sqrt{\frac{E-m}{2m}}$$
(V.116)

Hieraus folgt die Behauptung.

Wichtige Beziehungen:

1) 
$$\bar{u}_r(p)u_s(p) = \delta_{rs}$$
 ,  $\bar{v}_r(p)v_s(p) = -\delta_{rs}$  (V.117)

2) 
$$\sum_{r=1}^{2} u_r(p) \bar{u}_r(p) = \frac{1}{2m} (\not p + m)$$
 ,  $\sum_{r=1}^{2} v_r(p) \bar{v}_r(p) = \frac{1}{2m} (\not p - m)$  (V.118)

3) 
$$\bar{u}_r(p)\gamma^{\mu}u_s(p) = \frac{p^{\mu}}{m}\delta_{rs} = \bar{v}_r(p)\gamma^{\mu}v_s(p)$$
(V.119)

4) 
$$v_r^{\dagger}(\tilde{k})u_s(k) = 0$$
 (V.120)

Allgemeine Lösung der Dirac-Gleichung Aus Superposition der positiven und negativen Energielösungen:

$$\psi(t,\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} \sum_{r=1}^2 \left\{ b(p,r)u_r(p)e^{-ip_\mu x^\mu} + d^*(p,r)v_r(p)e^{ip_\mu x^\mu} \right\}$$
(V.121)

mit dem Normierungsfaktor $\frac{m}{E}$ und den unbestimmte komplexe Amplituden  $b(p,r), d^*(p,r) \in \mathbb{C}.$ 

Frage: Kann man sich konsistenter Weise lediglich auf die Lösungen positiver Energie beschränken? Wir wollen nun das Zerfließen eines Gauß'schen Wellenpakets untersuchen! Für t = 0 sei der Zustand präpariert

$$\psi_0(t=0,\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi d^2)^{3/4}} e^{\frac{-\vec{x}^2}{4d}} w \tag{V.122}$$

mit d: Ausdehnung des Pakets,  $w = \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$ : 2-komponentiger Spinor. Das heißt nur die positiven Energiekomponenten sind vorhanden! Der Vorfaktor folgt aus der Normierung  $\int d^3x \, \psi^{\dagger} \psi = 1$  mit  $\int d^3x \, e^{-\vec{x}^2 \cdot \alpha} = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{3/2}$ .

• Fouriertransformation von  $\psi_0(0, \vec{x})$  und Koeffizientenvergleich mit der allgemeinen Lösung (V.121):

$$\int d^3x \, e^{-\frac{\vec{x}^2}{4d} - i\vec{p}\cdot\vec{x}} = (4\pi d^2)^{3/2} e^{-\vec{p}^2 d^2}$$

$$\Rightarrow \qquad \tilde{\psi}_0(t=0,\vec{p}) = \int d^3x \, \psi_0(0,\vec{x}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

$$= (8\pi d^2)^{3/4} e^{-\vec{p}^2 d^2} w \qquad (V.123)$$

Für die allgemeine Lösung im Impulsraum gilt:

$$\tilde{\psi}(t=0,\vec{p}) = \int d^3x \,\psi(0,\vec{x}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}$$

wobe<br/>i $\tilde{p}^{\mu}=(p^0,-\vec{p}),$  also  $p^i\to -p^i$ im <br/>  $v_r(p)\text{-}\mathrm{Term}$ zu substituieren ist

$$= \frac{m}{E} \sum_{r=1}^{2} \left( b(p,r)u_r(p) + d^*(\tilde{p},r)v_r(\tilde{p}) \right)$$
(V.124)

• Nun setzen wir die Terme (V.123) und (V.124) gleich:

$$\tilde{\psi}_0(t=0,\vec{p}) \stackrel{!}{=} \tilde{\psi}(t=0,\vec{p})$$

$$(8\pi d^2)^{3/4} e^{-\vec{p}\,^2 d^2} w \stackrel{!}{=} \frac{m}{E} \sum_{r=1}^2 (b(p,r)u_r(p) + d^*(\vec{p},r)v_r(\vec{p}))$$
(V.125)

Unter Ausnutzung der Orthogonalitätsrelationen:

$$\bar{u}_r(p)\gamma^0 u_s(p) = \frac{E}{m} \delta_{rs} = u_r^{\dagger}(p)u_s(p)$$
(V.126)

$$\bar{v}_r(p)\gamma^0 v_s(p) = \frac{E}{m}\delta_{rs} = v_r^{\dagger}(p)v_s(p) \tag{V.127}$$

$$\bar{v}_r(\tilde{p})\gamma^0 u_s(p) = 0 = v_r^{\dagger}(\tilde{p})u_s(p) \tag{V.128}$$

$$\bar{u}_r(p)\gamma^0 v_s(p) = 0 = u_r^{\mathsf{T}}(p)v_s(p)$$
(V.129)

ergibt sich:

$$b(p,r) = (8\pi d^2)^{3/4} e^{-\vec{p}^2 d^2} u_r^{\dagger}(p) w$$
  
$$d^*(\tilde{p},r) = (8\pi d^2)^{3/4} e^{-\vec{p}^2 d^2} v_r^{\dagger}(\tilde{p}) w$$
 (V.130)

Das heißt, auch die negativen Energiekomponenten tragen bei!



Abbildung V.2.: Gaußpaket eines Teilchens, das ungefähr bei seiner Comptonwellenlänge lokalisiert ist.

• Verhältnis der Amplituden:

$$\frac{b(p,r)}{d^*(\tilde{p},r)} = \frac{u_r^\dagger(p)w}{v_r^\dagger(\tilde{p})w}$$

Aus (V.110) ergibt sich:

$$\begin{split} u_r^{\dagger}(p)w &= w_r^{\dagger}B^{\dagger}(p)w = w_r^{\dagger}\left(\frac{\sqrt{\frac{E+m}{2m}}\varphi}{\sqrt{2m(E+m)}}\varphi\right) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}}(\varphi_r^{\dagger}\varphi)\\ \varphi_1 &= \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_2 = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}\\ v_r^{\dagger}(\tilde{p})w &= \tilde{w}_r^{\dagger}\left(-\frac{\sqrt{\frac{E+m}{2m}}\varphi}{\sqrt{2m(E+m)}}\varphi\right)\\ &= \pm \frac{|\vec{p}|}{\sqrt{2m(E+m)}}|\varphi_r^{\dagger}\varphi|\\ &\text{sei } \stackrel{\uparrow}{p=\vec{e}_3}|\vec{p}| \end{split}$$

• Annahme: Sei  $\varphi$  entweder  $\varphi_1$  oder  $\varphi_2$  Das heißt für t = 0 liegt ein Spineigenzustand vor. Somit

$$\left|\frac{b(p,r)}{d^{*}(\tilde{p},r)}\right| = \frac{E+m}{|\vec{p}|} \qquad \qquad E = \sqrt{\vec{p}^{2}+m^{2}} \ge m \qquad (V.131)$$

Diskussion: Ausdehnung des Wellenpakets liefert Größenordnung des Impulses:  $|\vec{p}| \sim d^{-1}$ 

a)  $d \gg 1/m$  $\leftrightarrow \quad |\vec{p}| \ll m$ Das Teilchen ist oberhalb seiner Comptonwellenlänge lokalisiert:

 $|b| \gg |d^*|$ 

 $\Rightarrow$  negative Energieanteile sind vernachlässigbar!

b)  $d \sim \frac{1}{m} \iff |\vec{p}| \sim m$ Das Teilchen ist bei seiner Comptonwellenlänge lokalisiert (Abb. V.2):

$$|b| \sim |d^*|$$

 $\Rightarrow$  Positive und negative Energieanteile sind relevant!



Abbildung V.3.: Elektrostatisches Stufenpotential mit einfallendem relativistischem Teilchen, dessen Energie kleiner ist als die Potentialstufe

Kleinsches Paradoxon — Dirac-Gleichung im Stufenpotential Einfaches exakt lösbares Problem der Dirac-Gleichung mit nichttrivialem Potential.

Wir betrachten ein *elektrostatisches Stufenpotential* (Abbildung V.3):

$$\Phi(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & x^3 < 0\\ V_0 & x^3 > 0 \end{cases}$$
(V.132)

Lösung im Gebiet II folgt sofort aus der freien Lösung im Gebiet I durch Substitution  $E \rightarrow E - V_0$ . Wir wollen ein einfallendes Spin-<sup>1</sup>/<sub>2</sub> Teilchen mit positiver Energie, Impuls  $k = \sqrt{E^2 - m^2}$  und Spin  $\uparrow$  betrachten.

$$\psi_{\rm ein} = e^{-iEt} e^{ikx^3} \begin{pmatrix} 1\\ 0\\ \frac{k}{E+m}\\ 0 \end{pmatrix}$$
(V.133)

Ansatz für die reflektierte Welle in Gebiet I mit Impuls (-k):

$$\psi_{\text{refl}}(x) = e^{-iEt} \left\{ a \cdot e^{-ikx^3} \begin{pmatrix} 1\\0\\-\frac{k}{E+m}\\0 \end{pmatrix} + b \cdot e^{-ikx^3} \begin{pmatrix} 0\\1\\0\\\frac{k}{E+m} \end{pmatrix} \right\}$$
(V.134)

- a: Amplitude für reflektierten Spin  $\uparrow$  Anteil.
- b: Amplitude für reflektierten Spin  $\downarrow$  Anteil.

Im Gebiet I ist

$$\psi_I(x) = \psi_{\text{ein}}(x) + \psi_{\text{refl}}(x) \tag{V.135}$$

In Gebiet II gibt es dagegen nur die durchgehende (transmittierte) Welle mit Impuls

$$\psi_{II}(x) = \psi_{\text{trans}}(x) = e^{-iEt} \left\{ c \cdot e^{iqx^3} \begin{pmatrix} 1\\ 0\\ \frac{q}{E-V_0+m} \\ 0 \end{pmatrix} + d \cdot e^{iqx^3} \begin{pmatrix} 0\\ 1\\ 0\\ -\frac{q}{E-V_0+m} \end{pmatrix} \right\}$$
(V.136)

Hier gilt  $q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}$ . Die Koeffizienten a, b, c, d folgen aus der Stetigkeit von  $\psi(x)$  bei

$$x = 0$$
:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \tag{V.137}$$

$$\Rightarrow \qquad 1 + a = c \tag{I. Komponente) (V.138)}$$

$$1 + a = c$$

1

$$b = d$$

$$-a = c \frac{q}{k} \frac{E+m}{E-V_0+m}$$

$$b = -d \frac{q}{k} \frac{E+m}{E-V_0+m}$$

$$(1. Homponents) (V.100)$$

$$(2. Komponents) (V.139)$$

$$(3. Komponents) (V.140)$$

$$(4. Komponents) (V.141)$$

 $\Rightarrow b = d = 0$  aus (V.139) und (V.141). Das heißt, die Spins klappen nicht um!

#### **Diskussion:**

1.) Für  $|E - V_0| < m$ , das heißt  $-m + V_0 < E < m + V_0$ , ist q rein imaginär und man hat exponentielle Dämpfung im Gebiet II:

$$\psi_{II} \sim e^{-\sqrt{m^2 - |E - V_0|^2}x^3}$$

2.) Erhöht man die Schwellenenergie  $V_0$  jedoch auf  $V_0 \ge E + m$  dann wird q reell und wir haben eine oszillierende Lösung!

⇒ Durchgehende Welle! ("Kleinsches Paradoxon") Für genügend hohe Schwellenenergien ergibt sich eine durchgehende Welle. Die Berechnung der transmittierten und relektierten Stromdichten führt auf

$$\frac{j_{\rm trans}}{j_{\rm ein}} = \frac{4r}{(1+r)^2} \qquad \qquad \frac{j_{\rm refl}}{j_{\rm ein}} = \left(\frac{1-r}{(1+r)}\right)^2 \tag{V.142}$$

mit dem Reflektionskoeffizienten

$$r = \frac{q}{k} \frac{E+m}{E-V_0+m}$$

Mit q > 0, k > 0 folgt für den Fall  $V_0 > E + m \Rightarrow r < 0$ . Das bedeutet dann, dass  $j_{refl} > j_{ein}$  ist! Eine mögliche Interpretation ist die Paarerzeugung von e<sup>-</sup> und e<sup>+</sup> Paaren an der Schwelle. In jedem Fall: Zusammenbruch der Einteilcheninterpretation im relativistischen Grenzfall. Dies führt auf die Quantenfeldtheorie.

### V.7. Diracsches Löcher Bild

Achtung: Historisch

Haben gesehen:

- positive Energiezustände stimmen mit experimentellen Resultaten überein  $\rightarrow$  Pauli-Gleichung
- negative Energiezustände können nicht ignoriert werder für Wellenpakete mit Lokalisierung  $\ll \frac{1}{m}$

Scheinbares Problem: Warum gibt es keinen Übergang eines positiven Energiezustands in einen mit beliebig negativer Energie (Abbildung V.4)?  $\Rightarrow$  Instabilität des Elektrons!

Ausweg: Löcherbild von Dirac (1930) Im Grundzustand (im Vakuum) sind sämtliche Zustände negativer Energie besetzt, der "Dirac-See" ist exakt halb gefüllt (Abbildung V.5).



Abbildung V.4.: Übergang eines Elektrons auf einen Zustand negativer Energie



Abbildung V.5.: Im Grundzustand sind sämtliche Zustände negativer Energie besetzt, der "Dirac-See" ist exakt halb gefüllt.

Dann verhindert das Pauli-Verbot den Prozess (\*). Angeregter Zustand: Elektron negativer Energie geht in Zustand positiver Energie über (Abbildung V.6).

Dies hinterlässt ein Loch mit Ladung  $-(-|e_0|) = |e_0|$ 

$$\gamma \rightarrow e^+ + e^-$$

(Dieser Prozess ist nur in Anwesenheit eines Potentials möglich)

 $\Rightarrow$  Paarerzeugung von Elektron und Positron aus dem Vakuum! Die Löcher werden als Anti-Teilchen Interpretiert!

• Spinor mit negativer Energie:

Wellenfunktion: 
$$v_1(p)e^{i(E_{p'}t-\vec{p'}\cdot\vec{x})}$$
 (V.143)

Energie<br/>eigenzustand mit Energie $-E_p,$ mit Impuls $-\vec{p}$ und Spin <br/>im Ruhesystem $^{1\!/\!2}$ 

Ist dieser Zustand *unbesetzt*, dann haben wir Teilchen mit Ladung + $|e_0|$ , Energie  $E_{\vec{p}}$  und Impuls  $\vec{p}$  mit Spin  $-1/2 \Rightarrow Positron$ .

• Dieses "Löcherbild" bildet nur vorläufige, historische Interpretation der Dirac-Theorie: Entgültige Formulierung in der Quanten-Feld-Theorie:



Abbildung V.6.: Anregung eines Teilchens im Zustand negativer Energie. Das entstehende "Loch" wird als Positron interpretiert, das angeregte Teilchen als Elektron.

 $\begin{array}{rcl} Wellenfunktion & \to & Quantenfeld \\ \psi(t,\vec{x}) & \to & \hat{\psi}(t,\vec{x}) \\ b(p,r), d(p,r) & \to & \hat{b}^r_{\vec{p}}, \hat{d}^r_{\vec{p}} \mbox{ mit } \{\hat{b}^r_{\vec{p}}, \hat{d}^{s\dagger}_{\vec{q}}\} = \delta^{rs} \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q}) \\ & \mbox{ Erzeuger und Vernichter von Teilchen } \end{array}$ 

Probleme des Löcherbildes:

- Assymmetrie zwischen Elektronen und Positronen
- Was ist mit den Wechselwirkungen der Seeelektronen? Energie?
- Was ist mit Spin 0 Teilchen der Klein-Gordon-Gleichung?

In jedem Fall zwingt uns die Dirac- oder Klein-Gordon-Theorie den Ramen der Einteilchentheorie zu verlassen! Die Teilchenzahl ist nicht erhalten. Z.B. wird die Impulsunschärfe  $\Delta p \gg \frac{1}{m}$  so kommt es zur Teilchenerzeugung.

# V.8. Relativistisches Teilchen (s = 0) im Coulomb-Potential

#### **Spin-0: Klein-Gordon-Gleichung** $(\hbar = c = 1)$

$$-\partial_t^2 \psi = -\vec{\nabla}^2 \psi + m^2 \psi$$
 freie Klein-Gordon-Gleichung (V.144)

Kopplung an elektromagnetisches Feld durch minimale Substitution:

$$i\partial_t \to i\partial_t - e\Phi$$
  $-i\vec{\nabla} \to -i\vec{\nabla} - e\vec{A}$  (V.145)

$$(i\partial_t - e\Phi)^2\psi = (-i\vec{\nabla} - e\vec{A})^2\psi + m^2\psi$$
(V.146)

Nun:

 $\Rightarrow$ 

i) Stationäre Lösungen mit positiver Energie:

$$\psi(\vec{x},t) = e^{-iEt}\psi(\vec{x}) \qquad E > 0$$
 (V.147)

ii) Coulomb-Potential:

$$\vec{A}=0 \qquad \qquad \Phi(\vec{x},t)=\Phi(r)=-\frac{Ze_0^2}{r}$$

iii) Separationsansatz:  $\rightarrow$  Kugelkoordinaten

$$\psi(\vec{x}) = R(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{V.148}$$

Mit  $Y_{lm}$ : Kugelflächenfunktionen. Resultierende Differentialgleichung für R(r) lautet:

$$\left[-\frac{1}{r}\left(\frac{d}{dr}\right)^2 r + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R(r) = \left[(E - e\Phi)^2 - m^2\right] R(r)$$
(V.149)

Betrachten den *nichtrelativistischer Limes:*  $E = m + E', E', e\Phi \ll m$  Dann folgt für die rechte Seite von (V.149):

$$\left[(E - e\Phi)^2 - m^2\right] = (m + E')^2 - 2e\Phi(m + E') + (e\Phi)^2 - m^2 \tag{V.150}$$

$$= 2m(E' - e\Phi) + \underbrace{E'^2 - 2e\Phi E' + (e\Phi)^2}_{(E' - e\Phi)^2}$$
(V.151)

$$\approx 2m(E' - e\Phi)$$
 (V.152)

 $\rightarrow$  Schrödingergleichung

(V.149) beschreibt Spin-0 Teilchen (z.B.  $\pi^-$ -Meson) im Coulombfeld eines Z-fach geladenen Atomkerns (experimentell realisierbar). Einsetzen des Potentials:  $\Phi = -\frac{Ze_0^2}{r}$  in (V.149) liefert:

$$\left[-\frac{1}{r}\left(\frac{d}{dr}\right)^2 r + \frac{l(l+1) - Z^2 e_0^2}{r^2} - \frac{2Z e_0^2 E}{r} - (E^2 - m^2)\right] R(r) = 0$$
(V.153)

Substitution:

$$\sigma^{2} = 4(m^{2} - E^{2})$$
$$\gamma = Z e_{0}^{2}$$
$$\rho = \sigma \cdot r$$
$$\lambda = \frac{2E\gamma}{\sigma}$$

Nebenbemerkung:  $\gamma, \lambda, \rho$  sind dimensionslos.

$$\left[\frac{d^2}{d(\rho/2)^2} + \frac{2\lambda}{\rho/2} - 1 - \frac{l(l+1) - \gamma^2}{(\rho/2)^2}\right]\rho R(\rho) = 0$$
(V.154)

Zum Vergleich: Schrödingergleichung für H-Atom:

Ansatz:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta,\varphi)$$
(V.155)

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right]u(\rho) = 0$$
 (V.156)

mit  $\rho_0 = \sqrt{\frac{2m}{|E|}} Z e_0^2$ . Mit dem Spektrum:

$$\rho_0 = 2(N+l+1) \qquad N = 0, 1, 2, \dots$$

$$\Rightarrow \qquad E_{\text{H-Atom}} = -\frac{2mZ^2 e_0^4}{\rho_0^2} = -\frac{mZ^2 e_0^4}{2(N+l+1)^2} \qquad (V.157)$$

bzw. mit der "Hauptquantenzahl"

$$n = N + l + 1$$

$$\Rightarrow \qquad E_{\text{H-Atom}} = -\frac{mZ^2 e_0^4}{2n^2} \qquad (V.158)$$

Wir sehen, dass die Klein-Gordon-Gleichung (V.154) im Coulombfeld vom gleichen Typ ist! (V.154) aus (V.156) durch Substitution:

$$\rho'_0 = 2\lambda$$
  $\rho' = \rho/2$   $l'(l'+1) = l(l+1) - \gamma^2$ 

Das heißt wir haben die Quantisierungsbedingung:

$$2\lambda = 2(N + l' + 1) \qquad N = 0, 1, 2, \dots$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{2E\gamma}{2\sqrt{m^2 - E^2}} = \lambda \stackrel{!}{=} N + l' + 1 \qquad (V.159)$$

Auflösen nach E liefert das Spektrum!

$$E^{2}\gamma^{2} = \lambda^{2}(m^{2} - E^{2}) \tag{V.160}$$

$$E^2(\gamma^2 + \lambda^2) = \lambda^2 m^2 \tag{V.161}$$

 $\Rightarrow$  $\Rightarrow$ 

$$E = \pm \frac{m}{\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{\lambda^2}}} \qquad \qquad \text{für } \gamma \to 0 \quad (V.162)$$

$$\lim_{\gamma \to 0} E = \pm m \qquad \text{wir wollen } + m \tag{V.163}$$

$$E_{\text{KG-Atom}} = \frac{m}{\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{\lambda^2}}} = m \left[ 1 + \frac{(Z \, e_0^2)^2}{(N + l' + 1)^2} \right]^{-1/2} \tag{V.164}$$

Nun l'über <br/> lausdrücken:  $l'(l'+1) = l(l+1) - \gamma^2$ 

$$l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{(l+1/2)^2 - \gamma^2}$$
  

$$\lambda = N + \frac{1}{2} + \sqrt{(l+1/2)^2 - \gamma^2}$$
(V.165)

 $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

Mit der Hauptquantenzahl n = N + l + 1 und c und  $\hbar$  eingesetzt:

$$E_{n,l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{[n - (l + 1/2) + \sqrt{(l + 1/2)^2 - \gamma^2}]^2}}}$$
(V.166)

mit  $\gamma = Z \frac{e_0^2}{hc}$ . Nun entwickeln wir dies für kleine  $\gamma$  (n = 0, 1, 2, ..., und l = 0, 1, 2, ..., n - 1):

$$E_{n,l} = mc^2 \left[ \underbrace{1}_{\text{Ruheenergie}} - \underbrace{\frac{\gamma^2}{2n^2}}_{\text{NR-Energie}} - \underbrace{\frac{\gamma^4}{2n^4} \left( \frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right)}_{1. \text{ relativistische Korrektur}} + \mathcal{O}(\gamma^6) \right]$$
(V.167)

#### Kommentare:

- Aufhebung der *l*-Entartung in der relativistischen Theorie
- (V.166) führt zu imaginären Energien für

$$l + 1/2 < Z \frac{e_0^2}{\hbar c} \sim \frac{Z}{137}$$

 $\Rightarrow$  Für s-Zustände (l=0): Z>68.5

 $\Rightarrow$ Lösung unsinnig für große Kerne, diese haben aber eine endliche Ausdehnung, die hier nicht berücksichtigt wurde.

• (V.166) beschreibt  $\pi^-$ -mesonisches Atom in Experiment hervorragend.

**Spin-**<sup>1</sup>/2: **Dirac-Gleichung im Coulombfeld** Aufwändig, Problem lässt sich wiederum auf das nichtrelativistische Schrödingerproblem abbilden (siehe z.B. Schwabl: QMII, Björken & Drell)

Gesamtdrehimpuls hier:  $\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{G}$ 

 $E_{n,j}$ 

 $\hat{J}^2$ ,  $\hat{J}_z$  und  $\hat{H}_{\text{Dirac}}$  kommutieren miteinander, besitzen demnach gemeinsames System von Eigenvektoren:  $|n, j, m\rangle$ . Wir erwarten eine Entartung in m.

Ergebnis:

$$\boxed{j = l \pm 1/2}$$
(V.168)  
$$= \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}}\right)^2}}$$
$$= mc^2 \left[1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4}\right) + \mathcal{O}(\alpha^6)\right]$$
(V.169)

mit  $\alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c}$ . Hier ist (j + 1/2) ganzzahlig, in Klein-Gordon-Theorie ist dieser Term halbzahlig.

# **VI.** Streutheorie

Wir wollen die nichtrelativistische Streuung eines Teilchens an einem anderen sehr viel schwereren Teilchen betrachten (zum Beispiel Elektron an Atomkern).

**Beschreibung:** Streuung eines Teilchens an einem kugelsymmetrischen Potential V(r), das rascher als 1/r abfällt. Das Coulomb-Potential mit  $V \sim 1/r$  wollen wir als Grenzfall gerade noch zulassen.

#### Szenario:

i) Einfallendes Wellenpaket  $|\phi(t)\rangle$  spür<br/>t $\hat{H}=\hat{H}_0.\ z \widehat{=}$ Streuzentrum



ii) Wechselwirkung mit Streuzentrum  $|\phi(t)\rangle$ spürt $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ 



iii) Gestreutes Wellenpaket  $|\phi(t)\rangle$  spürt $\hat{H}=\hat{H}_0$ 



iv) Nachweis im Detektor: Zustandsreduktion

#### VI. Streutheorie



Dabei wollen wir nur elastische Streuung betrachten (Energie sei vor und nach der Streuung identisch).

## VI.1. Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$
  $\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$  (VI.1)

Das Eigenwertproblem ist für  $\hat{V} \to 0$  gelöst:

$$\hat{H}_0 |\phi_0\rangle = E |\phi_0\rangle \tag{VI.2}$$

mit  $E = \frac{\vec{k}^2}{2m} \in \mathbb{R}, |\phi_0\rangle = |\vec{k}\rangle$  (Impulseigenzustand) Gesucht ist  $|\psi\rangle$  mit

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{VI.3}$$

mit identischem E! Sowohl  $\hat{H}_0$  als auch  $\hat{V}$  haben ein kontinuierliches Spektrum. Das heißt  $|\psi\rangle \underset{V \to 0}{\longrightarrow} |\phi_0\rangle$ . Formale Lösung:

$$|\psi\rangle = |\phi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0}\hat{V}|\psi\rangle \tag{VI.4}$$

Da  $(E - \hat{H}_0)|\psi\rangle = (E - E)|\phi_0\rangle + \hat{V}|\psi\rangle$  ist folgt hieraus (VI.3) und die Randbedingung  $|\psi\rangle \underset{V \to 0}{\longrightarrow} |\phi_0\rangle$  ist erfüllt.

**Problem:** (VI.4) enthält den singulären Operator  $\frac{1}{E-\hat{H}_0}$ , da  $\hat{H}_0$  ein kontinuierliches Spektrum hat! Regularisierung durch Verschiebung des Pols ins leicht Komplexe:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V} |\psi^{(\pm)}\rangle \tag{VI.5}$$

"LIPPMANN-SCHWINGER-GLEICHUNG"

#### In der Ortsdarstellung:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x} | \phi_0 \rangle + \int d^3 x' \, \langle \vec{x} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle \tag{VI.6}$$

Für  $|\phi_0\rangle = |\vec{p}\rangle$  folgt  $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$  Impulseigenzustände im  $\mathbb{R}^3$  sind nicht normierbar sondern als uneigentliche Diracvektoren auf  $\delta$ -Funktionen normiert:

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \int d^3 x \, \langle \vec{p}' | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \int d^3 x \, e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{x}} \cdot \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}$$
$$= \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^3} \, e^{i(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{y}} = \delta^{(3)} (\vec{p} - \vec{p}')$$
(VI.7)

In der Impulsdarstellung lautet die Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$\langle \vec{p} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{p} | \phi_0 \rangle + \frac{1}{E - \frac{\vec{p}^2}{2m} \pm i\epsilon} \langle \vec{p} | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle$$

$$\langle \vec{p} | \phi_0 \rangle = \delta^{(3)} (\vec{p} - \vec{k}) \text{ für } | \phi_0 \rangle = | \vec{k} \rangle$$

$$(VI.8)$$

Definition VI.1.1 (Green'sche Funktion).

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{x} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{x}' \rangle \tag{VI.9}$$

Für  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  gilt

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$
(VI.10)

Beweis:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{x} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{x}' \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p \, \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \underbrace{\langle \vec{p} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{x}' \rangle}_{= \frac{1}{E - \frac{\vec{p}^2}{2m} \pm i\epsilon} \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle}_{= \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{E - \frac{\vec{p}^2}{2m} \pm i\epsilon}$$
(VI.11)

Das Integral lösen wir durch die Substitution  $\vec{p} = \hbar \vec{q}, E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}, \tilde{\epsilon} = \frac{2m}{\hbar} \epsilon$ :

$$G_{\pm} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} dq \, q^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \, \frac{e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|\cdot\cos\theta}}{k^2 - q^2 \pm \tilde{\epsilon}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{i|\vec{x}-\vec{x}'|} \cdot 2\pi \int_0^{\infty} dq \, \frac{q \cdot (e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|} - e^{-iq|\vec{x}-\vec{x}'|})}{k^2 - q^2 \pm i\tilde{\epsilon}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{i}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \frac{q \, e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\tilde{\epsilon}}$$

$$= \frac{i}{4\pi^2} \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dq \, \frac{q \, e^{iq|\vec{x}-\vec{x}'|}}{(q-k\mp i\epsilon)(q+k\pm i\epsilon)}$$
(VI.12)

mit  $\tilde{\epsilon} = 2k\epsilon$ . Der Integrand besitzt Pole bei  $q = +k \pm i\epsilon$  und  $q = -k \mp i\epsilon$  (Abbildung VI.1). Mit Hilfe des Residuensatzes lässt sich dieses Integral nun einfach lösen. Hierzu schliessen wir den Integrationsweg in der oberen Halbebene (erlaubt da dort der Integrand durch den Exponent im Zähler verschwindet). Es folgt

$$G_{\pm} = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \frac{\pm k}{\pm 2k} e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}$$
$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \qquad \Box \quad (\text{VI.13})$$

VI. Streutheorie



Abbildung VI.1.: Pole des Integranden von (VI.12) und Integrationsweg zu Lösung durch Residuensatz



Abbildung VI.2.: Für ein Potential endlicher Reichweite lässt sich eine Fernfeldnäherung durchführen.

Nebenbemerkung:  $\overline{G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}')}$  ist die Green'sche Funktion zur Helmholtz-Gleichung:

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \tag{VI.14}$$

Nun wollen wir ein rein ortsabhängiges Potential annehmen:  $\hat{V} = V(\hat{\vec{x}})$  Dann ist  $\langle \vec{x}' | V(\hat{\vec{x}}) | \vec{x} \rangle = V(\vec{x}) \, \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$  und die Lippmann-Schwinger-Gleichung wird zur *Integralgleichung* für die gesuchte Wellenfunktion  $\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ .

$$\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x} | \phi_0 \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \, \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \cdot \langle \vec{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \tag{VI.15}$$

Falls  $V(\vec{x}')$  eine endliche Reichweite hat, lässt sich eine Fernfeldnäherung  $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$  durchführen (Abbildung VI.2). Wir wollen nun einige neue Bezeichnungen einführen:

$$r := |\vec{x}| \qquad \qquad r' := |\vec{x}'| \qquad \qquad \alpha := \measuredangle(\vec{x}, \vec{x}')$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} |\vec{x} - \vec{x}'| &= \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \alpha} \\ &= r \left( 1 - 2\frac{r'}{r} \cos \alpha + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \right)^{1/2} \\ &\underset{\frac{r'}{r} \to 0}{\approx} r \left( 1 - \frac{r'}{r} \cos \alpha \right) + \mathcal{O}\left( \left(\frac{r'}{r}\right)^2 \right) \\ &= r - \hat{r} \cdot \vec{x}' \end{aligned}$$
(VI.16)



Abbildung VI.3.: Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung für örtlich begrenzte Potentiale ist eine Linearkombinationen von einlaufender Planarwelle und auslaufender Kugelwelle

Mit  $\hat{r} := \frac{\vec{x}}{r}$ . Weiterhin definieren wir:  $\vec{k}' := k\hat{r}$ : Wellenzahlvektor in Richtung des Beobachtungspunktes. Damit folgt

$$e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|} = e^{\pm ikr} e^{\mp i\vec{k}' \cdot \vec{x}'}$$
(VI.17)

Definieren den Wellenzahlvektor  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ , für den gilt  $\langle \vec{k} | \vec{k'} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k'})$  und  $\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ . Dann folgt für (VI.15) mit  $|\phi_0\rangle = |\vec{k}\rangle$ :

$$\langle \vec{x} | \psi^{(\pm)} \rangle \xrightarrow[r \to \infty^*]{} \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ikr} e^{\mp i\vec{k}' \cdot \vec{x}'}}{r} V(\vec{x}') \cdot \langle \vec{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \tag{VI.18}$$

\*Bzw.  $r\gg L$ wobe<br/>iLeine charakteristische Länge von  $V(\vec{x})$  ist

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{\pm ikr}}{r} f(\pm\vec{k}',\vec{k}) \right]$$
(VI.19)

mit der "STREUAMPLITUDE":

$$f(\pm \vec{k}', \vec{k}) := -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^{3/2} \int d^3 x' \, e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \tag{VI.20}$$

beziehungsweise

$$f(\pm \vec{k}', \vec{k}) = -(2\pi)^2 \frac{m}{\hbar^2} \langle \pm \vec{k}' | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle$$
(VI.21)

(VI.19) macht klar, dass wir es im Fernfeld mit Linearkombinationen der ursprünglichen Planarwelle  $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$  und für + (-) einer aus-(ein-)laufenden Kugelwelle  $\frac{e^{\pm ikr}}{r}$  zu tun haben. Die physikalisch sinnvolle Lösung ist  $|\psi^{(+)}\rangle$  (Abbildung VI.3).

$$\langle \vec{x} | \psi_+ \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}',\vec{k}) \right]$$
 (VI.22)

### VI.2. Differentieller Wirkungsquerschnitt

Der differentielle Wirkungsquerschnitt gibt die Zahl der Teilchen an, die in das Winkelelement  $d\Omega$  gestreut werden, dividiert durch die Zahl der einfallenden Teilchen und  $d\Omega$  (Abbildung VI.4). **Definition VI.2.1** (Differentieller Wirkungsquerschnitt).

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} := \frac{1}{N_{\rm ein}} \frac{dN(\Omega)}{d\Omega} \tag{VI.23}$$



Abbildung VI.4.: Der differentielle Wirkungsquerschnitt eines Streuprozesses ist definiert als  $\frac{1}{N_{\rm ein}} \frac{dN(\Omega)}{d\Omega}.$ 

Die Bestimmung von  $N_{ein}$  und  $dN(\Omega)$  erfolgt über Teilchenstromdichte:

$$N_{\rm ein} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, j_{\rm ein} \tag{VI.24}$$

$$dN(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, j_r r^2 d\Omega \tag{VI.25}$$

**Einfallende Teilchenstromdichte:** Sei die einlaufende Welle durch die Wellenfunktion  $\psi_{ein}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}-iEt/\hbar}$  charakterisiert. Dann ist

$$\vec{j}_{\rm ein} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_{\rm ein}^* \vec{\nabla} \psi_{\rm ein} - \psi_{\rm ein} \vec{\nabla} \psi_{\rm ein}^*) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi_{\rm ein}(\vec{x}, t)|^2 \tag{VI.26}$$

$$N_{\rm ein} = \frac{\hbar k}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, |\psi_{\rm ein}(\vec{x}, t)|^2 \tag{VI.27}$$

#### Auslaufende radiale Komponente der Stromdichte

Kugelwellenanteil:

$$\psi_r(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{f(\vec{k}',\vec{k})}{r} e^{ikr - iEt} = \frac{f(\vec{k}' - \vec{k})}{r} \psi_{ein}(r \, \vec{e_r}, t)$$
$$\vec{\nabla}_{\text{Kugelkoordinaten}} = \vec{e_r} \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e_\phi}(\ldots) + \vec{e_\theta}(\ldots)$$
$$j_r = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_r^* \partial_r \psi_r - \psi_r \partial_r \psi_r^*)$$
(VI.28)

 $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

$$= \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{f(\vec{k}', \vec{k})}{r} \right|^2 \cdot |\psi_{\text{ein}}(r \, \vec{e}_r, t)|^2 \tag{VI.29}$$

Somit:

$$\frac{dN(\Omega)}{d\Omega} = |f(\vec{k}',\vec{k})|^2 \frac{\hbar k}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, |\psi_{\rm ein}(r\,\vec{e}_r,t)|^2 \tag{VI.30}$$

Unter Vernachlässigung der Verbreiterung der Wellenpakete  $\psi_{ein}$  sind die Integrale in  $N_{ein}$  und  $\frac{dN(\Omega)}{d\Omega}$  gleich und es folgt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N_{\rm ein}} \frac{dN(\Omega)}{d\Omega} = |f(\vec{k}', \vec{k})|^2$$
(VI.31)

oder in Worten:

 $|Streuamplitude|^2 = differentieller Wirkungsquerschnitt$ 

# VI.3. Born'sche Näherung

Die Behandlung ist bisher noch nicht von direktem Nutzen, da die Streuamplitude  $f(\vec{k}', \vec{k})$  noch den unbekannten Ket  $|\psi^+\rangle$  enthält. Wir wollen nun eine pertubative Methode zur Bestimmung desselben ableiten.

**Born'sche Näherung** Iterative Lösung der Integralgleichung für  $\langle \vec{x} | \psi^+ \rangle$ :

$$\langle \vec{x} | \psi^+ \rangle = \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle + \frac{e^{+ikr}}{(2\pi)^{3/2}r} \left( -(2\pi)^2 \frac{m}{\hbar^2} \right) \langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi^+ \rangle \tag{VI.32}$$

**Ansatz:**  $\hat{V}$  enthalte eine Kopplungskonstante  $\alpha \in \mathbb{R}$ :

 $\hat{V} = \alpha \hat{v} \text{ mit } \alpha \ll 1$ 

Dann setzen wir an:

$$|\psi^{+}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^{n} |\psi^{+}_{(n)}\rangle \tag{VI.33}$$

Randbedingung:

$$|\psi_{(0)}^{+}\rangle = |\psi^{+}\rangle|_{\alpha=0} = |\vec{k}\rangle \tag{VI.34}$$

Dann folgt mittels Einsetzen in (VI.32) für die lineare Ordnung in  $\alpha$ :

$$\alpha \left\langle \vec{x} | \psi_{(1)}^{+} \right\rangle = \frac{e^{+ikr}}{(2\pi)^{3/2}r} \left( -(2\pi)^2 \frac{m}{\hbar^2} \right) \left\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \right\rangle \tag{VI.35}$$

bzw.

$$f_{(1)}(\vec{k}',\vec{k}) = -(2\pi)^2 \frac{m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle$$
(VI.36)

1. Born'sche Näherung der Streuamplitude

Expliziter:

$$f_{(1)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \, V(\vec{x}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'}$$

Die Streuamplitude in erster Born'scher Näherung ist die Fouriertransformierte des Streupotentials!

**Kugelsymmetrisches Potential** Sei V = V(r). In Kugelkoordinaten ist

$$\int d^{3}x' \dots = \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_{0}^{\infty} dr \, r^{2} \dots$$
(VI.37)

#### VI. Streutheorie

Dann ist:

$$\begin{split} \int d^3x' \, V(|\vec{x}'|) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}'} &= \int d^3x \, V(r) e^{i|\vec{k}-\vec{k}'|r\cos\theta} \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr \, r^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta e^{i|\vec{k}-\vec{k}'|r\cos\theta} V(r) \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr \, r \frac{V(r)}{i|\vec{k}-\vec{k}'|} \left( e^{i|\vec{k}'-\vec{k}|r} - e^{-i|\vec{k}'-\vec{k}|r} \right) \\ &= 4\pi \int_0^\infty dr \, V(r) r \frac{\sin(|\vec{k}'-\vec{k}|r)}{|\vec{k}'-\vec{k}|} \end{split}$$

und somit:

$$f_{(1)}(|\vec{k}' - \vec{k}|) = -\frac{2m}{\hbar |\vec{k}' - \vec{k}|} \int_{0}^{\infty} dr \, r \, V(r) \sin(|\vec{k}' - \vec{k}|r) \tag{VI.38}$$

#### **Beispiel: Yukawa-Potential**

$$V(r) = \frac{V_0}{\mu r} e^{-\mu r}$$

mit  $V_0, \mu$ : const.,  $\frac{1}{\mu}$ : Reichweite des Potentials. Die Streuamplitude in erster Born'scher Näherung (mit  $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ ) lautet:

$$f_{(1)}(q) = -\frac{2m}{\hbar q} \int_{0}^{\infty} dr \, V(r) \sin(qr) r$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar \mu q} \int_{0}^{\infty} dr \, Im(e^{iqr})e^{-\mu r}$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar \mu q} \operatorname{Im} \int_{0}^{\infty} dr \, e^{iqr-\mu r}$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar \mu q} \underbrace{\operatorname{Im} \left[\frac{-1}{iq-\mu}\right]}_{\operatorname{Im} \frac{1}{2}\left[\frac{1}{\mu-iq} - \frac{1}{\mu+iq}\right]}_{=\frac{q}{\mu^2+q^2}}$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar \mu} \cdot \frac{1}{q^2 + \mu^2}$$
(VI.39)

mit  $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$  wobe<br/>ik die Wellenzahl der einlaufenden Welle und<br/>  $\theta$  der Streuwinkel ist (Abbildung VI.5). Damit ergibt sich für den differentiellen Wirkungsquerschnitt des Yukawa-Potentials:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{(1)} = \left(\frac{2mV_0}{\hbar\mu}\right)^2 \frac{1}{[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]^2} \tag{VI.40}$$



Abbildung VI.5.: Erläuterung der neu eingeführten Variablen q und  $\theta$ .

Interessanterweise besitzt  $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{(1)}$  für das Yukawa-Potential einen guten  $\mu \to 0$  Grenzwert mit  $\frac{V_0}{\mu} =$ const. =  $ZZ'e^2$ . Das Yukawa-Potential geht in diesem Grenzfall gerade in das Coulomb-Potential über:

$$V(r) \xrightarrow{\mu \to 0} \frac{ZZ'e^2}{r}$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{(1)}^{\text{Coulomb}} = \left(\frac{mZZ'e^2}{\hbar\mu}\right)^2 \frac{1}{k^2(1-\cos\theta)}$$

$$= \frac{1}{16} \left(\frac{ZZ'e^2}{E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}$$
(VI.41)

mit  $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$ . Dies ist bekannt als die klassische RUTHERFORD-FORMEL. Diese Ergebnisse stimmen zufälligerweise für das Coulomb-Potential mit dem exakten Ergebnis überein.

### VI.4. Die Born'sche Reihe

Wir wollen nochmals die iterative Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung unter anderem Blickwinkel betrachten:

$$|\psi^{+}\rangle = |\phi_{0}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_{0} + i\epsilon} \hat{V}|\psi^{+}\rangle \qquad (\text{VI.42})$$

**Definition VI.4.1** (Transfermatrix  $\hat{T}$ ).

$$\hat{V}|\psi^{+}\rangle =: \hat{T}|\phi_{0}\rangle \tag{VI.43}$$

 $\operatorname{mit}$ 

 $\Rightarrow$ 

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi^{+}\rangle &= E|\psi^{+}\rangle\\ \hat{H}_{0}|\phi_{0}\rangle &= E|\phi_{0}\rangle\\ \hat{H} &= \hat{H}_{0} + \hat{V} \end{aligned}$$

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung von links mit  $\hat{V}$  multiplizieren:

$$\hat{T}|\phi_0\rangle = \hat{V}|\phi_0\rangle + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}\hat{T}|\phi_0\rangle \tag{VI.44}$$

#### VI. Streutheorie



Abbildung VI.6.:  $G_+(\vec{x}', \vec{x}'')$ : "Propagator"; propagiert Teilchen von  $\vec{x}''$  nach  $\vec{x}'$ 

Die  $|\phi_0\rangle$  bilden eine Basis des Hilbertraums, da sie beliebige Planarwellen  $|\vec{k}\rangle$  sind. Somit gilt auch die Operatorgleichung:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{T}$$
(VI.45)

Für die exakte Streuamplitude gilt:

$$f(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{(2\pi)^2}{\hbar} m \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle$$
(VI.46)

Die Streu<br/>amplitude wird durch Matrixelemente von  $\hat{T}$ gebildet! Iterative Lö<br/>sung für $\hat{T}$ :

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} + \cdots$$
(VI.47)

entsprechend gilt für die Streuamplitude:

$$f(\vec{k}',\vec{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f_{(n)}(\vec{k}',\vec{k})$$
(VI.48)

$$f_{(1)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle \tag{VI.49}$$

$$f_{(2)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} | \vec{k} \rangle \tag{VI.50}$$

Explizite Form von  $f_{(2)}$ :

$$f_{(2)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' \, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}') \cdot \left[\frac{2m}{\hbar^2}G_+(\vec{x}',\vec{x}'')\right] V(\vec{x}'') e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}''} \tag{VI.51}$$

Physikalisches Bild: Zweifache Streuung (Abbildung VI.6)

## VI.5. Optisches Theorem

÷

Aussage: Imaginärteil der Vorwärtsstreu<br/>amplitude  $\hat{=}$  Totaler Wirkungsquerschnitt

$$\operatorname{Im} f(\theta = 0) = \frac{k\sigma_{\text{tot}}}{4\pi}$$

Wobei 
$$f(\theta = 0) := f(\vec{k}' = \vec{k}, \vec{k})$$
  $\xrightarrow{\vec{k}} \bullet \xrightarrow{\vec{k}} \sigma_{\text{tot}} := \int d\Omega$ 

Beweis:

$$f(\theta = 0) = f(\vec{k}, \vec{k}) = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k} \rangle$$
$$\operatorname{Im} \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle = \operatorname{Im} \langle \vec{k} | V | \psi^+ \rangle$$

 $\frac{d\sigma}{s\Omega}$ 

$$|\psi^{+}\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_{0} + i\epsilon} V |\psi^{+}\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \vec{k}| = \langle \psi^{+}| \cdot \left(\mathbb{1} - \frac{1}{E - \hat{H}_{0} - i\epsilon}\right)$$

Auflösen nach  $|\vec{k}\rangle$ 

$$\operatorname{Im}\langle \vec{k}|T|\vec{k}\rangle = \operatorname{Im}\left[\left(\langle\psi^{+}|-\langle\psi^{+}|\hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_{0}-i\epsilon}\right)V|\psi^{+}\rangle\right]$$
$$= \underbrace{\operatorname{Im}\langle\psi^{\pm}|V|\psi^{+}\rangle}_{-} \operatorname{Im}\langle\psi^{+}|\hat{V}\frac{1}{E-H_{0}-i\epsilon}\hat{V}|\psi^{+}\rangle$$

Erster Term verschwindet wegen  $V^{\dagger} = V$ . Nun benutzen wir die zentrale Beziehung

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi \,\delta(x)$$

wobei  $\mathbf{P}\!\left(\frac{1}{x}\right)$  den Cauchy'schen Hauptwert bezeichnet:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) P(\frac{1}{x}) dx = \lim_{\epsilon \to 0} \left( \int_{-\infty}^{-\epsilon} + \int_{\epsilon}^{\infty} \right) \frac{f(x)}{x} dx$$

Die Singularität wir symmetrisch ausgeschnitten. D.h.

$$\begin{aligned} \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\epsilon} &= \mathbf{P}\left(\frac{1}{E - \hat{H}_0}\right) + i\pi\,\delta(E - \hat{H}_0) \\ \Rightarrow \quad \mathrm{Im}\langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle &= -\pi \langle \psi^+ | V\,\delta(E - \hat{H}_0)\,V | \psi^+ \rangle \\ &= -\pi \langle \vec{k} | T^\dagger\,\delta(E - \hat{H}_0)\,T | \vec{k} \rangle \\ &= -\pi \int d^3k'\,\langle \vec{k} | T^\dagger | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle\,\delta\left(E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right) \end{aligned}$$

Nun ist

$$d^{3}k' = d\Omega' \, dk' \, k^{2} = d\Omega' dE \left(\frac{dk'}{dE}\right) {k'}^{2}$$
$$\frac{dE}{dk'} = \frac{\hbar^{2}}{2m} k' \quad \Rightarrow \quad d^{3}k' \, \delta \left(E - \frac{\hbar^{2}{k'}^{2}}{2m}\right) = d\Omega' \frac{2m}{\hbar^{2}} k' \text{ und } |\vec{k}| = |\vec{k}'|$$
$$\Rightarrow \quad \text{Im } f(0) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m(2\pi)^{3}}{\hbar^{2}} \left(-\frac{\pi mk}{\hbar^{2}} \int d\Omega' \left|\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle\right|^{2}\right) = \frac{k\sigma_{\text{tot}}}{4\pi}$$

# VII. Nichtrelativistische Vielteilchensysteme

#### **Beispiele:**

- **Elektronengas:** (Abbildung VII.1a) Die möglichen Wechselwirkungen sind die Coulombabstoßung und die Spin-Spin-Wechselwirkung.
- **Festkörper:** (Abbildung VII.1b) Ein Atomgitter mit beweglichen Valenzzellen und Wechselwirkungen zwischen diesen.

#### Atome mit mehreren Elektronen

Ziel: Quantenmechanische Beschreibung von Systemen von N identischen Teilchen.

Grundsätzlicher neuer Charakter im Gegensatz zur klassischen Beschreibung identischer Teilchen: Quantenteilchen sind ununterscheidbar (können nicht markiert, ("angemalt") werden).

### VII.1. Systemzusammensetzung und Austauschentartung

#### a) Zusammensetzung von 2-Teilchen-Systemen

$$H^{(12)} = h^{(1)} + h^{(2)} + h^{12}$$
(VII.1)

mit den Einteilchen-Hamiltonoperatoren  $h^{(1)}$  und  $h^{(2)}$ , die die gleiche Form besitzen (z.B.  $h = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ ).  $h^{12} = h^{21}$  sei eine symmetrische Wechselwirkung, z.B. Coulombpotential:  $V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{c}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$ . Dann gilt für nicht entartete  $h^1$  und  $h^2$ :

$$\begin{aligned} h^{1} |\epsilon_{a}^{1} \rangle &= \epsilon_{a} |\epsilon_{a}^{1} \rangle \\ h^{2} |\epsilon_{a}^{2} \rangle &= \epsilon_{a} |\epsilon_{a}^{2} \rangle \end{aligned} \tag{VII.2}$$

wobei a die Energiezustände nummeriert. Das heißt,  $h^1$  und  $h^2$  besitzen ein identisches Spektrum.



Abbildung VII.1.: Beispiele für Vielteilchensysteme

#### Spektrum des freien Systems.

$$H_0^{12} = h^{(1)} + h^{(2)}$$

1) Systeme (1) und (2) befinden sich im gleichen Energieeigenzustand

$$E_0 = 2\epsilon_a \quad \text{mit} \ |E_0\rangle = |\epsilon_a^1\rangle \otimes |\epsilon_a^2\rangle = |\epsilon_a^1 \ \epsilon_a^2\rangle$$
(VII.3)

2) Systeme (1) und (2) befinden sich in verschiedenen Zuständen. Demnach ist  $E_0$  zweifach entartet mit den Produktvektoren  $|u_1\rangle = |\epsilon_a^1 \epsilon_b^2\rangle$  und  $|u_2\rangle = |\epsilon_b^1 \epsilon_a^2\rangle$ .

$$E_0 = \epsilon_a + \epsilon_b \quad \text{mit } |E_0\rangle = c_1 |\epsilon_a^1 \epsilon_b^2\rangle + c_2 |\epsilon_b^1 \epsilon_a^2\rangle \quad a \neq b$$
(VII.4)

Entartung von  $H^{12}_0$ entsteht durch das Vertauschen der Teilsysteme. Daher nennt man das Phänomen "Austauschentartung".

#### Eigenwertproblem des Gesamthamiltonoperators:

$$H^{12} = H_0^{12} + h^{12} \tag{VII.5}$$

Wir betrachten  $h^{12}$  als Störung und behandeln das Problem mit zeitunabhängiger (oder Schrödinger'scher) Störungstheorie. Verhalten des entarteten Terms (VII.4):  $E = E_0 + \delta E$ . Der Wert von  $\delta E$  folgt aus der entarteten Störungstheorie:

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \delta E & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \delta E \end{vmatrix} = 0$$
(VII.6)

wobei  $a_{ij} = \langle u_i | h^{12} | u_j \rangle$  mit  $| u_1 \rangle = | \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 \rangle$ ,  $| u_2 \rangle = | \epsilon_b^1 \epsilon_a^2 \rangle$  mit  $a \neq b$  ist. Es gilt:

$$a_{11} = \langle u_1 | h^{12} | u_1 \rangle = \langle \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 | h^{12} | \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 \rangle$$
  

$$a_{22} = \langle u_2 | h^{12} | u_2 \rangle = \langle \epsilon_b^1 \epsilon_a^2 | h^{12} | \epsilon_b^1 \epsilon_a^2 \rangle \underset{1 \leftrightarrow 2}{=} \langle \epsilon_b^2 \epsilon_a^1 | h^{21} | \epsilon_b^2 \epsilon_a^1 \rangle = \langle \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 | h^{12} | \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 \rangle = a_{11}$$
(VII.7)

Ebenso  $a_{12} = a_{21}$ 

 $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \delta E & a_{12} \\ a_{12} & a_{11} - \delta E \end{vmatrix} = 0$$
(VII.8)

$$\delta E = a_{11} \pm a_{12} \tag{VII.9}$$

**Beobachtung:** Aufspaltung der Austauschentartung durch eine symmetrische Wechselwirkung falls  $a_{12} \neq 0$  (Abbildung VII.2).

$$E^{\pm} \approx \epsilon_a + \epsilon_b + \langle \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 | h^{12} | \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 \rangle \pm \langle \epsilon_a^1 \epsilon_b^2 | h^{12} | \epsilon_b^1 \epsilon_a^2 \rangle + \mathcal{O}(\langle h^{12} \rangle^2)$$
(VII.10)

Man berechnet die Eigenkets zu  $E^{\pm}$ :

$$|E^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\epsilon_a^1 \epsilon_b^2 \rangle \pm |\epsilon_b^1 \epsilon_a^2 \rangle \right) \tag{VII.11}$$

Demnach ist  $|E^+\rangle$  symmetrisch und  $|E^-\rangle$  ist antisymmetrisch unter Teilchenvertauschung.


Abbildung VII.2.: Aufspaltung der Entartung eines Zweiteilchengrundzustands durch Austauschwechselwirkung

b) Zusammensetzung von N Einteilchensystemen Nun N Teilsysteme jeweils unter dem Einfluss des gleichen Hamiltonoperators.

$$h^{(\nu)} |\epsilon_a^{\nu}\rangle = \epsilon_a |\epsilon_a^{\nu}\rangle \qquad \nu = 1, \dots, N \tag{VII.12}$$

Gesamthamiltonoperator ohne Wechselwirkung:

$$H_0 = \sum_{\nu=1}^N h^{(\nu)}$$

wirkt im Produktraum

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_1^{(N)}$$
$$H_0 |\epsilon_a^1 \epsilon_b^2 \dots \epsilon_n^N \rangle = E_0 |\epsilon_a^1 \epsilon_b^2 \dots \epsilon_n^N \rangle$$

mit Eigenwert  $E_0 = \epsilon_a + \epsilon_b + \dots + \epsilon_n$ 

**Entartung:** Jede Permutation und Verteilung der Eigenwerte  $\{\epsilon_a, \epsilon_b, \ldots, \epsilon_n\}$  auf die N Systeme ergibt ein identisches  $E_0$ .

- i) Sind sämtliche  $\epsilon_i$  sind unterschiedlich, dann existieren N! Eigenkets zum Eigenwert  $E_0$ .
- ii) Sind jeweils  $N_1, N_2, \ldots, N_k$  Gruppen von  $\epsilon_i$  identisch, dann gibt es  $t = \frac{N!}{N_1!N_2!\ldots N_k!}$  Eigenkets  $|u_1\rangle, |u_1\rangle, \ldots, |u_t\rangle$  zum Eigenwert  $E_0$ . Das heißt, dass die Austauschentartung t-fach ist!

$$|E_0\rangle = \sum_{\gamma=1}^t c_\gamma |u_\gamma\rangle \tag{VII.13}$$

**Einschalten einer symmetrischen Wechselwirkung**  $\sum_{\substack{i,j=1\\i\neq j}}^{N} h^{ij}$  hebt die Entartung wieder (teilweise) auf und  $E_0$  spaltet in eine Reihe von Termen auf. Allgemeine Behandlung für größere N sehr aufwändig.

**Gruppentheoretische Beschreibung:** Eigenkets zu  $E_0$  ohne Wechselwirkung bilden reduzible Darstellung der Permutationsgruppe der N-Teilchensysteme  $S_N$ . Die Wechselwirkung spaltet gerade jene Energieterme auf, die zu verschiedenen *irreduziblen* Darstellungen von  $S_N$  gehören.

- **Struktur:** Es entstehen 2 *nicht entartete* Terme  $E^{\pm}$ , sowie weitere *mindestens zweifach* entartete Terme  $E^i$ :
  - 1) Nichtentarteter Term  $E^+$  mit  $|E^+\rangle$  ist vollständig symmetrisch unter Vertauschung der Teilsysteme

$$|E^{+}\rangle = c \sum_{\gamma=1}^{t} |u_{\gamma}\rangle \tag{VII.14}$$

2) Nichtentarteter Term  $E^-$  mit  $|E^-\rangle$  ist vollständig antisymmetrisch unter Vertauschung der Teilsysteme. Angabe mittels "Slaterdeterminante":

$$|E^{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\epsilon_{a}^{1}\rangle & |\epsilon_{a}^{2}\rangle & \cdots & |\epsilon_{a}^{N}\rangle \\ |\epsilon_{b}^{1}\rangle & |\epsilon_{b}^{2}\rangle & \cdots & |\epsilon_{b}^{N}\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\epsilon_{n}^{1}\rangle & |\epsilon_{n}^{2}\rangle & \cdots & |\epsilon_{n}^{N}\rangle \end{vmatrix}$$
(VII.15)

Existiert *nur* wenn alle Teilsysteme in verschiedenen Zuständen sind. Die Struktur der weiteren entarteten Terme  $E^i$  folgt aus der Darstellungstheorie der  $S_N$ .

# VII.2. Permutationsoperatoren

Einführung von Permutations operatoren  $\hat{\mathcal{P}}$  zur mathematischen Beschreibung der Vertaus chung gleicher Systeme:

a) 2-Teilchensysteme  $\mathcal{L}^{(12)}$  sei Observable eines Zweiteilchensystems, z.B.  $\mathcal{L}^{(12)}(\vec{x}^1, \vec{p}^1, \vec{s}^1, \vec{x}^2, \vec{p}^2, \vec{s}^2)$ . Der unitäre Permutationsoperator  $\hat{\mathcal{P}}_{(12)}$  ist nun definiert durch

$$\hat{\mathcal{P}}_{(12)}\mathcal{L}^{12}\hat{\mathcal{P}}_{(12)}^{\dagger} = \mathcal{L}^{21}$$
(VII.16)

Offensichtlich ist  $\hat{\mathcal{P}}^2_{(12)} = \mathbb{1}$ . Dann ist  $\hat{\mathcal{P}}_{(12)}$  auch hermitesch:

$$\hat{\mathcal{P}}_{(12)}^{-1} = \hat{\mathcal{P}}_{(12)}^{\dagger} = \hat{\mathcal{P}}_{(12)}$$

 $\Rightarrow \{\mathbb{1}, \hat{\mathcal{P}}_{(12)}\}$  bilden Gruppe  $\mathcal{S}_2$ : Permutationsgruppe zweier Elemente.

$$S_{2}: \qquad \mathbb{1} \in S_{2} \qquad \hat{\mathcal{P}}_{(12)}^{-1} = \hat{\mathcal{P}}_{(12)} \qquad \mathbb{1}^{-1} = \mathbb{1}$$
$$\mathbb{1} \cdot \mathbb{1} = \mathbb{1} \qquad \mathbb{1} \cdot \hat{\mathcal{P}}_{(12)} = \hat{\mathcal{P}}_{(12)} \qquad \hat{\mathcal{P}}_{(12)} \cdot \hat{\mathcal{P}}_{(12)} = \mathbb{1} \qquad (\text{VII.17})$$

Sei nun  $\mathcal{L}^{12} = |v_k^1 v_l^2 \rangle \langle v_k^1 v_l^2|$  Projektor. Oberer Index zeigt Teilsystem an. Dann gilt:

$$\hat{\mathcal{P}}_{(12)}\mathcal{L}^{12}\hat{\mathcal{P}}_{(12)}^{\dagger} = |\hat{\mathcal{P}}_{(12)}v_{k}^{1}v_{l}^{2}\rangle\langle\hat{\mathcal{P}}_{(12)}v_{k}^{1}v_{l}^{2}| \\
\stackrel{!}{=} \mathcal{L}^{21} = |v_{k}^{2}v_{l}^{1}\rangle\langle v_{k}^{2}v_{l}^{1}| \\
\hat{\mathcal{P}}_{(12)}|v_{k}^{1}v_{l}^{2}\rangle = |v_{l}^{1}v_{k}^{2}\rangle$$
(VII.18)

104

 $\Rightarrow$ 

Reihenfolge der Kets im Produktzustand ist gleichgültig. Für die  $|E^+\rangle$  aus (VII.4) gilt

$$\hat{\mathcal{P}}_{(12)}|E^{\pm}\rangle = \pm|E^{\pm}\rangle \tag{VII.19}$$

Für Observable  $\mathcal{L}$ , die symmetrisch bezüglich Vertauschung von 1  $\leftrightarrow$  2 sind, das heißt, für die  $\mathcal{L}^{12} = \mathcal{L}^{21} = \mathcal{L}$  gilt, ist

$$[\mathcal{L}, \hat{\mathcal{P}}_{(12)}] = 0 \tag{VII.20}$$

Beispiel:

$$\mathcal{L} = H = \frac{(\vec{p}_1)^2}{2m} + \frac{(\vec{p}_2)^2}{2m} + V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$$
(VII.21)

**b)** *N*-**Teilchensysteme**  $\exists N!$  Permutationsoperatoren  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}$  ( $\rho = 1, \ldots, N!$ ). Hierin ist 1 enthalten. *Beispiel:* 

N = 3	Vertauschungsregel
$1 = \hat{\mathcal{P}}_{(1)(2)(3)}$	$1 \rightarrow 1, 2 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 3$
$\hat{\mathcal{P}}_{(123)}$	$1\rightarrow 2, 2\rightarrow 3, 3\rightarrow 1$
$\hat{\mathcal{P}}_{(132)}$	$1 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$
$\hat{\mathcal{P}}_{(12)(3)}$	$1\rightarrow2,2\rightarrow1,3\rightarrow3$
$\hat{\mathcal{P}}_{(13)(2)}$	$1 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 1, 2 \rightarrow 2$
$\hat{\mathcal{P}}_{(23)(1)}$	$2 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 2, 1 \rightarrow 1$

z.B.  $\hat{\mathcal{P}}_{(132)}$ :

 $\Rightarrow$ 

$$\hat{\mathcal{P}}_{(132)} | v_k^1 v_l^2 v_m^3 \rangle = | v_k^3 v_l^1 v_m^2 \rangle = | v_l^1 v_m^2 v_k^3 \rangle$$
$$\hat{\mathcal{P}}_{(132)} \mathcal{L}^{123} \hat{\mathcal{P}}_{(132)}^{\dagger} = \mathcal{L}^{312}$$
(VII.22)

Dies impliziert für die Ortswellenfunktion dreier Teilchen mit Koordinaten  $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$ :

$$\begin{split} \psi(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}) &= \langle \vec{x}^{1}, \vec{y}^{2}, \vec{z}^{3} | \psi \rangle \\ (\hat{\mathcal{P}}_{(132)} \psi)(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}) &= \langle \vec{x}^{1} \vec{y}^{2} \vec{z}^{3} | \hat{\mathcal{P}}_{(132)} \psi \rangle \\ &= \langle \hat{\mathcal{P}}_{(132)}^{\dagger} \vec{x}^{1} \vec{y}^{2} \vec{z}^{3} | \psi \rangle \\ &= \langle \vec{x}^{2} \vec{y}^{3} \vec{z}^{1} | \psi \rangle \\ &= \langle \vec{z}^{1} \vec{x}^{2} \vec{y}^{3} | \psi \rangle = \psi(\vec{z}, \vec{x}, \vec{y}) \end{split}$$
(VII.23)

Das heißt  $(\hat{\mathcal{P}}_{(132)}\psi)(\vec{x},\vec{y},\vec{z}) = \hat{\mathcal{P}}_{(132)}^{-1} \circ \psi(\vec{x},\vec{y},\vec{z}) = \psi(\vec{z},\vec{x},\vec{y})$ . Für vollständig symmetrische Observable  $\mathcal{L}$  gilt dann:

$$[\hat{\mathcal{P}}_{\rho}, \mathcal{L}] = 0 \qquad \qquad \rho = 1, \dots, N! \qquad (\text{VII.24})$$

Das heißt wenn  $|u\rangle$  Eigenvektor von  $\mathcal{L}$  mit Eigenwert u ist, so ist auch  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}|u\rangle$  Eigenvektor von  $\mathcal{L}$  mit Eigenwert u

$$\mathcal{L}|u\rangle = u|u\rangle$$
  
$$\mathcal{L}(\hat{\mathcal{P}}_{\rho}|u\rangle) = \hat{\mathcal{P}}_{\rho}(\mathcal{L}|u\rangle) = u(\hat{\mathcal{P}}_{\rho}|u\rangle) \qquad (\text{VII.25})$$

Im Allgemeinen ist  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}$  unitär, aber nicht hermitesch:

$$\hat{\mathcal{P}}^{\dagger}_{\rho} = \hat{\mathcal{P}}^{-1}_{\rho} \tag{VII.26}$$

# VII.3. Symmetrisierungs- und Antisymmetrisierungsoperator

Jede Permutation  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}$  kann als Produkt von Transpositionen  $\hat{\mathcal{P}}_{(ij)}$  dargestellt werden. Wir definieren den *Grad* einer Permutation  $(-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}} = \pm 1$  je nachdem ob  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}$  durch gerade (+1) oder ungerade (-1) Anzahl von Transpositionen dargestellt wird.

 ${\bf Definition~VII.3.1~(Symmetrisierung- \ und \ Antisymmetrisierungs operator).}$ 

$$S^{+} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho=1}^{N!} \hat{\mathcal{P}}_{\rho} \quad S^{-} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho=1}^{N!} (-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}} \hat{\mathcal{P}}_{\rho}$$
(VII.27)

Beispiele:

$$\begin{split} N &= 2: \quad S^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbbm{1} + \hat{\mathcal{P}}_{(12)}) \qquad S^{-} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbbm{1} - \hat{\mathcal{P}}_{(12)}) \\ N &= 3: \quad S^{+} = \frac{1}{\sqrt{6}} (\mathbbm{1} + \hat{\mathcal{P}}_{(123)} + \hat{\mathcal{P}}_{(132)} + \hat{\mathcal{P}}_{(12)(3)} + \hat{\mathcal{P}}_{(13)(2)} + \hat{\mathcal{P}}_{(23)(1)}) \\ S^{-} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (\mathbbm{1} + \hat{\mathcal{P}}_{(123)} + \hat{\mathcal{P}}_{(132)} - \hat{\mathcal{P}}_{(12)(3)} - \hat{\mathcal{P}}_{(13)(2)} - \hat{\mathcal{P}}_{(23)(1)}) \end{split}$$

Weiterhin gilt:

$$\hat{\mathcal{P}}_{\rho}S^{+} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho'=1}^{N!} \hat{\mathcal{P}}_{\rho}\hat{\mathcal{P}}_{\rho'}$$
(VII.28)

$$\hat{\mathcal{P}}_{\rho}S^{-} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho'=1}^{N!} (-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho'}} \hat{\mathcal{P}}_{\rho} \hat{\mathcal{P}}_{\rho'}$$
(VII.29)

Da für  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho} \in S_N$ ,  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho'} \in S_N$  auch  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}\hat{\mathcal{P}}_{\rho'} \in S_N$  gilt, folgt

$$\hat{\mathcal{P}}_{\rho}S^{+} = S^{+}\hat{\mathcal{P}}_{\rho} = S^{+} \qquad \qquad \hat{\mathcal{P}}_{\rho}S^{-} = S^{-}\hat{\mathcal{P}}_{\rho} = (-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}}S^{-} \qquad (\text{VII.30})$$

# Weitere Eigenschaften

• Es gilt  $(S^{\pm})^2 = \sqrt{N!}S^{\pm}$ 

Beweis:

$$(S^{-})^{2} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho=1}^{N!} (-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}} \underbrace{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}S^{-}}_{(-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}}S^{-}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \underbrace{\left(\sum_{\rho=1}^{N!} 1\right)}_{N!} S^{-} = \sqrt{N!}S^{-}$$
(VII.31)

Für  $S^+$  entsprechend.

• Weiterhin gilt  $S^+S^- = S^-S^+ = 0$ 

Beweis:

$$S^{+}S^{-} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho=1}^{N!} \underbrace{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}S^{-}}_{(-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}}S^{-}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} S^{-} \underbrace{\left(\sum_{\rho=1}^{N!} (-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}}\right)}_{=0} S^{-} = 0$$
(VII.32)

Da ebenso viele gerade wie ungerade  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}$  existieren.



Abbildung VII.3.: Dynamik von quantenmechanischen Vielteilchensystemen gegenüber klassischen

• Das heißt  $\frac{1}{\sqrt{N!}}S^+$  und  $\frac{1}{\sqrt{N!}}S^-$  sind Projektionsoperatoren! Für N = 2 gilt  $\mathbb{1} = \frac{1}{\sqrt{2}}S^+ + \frac{1}{\sqrt{2}}S^-$ . Für  $N \ge 3$  gilt eine solche Zerlegung nicht. Wir bezeichnen die "restlichen" Projektionsoperatoren mit Q:

$$1 = \frac{1}{\sqrt{N!}}S^{+} + \frac{1}{\sqrt{N!}}S^{-} + Q$$
(VII.33)

$$S^{+}Q = S^{+}(1 - \frac{1}{\sqrt{N!}}S^{+} - \frac{1}{\sqrt{N!}}S^{-}) = S^{+} - S^{+} = 0$$
(VII.34)

Ebenso gilt  $S^-Q = 0$  und  $Q^2 = Q$ .

•  $s^{\pm}$  sind hermitesche Operatoren:  $(S^{\pm})^{\dagger} = S^{\pm}$ 

$$(S^{+})^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho=1}^{N!} (\hat{\mathcal{P}}_{\rho})^{\dagger} \sum_{\rho=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\rho=1}^{N!} (\hat{\mathcal{P}}_{\rho})^{-1} = S^{+}$$

Analog für  $S^-$  da  $(-)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}} = (-)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}^{-1}}$  und  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}^{-1} = \hat{\mathcal{P}}_{\rho}^{\dagger}$ .

Das heißt, dass  $\frac{1}{\sqrt{N!}}S^+$ ,  $\frac{1}{\sqrt{N!}}S^-$  und Q auf orthogonale Unterräume  $\mathcal{H}_N^+$ ,  $\mathcal{H}_N^-$ ,  $\mathcal{H}_N^Q$  des Produktraums  $\mathcal{H}_N$  projizieren. Die vollständig symmetrisierten und antisymmetrisierten Vektoren  $|\varphi^+\rangle$  und  $|\varphi^-\rangle$  ergeben sich aus einem beliebigen  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_N$  mittels:

$$|\varphi^{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}S^{+}|\varphi\rangle$$
  $|\varphi^{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}S^{-}|\varphi\rangle$  (VII.35)

Ebenso ist  $|\varphi^Q\rangle = Q|\varphi\rangle$ . Die "restlichen" Energieeigenvektoren  $|E^i\rangle$  aus der Diskussion in VII.1 liegen gerade in  $\mathcal{H}_N^Q$ .

# VII.4. Bosonen und Fermionen

Quantentheoretische Vielteilchensysteme aus identischen Elementarteilchen sind grundsätzlich verschieden zur klassischen Dynamik von identischen Teilchen (zum Beispiel Kugeln der Lottozahlen). Ein Makroskopisches System erlaubt die Verfolgung der einzelnen Teilchen (zum Beispiel durch Nummerieren).

Im Mikrokosmos ist es hingegen nicht möglich "Marken" anzubringen. Gleiche Elementarteilchen (mit gleicher Masse, Ladung, Spin, etc.) besitzen keine Individualität; sie sind ununterscheidbar. Jegliche gewählte Anfangsnummerierung ist willkürlich und wegen des statistischen Verhaltens nicht mehr verfolgbar. Siehe hierzu auch Abbildung VII.3.

**Ununterscheidbarkeit bedeutet:** Es existiert keine Observable, die Individualität festlegt. Das heißt aber, für ein System N gleicher Teilchen müssen *alle* Observablen  $\mathcal{O}$  mit den Permutationsoperatoren  $\hat{\mathcal{P}}_{\rho}$  vertauschen:

$$[\mathcal{O}, \hat{\mathcal{P}}_{\rho}] = 0 \quad \forall \mathcal{O} \text{ und } \rho = 1, \dots, N!$$
 (VII.36)

Da der Hilbertraum, in dem ein quantentheoretisches System beschrieben wird, durch die Vertauschungsrelationen der Observablen bestimmt wird, hat (VII.36) *profunde* Konsequenzen für die Struktur des *physikalischen* Hilbertraums!

Betrachte den Hilbertraum *eines* Teilchens  $\mathcal{H}^1$  z.B.  $\mathcal{H}^1 = \mathcal{H}_{Ort} \otimes \mathcal{H}_{Spin}$  und den Produktraum  $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}^1 \otimes \mathcal{H}^2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}^N$ . Für ununterscheidbare Teilchen ist  $\mathcal{H}_N$  jedoch zu groß, er umfasst mehr Zustände als (VII.36) zulässt.

Konsequenz: Die durch (VII.36) erlaubten Zustände liegen in  $\mathcal{H}_N^+$  oder  $\mathcal{H}_N^-$ !

#### Beweis:

Vektoren aus  $\mathcal{H}_N^+$  und  $\mathcal{H}_N^-$  transformieren sich unter den *einzigen eindimensionalen* Darstellungen von  $S_N$ 

$$\hat{\mathcal{P}}_{\rho}|\varphi^{+}\rangle = |\varphi^{+}\rangle \qquad \text{triviale Darstellung}$$

$$\hat{\mathcal{P}}_{\rho}|\varphi^{-}\rangle = (-1)^{\hat{\mathcal{P}}_{\rho}}|\varphi^{-}\rangle \qquad \text{alternierende Darstellung} \qquad (\text{VII.37})$$

Vektoren aus  $\mathcal{H}_N^Q$  müssen in *mehrdimensionale* Darstellung von  $S_N$  fallen. Das heißt im Allgemeinen, für gegebenes  $|\varphi^Q\rangle$  ist

$$\hat{\mathcal{P}}_{\rho}|\varphi^Q\rangle \neq e^{i\alpha}|\varphi^Q\rangle \qquad (\alpha \in \mathbb{R})$$
 (VII.38)

Dann betrachten wir den Projektionsoperator

$$\mathcal{F} = |\varphi^Q\rangle\langle\varphi^Q|$$
$$\hat{\mathcal{P}}_{\rho}\mathcal{F}\hat{\mathcal{P}}_{\rho}^{\dagger} = |\hat{\mathcal{P}}_{\rho}\varphi^Q\rangle\langle\hat{\mathcal{P}}_{\rho}\varphi^Q| \neq |\varphi^Q\rangle\langle\varphi^Q| = \mathcal{F}$$
(VII.39)

Das heißt:  $[\mathcal{F}, \hat{\mathcal{P}}_{\rho}] = 0$ 

Des Weiteren existiert keine Observable, die von  $\mathcal{H}_N^+$  nach  $\mathcal{H}_N^-$  führt.

$$\langle \varphi^+ | \mathcal{L} \varphi^- \rangle = 0 \quad \forall \mathcal{L}$$
 (VII.40)

Beweis:

$$\langle \varphi^+ | \mathcal{L} \varphi^- \rangle = \langle \varphi^+ | \mathcal{L} S^- \varphi^- \rangle = \langle \varphi^+ | S^- \mathcal{L} \varphi^- \rangle = \langle \varphi^+ | S^- \mathcal{L} \varphi^- \rangle = \langle S^- \varphi^+ | \mathcal{L} \varphi^- \rangle = 0$$

Das heißt, der Zustandsvektor  $|\psi\rangle$  bleibt zu allen Zeiten entweder symmetrisch oder antisymmetrisch.

$$\begin{aligned} |\psi^+(t)\rangle &= e^{-iH(t-t_0)} |\psi^+(t_0)\rangle \\ |\psi^-(t)\rangle &= e^{-iH(t-t_0)} |\psi^-(t_0)\rangle \end{aligned}$$

**Bosonen:** Teilchen, die im symmetrischen Raum  $\mathcal{H}_N^+$  dargestellt werden

**Fermionen:** Teilchen, die im antisymmetrischen Raum  $\mathcal{H}_N^-$  dargestellt werden.

**Bosonen** haben ganzzahligen Spin (s = 0, 1, 2, ...)Fermionen haben halbzahligen Spin (s = 1/2, 3/2, 5/2, ...)

Der Beweis erfolgt mittels "SPIN-STATISTIK-THEOREM" aus der Quantenfeldtheorie (Pauli, 1940).

# VII.5. Bosonen: Fock-Raum, Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

**Notation:**  $|i\rangle$  bezeichne einen beliebigen Einteilchenzustand  $(i = 1, ..., \infty)$  zum Beispiel Energieeigenzustand  $|\varepsilon_a\rangle$ , Impulseigenzustand  $|\vec{p}\rangle\sqrt{d^3p}$ , Ortseigenzustand  $|\vec{x}\rangle\sqrt{d^3x}$  oder Spineigenzustand  $|m\rangle$ .

$$|i_1, i_2, i_3, \dots, i_N\rangle := |i_1^1\rangle \otimes |i_2^2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N^N\rangle$$
 (VII.41)

*Bedeutet:* Teilchen 1 liegt in Zustand  $|i_1\rangle$  vor, Teilchen 2 in Zustand  $|i_2\rangle$ , usw.

Bosonischer Zustand:

$$S^+|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \tag{VII.42}$$

Falls in  $|i_1, i_2, i_3, \ldots, i_N\rangle$  Einteilchenzustände mehrfach auftreten ist  $S^+|i_1, i_2, i_3, \ldots, i_N\rangle$  nicht mehr auf 1 normiert. Sei  $|1\rangle$   $n_1$ -mal vertreten,  $|2\rangle$   $n_2$ -mal vertreten, usw., dann lautet der normierte Bosezustand:

$$S^{+}|i_{1}, i_{2}, i_{3}, \dots, i_{N}\rangle \frac{1}{\sqrt{n_{1}!n_{2}!\cdots n_{N}!}} =: |n_{1}, n_{2}, n_{3}, \dots, n_{N}\rangle$$
(VII.43)

Da  $S^+|i_1, i_2, i_3, \ldots, i_N\rangle$  gerade N! Terme enthält, wobei gerade  $\frac{N!}{n_1!n_2!n_3!\cdots n_N!}$  verschieden sind, gilt

$$\left\| |S^+|i_1, i_2, i_3, \dots, i_N\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3! \cdots n_N!}} \right\| = 1$$
(VII.44)

Die Angabe der Besetzungszahlen  $n_i$  charakterisiert den Zustand vollkommen. (|1) kommt  $n_1$ -fach vor, |2) kommt  $n_2$ -fach vor, usw.) Für die Summe der Besetzungszahlen gilt

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N \qquad \text{mit } n_i \in \{0, 1, 2, \dots, N\}$$
(VII.45)

Die Besetzungszahldarstellung bildet eine vollständige Orthonormalbasis des symmetrischen N-Teilchen Hilbertraums  $\mathcal{H}_N^+$ .

$$\langle n'_1, n'_2, n'_3, \dots | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle = \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \delta_{n'_3, n_3} \cdots$$
 (VII.46)

**Definition VII.5.1** (Hilbertraum mit variabler Teilchenzahl: Fock-Raum  $\mathcal{F}$ ). Sei  $\mathcal{H}_N$  ein Hilbertraum mit N Teilchen:

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3 \oplus \dots = \bigoplus_{N=1}^{\infty} \mathcal{H}_N$$
(VII.47)

Zerlegung der Identität:

$$\mathbb{1} = \sum_{n_1, n_2, \dots}^{\infty} |n_1, n_2, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots|$$
(VII.48)

Bisherige Operatoren wirkten stets im Raum fester TeilchenzahlN. Nun:

Erzeugungsoperator	$a_i^\dagger$ :	$\mathcal{H}_N \to \mathcal{H}_{N+1}$
Vernichtungsoperator	$a_i$ :	$\mathcal{H}_N \to \mathcal{H}_{N-1}$

 $a_i^{\dagger}$ erzeugt ein Teilchen,  $a_i$ vernichtet ein Teilchen. Dies lässt sich sehr einfach in der Besetzungszahlbasis des Fockraums darstellen.

Definition VII.5.2 (Wirkung des Erzeugers).

$$a_i^{\dagger}|\dots,n_i,\dots\rangle = \sqrt{n_i+1}|\dots,n_i+1,\dots\rangle$$
 (VII.49)

Das heißt  $a_i^{\dagger}$ erhöht die Besetzungszahl  $n_i$  des Zustands  $|i\rangle$ um eins:

$$\Rightarrow \qquad \langle \dots, n'_i, \dots | a_i = \sqrt{n'_i + 1} \langle \dots, n'_i + 1, \dots |$$
  
$$\Rightarrow \qquad \langle \dots, n'_i, \dots | a_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} \delta_{n'_i, n_i - 1} \qquad (VII.50)$$

Das heißt  $a_i$ erniedrigt die Besetzungszahl $n_i$ um eins.

Behauptung:

$$a_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | \dots, n_i - 1, \dots \rangle \qquad \text{für } n_i \ge 1$$
$$a_i | \dots, n_i = 0, \dots \rangle = 0 \tag{VII.51}$$

Beweis:

$$1 \cdot a_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \sum_{\substack{n'_i = 0 \\ n'_i = 0}}^{\infty} | \dots, n'_i, \dots \rangle \langle \dots, n'_i, \dots | a_i | \dots, n_i, \dots \rangle$$
$$= \sum_{\substack{n'_i = 0 \\ n'_i = 0}}^{\infty} | \dots, n'_i, \dots \rangle \sqrt{n_i} \delta_{n'_i, n_i - 1}$$
$$= \begin{cases} \sqrt{n_i} | \dots, n_i - 1, \dots \rangle & n_i \ge 1\\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad \Box \quad (\text{VII.52})$$

## **Bose-Vertauschungsrelationen:**

$$[a_i, a_j] = 0 \qquad \qquad [a_i^{\dagger}, a_j^{\dagger}] = 0 \qquad \qquad [a_i, a_j^{\dagger}] = \delta_{ij} \qquad (\text{VII.53})$$

**Beweis:** Relation für  $i \neq j$  offensichtlich, da die Operatoren dann in verschiedenen Teilräumen wirken:

z.B. 
$$(i \neq j)$$
:  
 $a_i a_j^{\dagger} | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle$   
 $= \sqrt{n_i} \sqrt{n_j + 1} | \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots \rangle$   
 $= a_j^{\dagger} a_i | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle$ 

Sei nun i = j, dann ist nur  $[a_i, a_i^{\dagger}] = 1$  zu beweisen:

$$\begin{aligned} a_i a_i^{\dagger} | \dots, n_i, \dots \rangle &= a_i \sqrt{n_i + 1} | \dots, n_i + 1, \dots \rangle \\ &= (n_i + 1) | \dots, n_i, \dots \rangle \\ a_i^{\dagger} a_i | \dots, n_i, \dots \rangle &= a_i^{\dagger} \sqrt{n_i} | \dots, n_i - 1, \dots \rangle \\ &= n_i | \dots, n_i, \dots \rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \qquad (a_i a_i^{\dagger} - a_i^{\dagger} a_i) | \dots, n_i, \dots \rangle = 1 \cdot | \dots, n_i, \dots \rangle$$

Somit  $[a_i, a_i^{\dagger}] = 1$ . Gilt auch für den Spezialfall  $n_i = 0$ , wie man leicht sieht.

Die Bose-Erzeuger und -Vernichter erfüllen die Algebra des harmonischen Oszillators!

 $\label{eq:constraint} \ensuremath{\text{Teilchenbild}} \Leftrightarrow \ensuremath{\text{Oszillatoranregung}} \ensuremath{$ 

Ausgehend vom Grundzustand, das heißt dem Vakuumzustand  $|0\rangle := |n_1 = 0, n_2 = 0, n_3 = 0, \dots \rangle$ , lassen sich alle Zustände aufbauen:

Vakuum $|0\rangle$ 1-Teilchen-Zustand $a_i^{\dagger}|0\rangle$ 2-Teilchen-Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}(a_i^{\dagger})^2|0\rangle$ bzw. für  $i \neq j$  $a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}|0\rangle$ 

Allgemeiner Mehrteilchenzustand  $|n_1, n_2, \dots \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} (a_1^{\dagger})^{n_1} (a_2^{\dagger})^{n_2} \cdots |0\rangle$ 

**Der Teilchenzahloperator:** Der Besetzungszahloperator des Zustandes  $|i\rangle$ 

$$\hat{n}_i := a_i^{\dagger} a_i \tag{VII.54}$$

Erfüllt

÷

$$\hat{n}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = n_i | \dots, n_i, \dots \rangle \qquad n_i \in \mathbb{N}$$
 (VII.55)

Der Operator der Gesamtteilchenzahl

$$\hat{N} := \sum_{i=1}^{\infty} \hat{n}_i \tag{VII.56}$$

Erfüllt

$$\hat{N}|n_1, n_2, \dots \rangle = \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{\infty} n_i\right)}_{N} |n_1, n_2, \dots \rangle \tag{VII.57}$$

Falls keine Wechselwirkung zwischen den Teilchen vorliegt und  $|i\rangle = |\epsilon_i\rangle$  ist, das heißt, die  $|i\rangle$  sind die Eigenzustände des Einteilchenhamiltonoperators, dessen Eigenwerte  $\epsilon_i$  sind, dann gilt:

 $N\mathchar`$  -Teilchenhamilton operator:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{\infty} \epsilon_i \hat{n}_i$$
$$\hat{H}_0 | n_1, \dots \rangle = \left( \sum_{i=1}^{\infty} n_i \epsilon_i \right) | n_1, \dots \rangle$$
(VII.58)

Allgemeine Einteilchen- und Mehrteilchenoperatoren  $\hat{T}$  sei Operator des *N*-Teilchen-Systems, der durch die Summe von Einteilchenoperatoren gegeben ist.

$$\hat{T} = \hat{t}_1 + \hat{t}_2 + \dots + \hat{t}_N = \sum_{\alpha=1}^N \hat{t}_\alpha$$
 (VII.59)

zum Beispiel

Kinetische Energie
$$\hat{t}_{\alpha} = \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m}$$
Potential $\hat{t}_{\alpha} = V(\hat{x}_{\alpha})$ 

In der  $|i\rangle\text{-Basis:}$  (Einteilchen operator:  $\hat{t}=\sum_{i,j}t_{ij}|i\rangle\langle j|)$ 

$$\hat{T} = \sum_{i,j} t_{ij} \sum_{\alpha} |i^{\alpha}\rangle \langle j^{\alpha}|$$
(VII.60)

Wie lässt sich  $\hat{T}$  über  $a_i$  und  $a_i^{\dagger}$  ausdrücken? Betrachte zunächst den speziellen Operator  $\sum_{\alpha} |k^{\alpha}\rangle\langle j^{\alpha}|$ .

i) Sei  $k \neq j$ :

$$\left(\sum_{\alpha} |k^{\alpha}\rangle\langle j^{\alpha}|\right)|\dots, n_{k}, \dots, n_{j}, \dots\rangle$$
$$= \left(\sum_{\alpha} |k^{\alpha}\rangle\langle j^{\alpha}|\right)S^{+}|i_{1}, i_{2}, i_{3}, \dots, i_{N}\rangle\frac{1}{\sqrt{n_{1}! n_{2}! n_{3}! \cdots}}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Da}\left[\sum_{\alpha}|k^{\alpha}\rangle\langle j^{\alpha}|,S^{+}\right] &= 0 \\ &= S^{+}\left(\sum_{\alpha=1}^{N}|k^{\alpha}\rangle\langle j^{\alpha}||i_{1},i_{2},\ldots,i_{\alpha},\ldots,i_{N}\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{n_{1}!\,n_{2}!\,n_{3}!\,\ldots}} \\ &= S^{+}\left(\sum_{\alpha=1}^{N}\delta_{j,i_{\alpha}}|i_{1},i_{2},\ldots,\underset{\alpha}{k},\ldots,i_{N}\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{n_{1}!\,n_{2}!\,n_{3}!\,\ldots}} \\ &= \underbrace{\left(\sum_{\alpha=1}^{N}\delta_{j,i_{\alpha}}\right)|\ldots,n_{k}+1,\ldots,n_{j}-1,\ldots\rangle\sqrt{\frac{n_{k}+1}{n_{j}}} \\ &= \sqrt{n_{j}}\sqrt{n_{j}+1}|\ldots,n_{k+1},\ldots,n_{j}-1,\ldots\rangle \\ &= a_{k}^{\dagger}a_{j}|\ldots,n_{k},\ldots,n_{j},\ldots\rangle \end{aligned}$$
(VII.61)

ii) Sei k = j:

$$\left(\sum_{\alpha} |j^{\alpha}\rangle \langle j^{\alpha}|\right)|\dots, n_j, \dots \rangle = n_j|\dots, n_j, \dots \rangle$$
$$= a_j^{\dagger} a_j|\dots, n_j, \dots \rangle$$

Somit:

$$\sum_{\alpha=1}^{N} |i^{\alpha}\rangle\langle j^{\alpha}| = a_{i}^{\dagger}a_{j}$$
(VII.62)

Und für beliebigen Einteilchenoperatoren:

\_\_\_\_

$$\hat{T} = \sum_{i,j} t_{ij} a_i^{\dagger} a_j \qquad \text{mit } t_{ij} = \langle i | \hat{t} | j \rangle \qquad (\text{VII.63})$$

Spezialfall:  $|i\rangle \cong$  Energie basis eines freien Hamiltonoperators  $H_0$ :

$$H_0 = \sum_i \epsilon_i \, a_i^{\dagger} a_i \tag{VII.64}$$

Und für Einteilchen Potential

$$\hat{V} = \sum_{i,j} V_{ij} a_i^{\dagger} a_j \tag{VII.65}$$

mit  $V_{ij} = \langle \epsilon_i | \hat{V} | \epsilon_j \rangle.$ 

**Allgemeine Zweiteilchenoperatoren** Wir wollen einen ortsabhängigen Zweiteilchenoperator betrachten:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} f^{(2)}(\vec{x}_{\alpha}, \vec{x}_{\beta})$$
(VII.66)

(VII.67)

Beispiel: Coulomb-Wechselwirkung von Elektronen:

$$f^{(2)}(\vec{x}_{\alpha}, \vec{x}_{\beta}) = \frac{c}{|\vec{x}_{\alpha} - \vec{x}_{\beta}|}$$
(VII.68)

Es gilt:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i,j|\hat{f}^{(2)}|k,l\rangle a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_k a_l$$
(VII.69)  
$$\langle i,j|\hat{f}^{(2)}|k,l\rangle = \int d^3x \, d^3y \, \varphi_i^*(\vec{x}) \varphi_j^*(\vec{y}) f^{(2)}(\vec{x},\vec{y}) \varphi_k(\vec{x}) \varphi_l(\vec{y})$$
$$\langle \vec{x}|i\rangle = \varphi_i(\vec{x})$$

 $\operatorname{mit}$ 

wobei

Beweis:

Es ist lediglich

$$\sum_{\alpha \neq \beta} |i^{\alpha}, j^{\beta}\rangle \langle k^{\alpha}, m^{\beta}| = a_{i}^{\dagger} \, a_{j}^{\dagger} \, a_{k} \, a_{m}$$

zu zeigen.

$$\sum_{\alpha \neq \beta} |i^{\alpha}, j^{\beta}\rangle \langle k^{\alpha}, m^{\beta}| = \sum_{\alpha \neq \beta} (|i^{\alpha}\rangle \langle k^{\alpha}|) (|j^{\beta}\rangle \langle m^{\beta}|)$$

$$= \sum_{(\text{VII.62})} \sum_{\alpha} (|i^{\alpha}\rangle \langle k^{\alpha}|) \sum_{\beta} (|j^{\beta}\rangle \langle m^{\beta}|) - \underbrace{\langle k|j\rangle}_{\delta_{kj}} \sum_{\alpha} |i^{\alpha}\rangle \langle m^{\alpha}|$$

$$= a_{i}^{\dagger} \underbrace{a_{k} \cdot a_{j}^{\dagger}}_{=a_{j}^{\dagger}a_{k} + \delta_{jk}}$$

$$= a_{i}^{\dagger} a_{j}^{\dagger} a_{k} a_{m} \qquad \Box \text{ (VII.70)}$$

# VII.6. Fermionen: Fock-Raum, Erzeuger und Vernichter

Nun müssen wir vollständig antisymmetrisierte Zustände betrachten:

$$S^{-}|i_1, i_2, i_3, \dots\rangle \tag{VII.71}$$

Sind zwei Zustände identisch, verschwindet der Fermionzustand:

$$S^{-}|i_{1}, i_{2}, i_{3}, \dots\rangle = -S^{-}|i_{2}, i_{1}, i_{3}, \dots\rangle$$
(VII.72)

Das heißt falls zwei Zustände identisch sind, folgt:

$$S^{-}|i_{1},\ldots,\underset{\alpha}{i},\ldots,\underset{\beta}{i},\ldots\rangle = -S^{-}|i_{1},\ldots,i,\ldots,i,\ldots\rangle = 0 \qquad \Rightarrow Pauliverbot!$$
(VII.73)

Wir charakterisieren Fermionzustände durch Besetzungszahlen:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$
 mit  $n_i \in \{0, 1\}$  (VII.74)

Betrachten wiederum Fock-Raum  $\widehat{=}$  Raum variabler Teilchenzahl.

• Zerlegung der Eins:

$$\mathbb{1} = \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots = 0}^{1} |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \langle n_1, n_2, n_3, \dots|$$
(VII.75)

• Skalarprodukt:

$$\langle n'_1, n'_2, n'_3, \dots | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \delta_{n'_3 n_3} \cdots$$
 (VII.76)

• Einführung von Erzeugungsoperatoren  $a_i^{\dagger}$ :

$$\begin{split} S^{-}|i_{1}, i_{2}, i_{3}, \dots, i_{N}\rangle &= a_{i_{1}}^{\dagger} a_{i_{2}}^{\dagger} a_{i_{3}}^{\dagger} \cdots, a_{i_{N}}^{\dagger} |0\rangle \\ S^{-}|i_{2}, i_{1}, i_{3}, \dots, i_{N}\rangle &= a_{i_{2}}^{\dagger} a_{i_{1}}^{\dagger} a_{i_{3}}^{\dagger} \cdots, a_{i_{N}}^{\dagger} |0\rangle \end{split}$$

(VII.72) impliziert dann:

$$\{a_i^{\dagger}, a_j^{\dagger}\} = 0 \tag{VII.77}$$

(VII.78)

wobei  $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$  der Antikommutator ist. Manchmal auch als  $[\hat{A}, \hat{B}]_+$  geschrieben. Insbesondere gilt  $(a_i^{\dagger})^2 = 0$  (nilpotent)  $\Leftrightarrow$  Pauli-Verbot.

# Besetzungszahldarstellung für Fermionen:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = (a_1^{\dagger})^{n_1} (a_2^{\dagger})^{n_2} (a_3^{\dagger})^{n_3} \cdots |0\rangle \qquad \text{mit } n_i \in \{0, 1\}$$
(VII.79)

Hierzu ist eine bestimmte (aber willkürliche) feste Anordnung der Zustände  $|i\rangle$  vonnöten!

$$a_{i}^{\dagger}|\dots,n_{i},\dots\rangle = \underbrace{(1-n_{i})}_{\substack{1 \text{ für } n_{i}=0\\0 \text{ für } n_{i}=1}} \underbrace{(-1)^{\sum_{j(VII.80)$$

Wirkung des Vernichtungsoperators  $a_i$ :

$$\langle \dots, n_i, \dots | a_i | \dots, n'_i, \dots \rangle = (1 - n_i)(-1)^{\sum_{j < i} n_j} \delta_{n_i + 1, n'_i}$$
 (VII.81)

$$\begin{aligned} a_{i}|\dots,n_{i}',\dots\rangle &= \sum_{n_{i}}|\dots,n_{i},\dots\rangle\langle\dots,n_{i},\dots|a_{i}|\dots,n_{i}',\dots\rangle \\ &= \sum_{n_{i}=0}^{1}|\dots,n_{i},\dots\rangle(1-n_{i})(-1)^{\sum_{j$$

## Zusammenfassung:

$$a_i^{\dagger}|\dots, n_i, \dots\rangle = (1 - n_i)(-1)^{\sum_{j < i} n_j}|\dots, n_i + 1, \dots\rangle$$
  
$$a_i|\dots, n_i, \dots\rangle = n_i(-1)^{\sum_{j < i} n_j}|\dots, n_i - 1, \dots\rangle$$
  
(VII.82)

Hieraus folgt:

$$a_{i}a_{i}^{\dagger}|\dots,n_{i},\dots\rangle = \underbrace{(n_{i}+1)(1-n_{i})}_{1-n_{i}^{2}=1-n_{i}}(-1)^{2\sum_{j
$$= (1-n_{i})|\dots,n_{i},\dots\rangle \qquad (\text{VII.83})$$$$

$$a_i^{\dagger}a_i|\dots,n_i,\dots\rangle = n_i(1-n_i+1)(-1)^{2\sum_{j  
=  $n_i|\dots,n_i,\dots\rangle$  (VII.84)$$

Addition ergibt:

$$\{a_i, a_i^{\dagger}\} = 1$$
 (VII.85) offensichtlich gilt: 
$$\{a_i, a_j^{\dagger}\} = 0$$
 für  $i \neq j$  (VII.86)

Antikommutatoren für Fermionen:

$$\{a_i, a_j\} = 0 \quad \{a_i^{\dagger}, a_j^{\dagger}\} = 0 \quad \{a_i, a_j^{\dagger}\} = \delta_{ij}$$
 (VII.87)

Algebra des fermionischen harmonischen Oszillators

Ein- und Mehrteilchenoperatoren für Fermionen Man zeigt wiederum:

$$\sum_{\alpha \neq \beta} |i^{\alpha}\rangle\langle j^{\alpha}| = a_{i}^{\dagger}a_{j}$$
$$\sum_{\alpha \neq \beta} |i^{\alpha}j^{\beta}\rangle\langle k^{\alpha}l^{\beta}| = a_{i}^{\dagger}a_{j}^{\dagger}a_{l}a_{k} = -a_{i}^{\dagger}a_{j}^{\dagger}a_{k}a_{l}$$
(VII.88)

unter Beachtung der Reihenfolge! Somit Ein- und Zweiteilchenoperatoren:

$$T = \sum_{i,j} t_{ij} a_i^{\dagger} a_j$$
  

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i,j|f^{(2)}|k,l\rangle a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_l a_k$$
(VII.89)

Beispiel:

Hamiltonoperator eines Vielteilchensystems mit kinetischer Energie T, potentieller Energie V und 2-Teilchen-Wechselwirkung  $f^{(2)}$ :

$$\hat{H} = \sum_{i,j} (t_{ij} + u_{ij}) a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i,j|f^{(2)}|k,l\rangle a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_l a_k$$
(VII.90)

# VII.7. Feldoperatoren

**Transformationen zwischen verschiedenen Basissystemen** Zwei verschiedene Basissysteme  $\{|i\rangle\}$ und  $\{\lambda\}$  des Einteilchenhilbertraumes seien gegeben, etwa Energiebasis  $\{|\epsilon_{\alpha}\rangle\}$  und Ortsbasis  $\{|\vec{x}\rangle\}$ .

Frage: Wie hängen die Operatoren  $a_i$  und  $a_{\lambda}$  zusammen?

Entwicklung der Einteilchenbasis  $|\lambda\rangle$ nach  $|i\rangle$ :

$$|\lambda\rangle = \sum_{i} |i\rangle\langle i|\lambda\rangle \tag{VII.91}$$

 $a_i^{\dagger}$  erzeugt Teilchen im Zustand  $|i\rangle$ . Demnach:

$$a_{\lambda}^{\dagger} = \sum_{i} a_{i}^{\dagger} \langle i | \lambda \rangle \tag{VII.92}$$

und die adjungierte Relation lautet:

$$a_{\lambda} = \sum_{i} a_{i} \langle \lambda | i \rangle \tag{VII.93}$$

**Feldoperatoren** Wichtiger Spezialfall: Übergang von der diskreten Basis  $|i\rangle$  in die Basis der Ortseigenzustände  $|\vec{x}\rangle$ :

$$\langle \vec{x}|i\rangle =: \varphi_i(\vec{x}) \tag{VII.94}$$

Definition VII.7.1 (Feldoperatoren).

$$\begin{split} \hat{\psi}(\vec{x}) &:= a_{\vec{x}} & \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}) := a_{\vec{x}}^{\dagger} \\ \hat{\psi}(\vec{x}) &= \sum_{i} \varphi_{i}(\vec{x}) \hat{a}_{i} & \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}) = \sum_{i} \varphi_{i}^{*}(\vec{x}) \hat{a}_{i}^{\dagger} \\ \text{bzw.} & a_{i} &= \int d^{3}x \, \varphi_{i}^{*}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) & a_{i}^{\dagger} &= \int d^{3}x \, \varphi_{i}(\vec{x}) \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}) \end{split}$$

 $\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x})$ erzeugt Teilchen am Ort $\vec{x},\,\hat{\psi}(\vec{x})$ vernichtet Teilchen am Ort $\vec{x}$ 

## Kommutatorrelationen:

 $\alpha$ ) Bosonen

$$\begin{split} & [\psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}')] = 0 \\ & [\psi^{\dagger}(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}')] = 0 \\ & [\psi(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}')] = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \end{split}$$

Da:

$$\begin{split} [\psi(\vec{x}),\psi^{\dagger}(\vec{x}')] &= \sum_{i,j} \varphi_i(\vec{x})\varphi_j^*(\vec{x}')[a_i,a_j^{\dagger}] \\ &= \sum_i \varphi_i(\vec{x})\varphi_j^*(\vec{x}')\delta_{ij} = \sum_i \varphi_i(\vec{x})\varphi_i^*(\vec{x}') \\ &= \sum_i \langle \vec{x} | i \rangle \langle i | \vec{x}' \rangle = \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \end{split}$$

## $\beta$ ) Fermionen

$$\{ \psi(\vec{x}), \psi(\vec{x}') \} = 0 \{ \psi^{\dagger}(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}') \} = 0 \{ \psi(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}') \} = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

Typische Operatoren im Feldoperatorformalismus:

## i) Kinetische Energie

$$T = \sum_{i,j} a_i^{\dagger} T_{ij} a_j = \sum_{i,j} a_i^{\dagger} \left\langle i \right| - \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \left| j \right\rangle a_j$$
  
$$= \sum_{i,j} \int d^3 x \, a_i^{\dagger} \frac{\langle i | \vec{x} \rangle}{\varphi_i^*(\vec{x})} \left( -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \right) \frac{\langle \vec{x} | j \rangle}{\varphi_j(\vec{x})} a_j$$
  
$$= \int d^3 x \underbrace{\left( \sum_i a_i^{\dagger} \varphi_i^*(\vec{x}) \right)}_{\psi^{\dagger}(\vec{x})} \left( -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \right) \underbrace{\left( \sum_j \varphi_j(\vec{x}) a_j \right)}_{\psi(\vec{x})}$$
  
$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 x \, \vec{\nabla} \psi^{\dagger}(\vec{x}) \vec{\nabla} \psi(\vec{x})$$
(VII.95)

ii) Einteilchenpotential, Ortsabhängig:

$$U = \sum_{i,j} a_i^{\dagger} u_{ij} a_j = \sum_{i,j} a_i^{\dagger} \langle i | U(\vec{x}) | j \rangle a_j$$
$$= \dots = \int d^3 x \, \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}) U(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x})$$
(VII.96)

iii) Zweiteilchenpotential:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,m} \langle i,j|f^{(2)}|k,m\rangle a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_m a_k$$
(VII.97)

Sei  $\langle \vec{x}', \vec{y}' | f^{(2)} | \vec{x}, \vec{y} \rangle = V(\vec{x}, \vec{y}) \cdot \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \cdot \delta^{(3)}(\vec{y} - \vec{y}')$  Dann:

$$F = \frac{1}{2} \int d^3x \, d^3y \, V(\vec{x}, \vec{y}) \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}) \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{y}) \hat{\psi}(\vec{y}) \hat{\psi}(\vec{x})$$
(VII.98)

Gilt für Bosonen und Fermionen unter Beachtung der Reihenfolge der Feldoperatoren!

iv) Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \int d^3x \left( \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \psi^{\dagger}(\vec{x}) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) + U(\vec{x}) \psi^{\dagger}(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \right) + \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3y \, \psi^{\dagger}(\vec{x}) \psi^{\dagger}(\vec{y}) V(\vec{x}, \vec{y}) \psi(\vec{y}) \psi(\vec{x})$$
(VII.99)

v) Teilchenzahldichte:

Operator der Teilchenzahldichte:  $\hat{n}(\vec{x}) = \psi^{\dagger}(\vec{x})\psi(\vec{x})$ 

Gesamtteilchenzahloperator:  $\hat{N} = \int d^3x n(\vec{x})$ 

Formale Ähnlichkeit des Teilchenzahldichteoperators  $\hat{n}(\vec{x})$  eines Vielteilchensystems zur Wahrscheinlichkeitsdichte  $n(\vec{x}) = \psi^*(\vec{x})\psi(\vec{x})$  eines Teilchens im Zustand  $\psi(\vec{x})$ . Diese formale Ähnlichkeit hat zu dem *irreführenden* Begriff "Zweite Quantisierung" geführt. In der Tat wird aber nichts zweimal quantisiert. Der Begriff ist als Übergang von einer Einteilchentheorie zu einer Vielteilchentheorie zu verstehen und wird auch so verwendet. Feldgleichungen Die Bewegungsgleichung der Feldoperatoren im Heisenbergbild

$$\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(\vec{x},t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\psi(\vec{x}) e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$
(VII.100)

lauten für den Hamiltonoperator (VII.99):

^

Form einer nichtlinearen Schrödingergleichung wegen  $V(\vec{x}, \vec{x}')$  Term.

**Beweis der Feldgleichung:** Zu bestimmen ist  $-[\hat{H}, \hat{\psi}_{\mathrm{H}}(\vec{x}, t)] = -e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{H}, \psi(\vec{x}, 0)]e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ . Wir benutzen die verallgemeinerte Kommutatorregel  $[AB, C] = A[B, C] - [C, A]B = A\{B, C\} - \{C, A\}B$ je nach Bose/Fermi Fall.

• kinetische Energie:

$$\int d^3x' \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \underbrace{\vec{\nabla}'\psi^{\dagger}(\vec{x}')}_{A} \underbrace{\vec{\nabla}'\psi(\vec{x})}_{B}, \underbrace{\psi(\vec{x})}_{C} \right]$$
$$= -\int d^3x' \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{[\psi(\vec{x}), \vec{\nabla}'\psi^{\dagger}(\vec{x}')]_{\pm}}_{\vec{\nabla}'\delta^{(3)}(\vec{x}'-\vec{x})} \vec{\nabla}'\psi(\vec{x}')$$
$$= \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{x})$$
(VII.102)

• Potentielle Energie:

$$\int d^3x' U(\vec{x}') \underbrace{[\psi^{\dagger}(\vec{x}')}_A \underbrace{\psi(\vec{x}')}_B, \underbrace{\psi(\vec{x}')}_C]_C$$

$$= -\int d^3x' U(\vec{x}') \underbrace{[\psi(\vec{x}), \psi^{\dagger}(\vec{x}')]_{\pm}}_{\delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x})}$$

$$= -U(\vec{x})\psi(\vec{x}) \qquad (\text{VII.103})$$

• 2-Teilchenwechselwirkung:

$$\frac{1}{2} \int d^3x' \, d^3x'' \left[ \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}') \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}'') V(\vec{x}', \vec{x}'') \hat{\psi}(\vec{x}'') \hat{\psi}(\vec{x}'), \hat{\psi}(\vec{x}) \right] \\ = \frac{1}{2} \int d^3x' \, d^3x'' \left[ \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}') \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x}''), \hat{\psi}(\vec{x}) \right] V(\vec{x}', \vec{x}'') \hat{\psi}(\vec{x}'') \hat{\psi}(\vec{x}')$$

Nun ist:

$$\begin{split} [\psi^{\dagger}(\vec{x}')\psi^{\dagger}(\vec{x}''),\psi(\vec{x})] &= \psi^{\dagger}(\vec{x}')[\psi^{\dagger}(\vec{x}''),\psi(\vec{x})]_{\pm} - [\psi(\vec{x}),\psi^{\dagger}(\vec{x}')]_{\pm}\psi^{\dagger}(\vec{x}'') \\ &= \mp \psi^{\dagger}(\vec{x}')\delta^{(3)}(\vec{x}'' - \vec{x}') - \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x})\psi^{\dagger}(\vec{x}'') \left(\frac{B}{F}\right) \\ &= \frac{1}{2} \Biggl[ \binom{-}{+} \int d^{3}x'\,\psi^{\dagger}(\vec{x}')V(\vec{x}',\vec{x}) \underbrace{\psi(\vec{x})\psi(\vec{x}')}_{=\binom{+}{-}\psi(\vec{x}')\psi(\vec{x})} \\ &\quad - \int d^{3}x''\,\psi^{\dagger}(\vec{x}'')V(\vec{x},\vec{x}'')\psi(\vec{x}')\psi(\vec{x}) \Biggr] \\ &= - \Bigl( \int d^{3}x'\,\psi^{\dagger}(\vec{x}')V(\vec{x},\vec{x}')\hat{\psi}(\vec{x}') \Bigr)\hat{\psi}(\vec{x}) \quad \text{da } V(\vec{x},\vec{x}') = V(\vec{x}',\vec{x}) \\ (\text{VII.104}) \end{split}$$

# VII.8. Impulsdarstellung

Für translationsinvariante Systeme ist die Impulsbasis besonders nützlich. Wir legen ein Normierungsvolumen im Ortsraum mit den Abmessungen  $L_x, L_y, L_z$  zugrunde. Die normierten Impulseigenfunktionen lauten dann ( $\vec{k}$ : Wellenzahlvektor):

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{x}) := \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$
(VII.105)

mit  $V = L_x L_y L_z$ 

Die Forderung periodischer Randbedingungen  $\varphi_{\vec{k}}(\vec{x} + \vec{e}_x L_x) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{x})$  etc. diskretisiert die Wellenzahlvektoren  $\vec{k}$ :

$$\vec{k} = 2\pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y}, \frac{n_z}{L_z}\right) \quad \text{mit } n_i \in \mathbb{Z}$$
(VII.106)

Orthonormalitäts relation:

$$\int d^3x \,\varphi_{\vec{k}}^{\dagger}(\vec{x})\varphi_{\vec{k}'}(\vec{x}) = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \tag{VII.107}$$

i) Kinetische Energie:

$$T = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}$$
(VII.108)

ii) Einteilchenpotential (nicht translationsinvariant!)

$$\begin{split} U &= \sum_{\vec{k},\vec{k}'} a^{\dagger}_{\vec{k}} \langle \vec{k} | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{k}' \rangle a_{\vec{k}'} \\ \langle \vec{k} | U(\hat{\vec{x}}) | \vec{k}' \rangle &= \int d^3 x \, \langle \vec{k} | \vec{x} \rangle U(\vec{x}) \langle \vec{x} | \vec{k}' \rangle \\ &= \frac{1}{V} \int d^3 x \, e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \vec{x}} U(\vec{x}) \\ &= \frac{1}{V} \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}') \end{split}$$



Abbildung VII.4.: Feynman-Diagramm zum Impulsaustausch. Der Gesamtimpuls bleibt erhalten!

mit fouriertransormiertem Potential

$$\tilde{U}(\vec{k}) := \int d^3x \, e^{-i\,\vec{k}\cdot\vec{x}} U(\vec{x})$$
$$U = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \tilde{U}(\vec{k}-\vec{k}') a^{\dagger}_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}$$
(VII.109)

iii) Translations<br/>invariantes Zweiteilchenpotential: Sei $V(\vec{x},\vec{x}')=V(\vec{x}-\vec{x}'),$ dann lautet die Fourier<br/>transormierte:

$$\tilde{V}(\vec{q}) := \int d^3x \, V(\vec{x}) \, e^{-i \, \vec{q} \cdot \vec{x}}$$

$$V(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \, e^{i \, \vec{q} \cdot \vec{x}}$$
(VII.110)

 $\Leftrightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

Dann Zweiteilchenmatrixelement:

$$\begin{split} \langle \vec{p}', \vec{k}' | \hat{V}(\hat{\vec{x}} - \hat{\vec{x}}') | \vec{p}, \vec{k} \rangle &= \frac{1}{V^2} \int d^3x \int d^3x' \, e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{x}} \, e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x} - \vec{x}') \, e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \, e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \\ &= \frac{1}{V^3} \sum_{\vec{q}} \int d^3x \, \int d^3x' e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{x} - i\vec{k}' \cdot \vec{x}' + i\vec{q}(\vec{x} - \vec{x}') + i\vec{p} \cdot \vec{x} + i\vec{k} \cdot \vec{x}'} \tilde{V}(\vec{q}) \\ &= \frac{1}{V^3} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q}) \, \delta_{-\vec{p}' + \vec{q} + \vec{p}, \vec{0}} \, \delta_{-\vec{k}' - \vec{q} + \vec{k}, \vec{0}} \cdot V^2 \end{split}$$
(VII.111)

Somit:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}', \vec{k}', \vec{p}, \vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{p}'} a^{\dagger}_{\vec{k}'} \langle \vec{p}', \vec{k}' | \hat{V} | \vec{p}, \vec{k} \rangle a_{\vec{k}} a_{\vec{p}}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}', \vec{k}', \vec{p}, \vec{k}} \frac{1}{V} \tilde{V}(\vec{q}) a^{\dagger}_{\vec{p}'} a^{\dagger}_{\vec{k}'} a_{\vec{k}} a_{\vec{p}} \cdot \delta_{\vec{p}', \vec{q} + \vec{p}} \delta_{\vec{k}', \vec{k} - \vec{q}}$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}, \vec{p}, \vec{k}} \tilde{V}(\vec{q}) a^{\dagger}_{\vec{p} + \vec{q}} a^{\dagger}_{\vec{k} - \vec{q}} a_{\vec{k}} a_{\vec{p}} \qquad (\text{VII.112})$$

Graphische Interpretation: "Feynman-Diagramm" (Abbildung VII.4)

Vertauschungsrelationen in der Impulsdarstellung:

Bosonen: 
$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}] = 0 = [a_{\vec{k}}^{\dagger}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}]$$

$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$
(VII.113)  
$$\{a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}\} = 0 = \{a_{\vec{k}}^{\dagger}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}\}$$

$$\{a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}\} = 0 = \{a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}\}$$

$$\{a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}\} = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$
(VII.114)

**Fouriertransformation der Dichte** Wir wollen den *Teilchenzahloperator*  $\hat{n}(\vec{x}) = \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{x})\hat{\psi}(\vec{x})$  fouriertransformieren, um ihn im Impulsraum darzustellen:

$$\hat{n}_{\vec{q}} := \int d^3x \, \hat{n}(\vec{x}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} = \int d^3x \, \psi^{\dagger}(\vec{x})\psi(\vec{x}) e^{-i\vec{q}\vec{x}}$$
(VII.115)

mit 
$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} a_{\vec{p}}, \qquad \psi^{\dagger}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}'} e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{x}} a_{\vec{p}'}^{\dagger}$$
  

$$\Rightarrow \qquad \hat{n}_{\vec{q}} = \frac{1}{V} \int d^3x \sum_{\vec{p},\vec{p}'} a_{\vec{p}'} a_{\vec{p}} e^{i(\vec{p}-\vec{p}'-\vec{q})\cdot\vec{x}}$$

$$= \sum_{\vec{p},\vec{p}'} a_{\vec{p}} \delta_{\vec{p}',\vec{p}-\vec{q}}$$

$$= \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^{\dagger} a_{\vec{p}+\vec{q}} \qquad (VII.116)$$

**Berücksichtigung des Spins** Bisher haben wir die Spinfreiheitsgrade vernachlässigt. Für ein System von N Elektronen mit z-Komponente des Spins  $\sigma = \pm 1/2$  hat man

 $\psi(\vec{x}) \to \psi_{\sigma}(\vec{x})$ 

Feldoperatoren:

 $\psi^{\dagger}(\vec{x}) \to \psi^{\dagger}_{\sigma}(\vec{x})$  (VII.117)

erzeugen (vernichten) ein Elektron am Ort $\vec{x}$ mit Spin $\sigma.$  Vertauschungsrelationen:

$$\begin{cases} \psi_{\sigma}(\vec{x}), \psi_{\sigma'}(\vec{x}') \end{cases} = 0 = \left\{ \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{x}') \right\} \\ \left\{ \psi_{\sigma}(\vec{x}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{x}') \right\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x}, \vec{x}')$$
(VII.118)

Bzw. in der Impulsdarstellung:

$$\{a_{\vec{k},\sigma}, a_{\vec{k}',\sigma'}\} = 0 = \{a_{\vec{k},\sigma}^{\dagger}, a_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger}\}$$

$$\{a_{\vec{k},\sigma}, a_{\vec{k}',\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta^{(3)}(\vec{k}, \vec{k}')$$
(VII.119)

\_

Weiterhin: Dichteoperator:

$$\hat{n}(\vec{x}) = \sum_{\sigma = \pm^{1/2}} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x})\psi_{\sigma}(\vec{x})$$
$$\hat{n}_{\vec{q}} = \sum_{\vec{p},\sigma} a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}$$

Spindichteoperator:

$$\hat{\vec{S}}(\vec{x}) := \sum_{\alpha=1}^{N} \delta(\vec{x} - \hat{\vec{x}}_{\alpha}) \hat{\vec{S}}_{\alpha} 
= \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(\vec{x}) \vec{\sigma}_{\sigma,\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x})$$
(VII.120)

(VII.121)

mit  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  Pauli-Matrizen.



Abbildung VII.5.: Fermikugel eines Elektronengases

**Verbindung zur Dirac-Gleichung** Die Dirac-Gleichung  $(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi(t, \vec{x}) = 0$  ist als Bewegungsgleichung des 4-Komponentigen Feldoperators  $\hat{\psi}_{\rm H}(t, \vec{x})$  im Heisenbergbild zu verstehen! Das heißt  $\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}_{\rm H}(t, \vec{x})$ 

Lösung:

$$\hat{\psi}_{\rm H}(t,\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} \sum_{r=1}^2 \left\{ \hat{b}_{\vec{p},r} u_r(p) e^{-i p_\mu x^\mu} + \hat{d}^{\dagger}_{\vec{p},r} v_r(p) e^{i p_\mu x^\mu} \right\}$$
(VII.122)

Komplexe Amplituden  $b_{\vec{p},r}$  und  $d^*_{\vec{p},r} \longrightarrow$  Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

#### Interpretation

 $\hat{b}_{\vec{p},r}$ : Vernichtet Spin-1/2-Teilchen (Elektron) mit Impuls  $\vec{p}$  und Polarisation r (= Spin im Ruhesystem)

 $\hat{d}^{\dagger}_{\vec{p},r}$ : Erzeugt ein Anti-Teilchen (Positron) mit Impuls  $\vec{p}$  und Polarisation r (= Spin im Ruhesystem)

**Analog:**  $\psi_{\mathrm{H}}^{\dagger}$  enthält  $b_{\vec{p},r}^{\dagger}$  und  $d_{\vec{p},r}$ 

# VII.9. Anwendung I: Elektronengas (nicht und schwach wechselwirkend)

Als einfachste Anwendung des Formalismus der "Zweiten Quantisierung" betrachten wir ein System von N freien Elektronen im Volumen V im Grundzustand:

$$\phi_0 \rangle = \prod_{\substack{\vec{p} \\ |\vec{p}| < k_{\rm F}}} \prod_{\sigma} a^{\dagger}_{\vec{p},\sigma} |0\rangle \tag{VII.123}$$

mit der Fermi-Wellenzahl $k_{\rm F}$  (siehe hierzu auch Abbildung VII.5). Erwartungswert des Teilchenzahl-operators im Impulsraum:

$$n_{\vec{p},\sigma} = \langle \phi_0 | a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} a_{\vec{p},\sigma} | \phi_0 \rangle = \begin{cases} 1 & \text{für } |\vec{p}| \le k_{\text{F}} \\ 0 & \text{für } |\vec{p}| > k_{\text{F}} \end{cases}$$
(VII.124)

Weiterhin:

- Für  $|\vec{p}| > k_{\rm F}$  gilt  $a_{\vec{p},\sigma} |\phi_0\rangle = 0$  da  $a_{\vec{p},\sigma} |\phi_0\rangle = (-)^N \left( \prod_{|\vec{q}| < k_{\rm F},\sigma'} a^{\dagger}_{\vec{q},\sigma'} \right) a_{\vec{p},\sigma} |0\rangle = 0$
- Für  $|\vec{p}| \leq k_{\rm F}$  gilt jedoch  $a_{\vec{p},\sigma} |\phi_0\rangle \neq 0 \rightarrow$  Erzeugung eines Lochs (Abbildung VII.6).



Abbildung VII.6.: Erzeugung eines Lochs in der Fermikugel (dem Grundzustand)

#### Zusammenhang Gesamtteilchenzahl $\Leftrightarrow$ Fermiimpuls

$$N = \sum_{\vec{p},\sigma} n_{\vec{p},\sigma} = 2 \sum_{|\vec{p}| < k_{\rm F}} 1 = 2 \cdot V \cdot \int_{0}^{k_{\rm F}} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}$$
(VII.125)

 $(\text{Da} \sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) = \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta}{(\frac{2\pi}{L})^3} f(\vec{k}) \to \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k \, f(\vec{k})) \text{ Mit } \Delta: \text{ Volume nelement im } \vec{k} \text{-Raum: } (\frac{2\pi}{L})^3 = \Delta$ 

$$d^{3}p = p^{2}dp \, d\Omega \qquad \int d\Omega = 4\pi$$
$$N = 2V \frac{4\pi}{(2\pi)^{3}} \int_{0}^{k_{\rm F}} dp \, p^{2} = \frac{V}{3\pi^{2}} k_{\rm F}^{3}$$
$$k_{\rm F}^{3} = 3\pi^{2} \frac{N}{V} = 3\pi^{2}n \qquad (\text{VII.126})$$

mit der Teilchenzahldichte $n=\frac{N}{V}.$ 

## Teilchendichte im Ortsraum

 $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow$ 

Teilchendichte ist örtlich homogen, wie man erwartet!

Angeregter Zustand des Elektronengases (bei erhaltener Gesamtteilchenzahl): Teilchen-Loch-Paar (Abbildung VII.7

$$|\phi\rangle = a^{\dagger}_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_1 \sigma_1} |\phi_0\rangle \tag{VII.127}$$

mit  $|\vec{k}_1| < |k_{\rm F}|, |\vec{k}_2| > |k_{\rm F}|.$ 



Abbildung VII.7.: Angeregter Zustand des Elektronengases, "Teilchen-Loch-Paar"

Elektronengas mit Coulomb Wechselwirkung Einschalten einer Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} a_{\vec{k},\sigma} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma,\sigma',\vec{q}} \frac{4\pi}{q^2} a^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} a^{\dagger}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'} a_{\vec{k}',\sigma'} a_{\vec{k},\sigma}$$
(VII.128)

**Einschub:** Fouriertransformation radialsymmetrischer Potentiale

$$V(\vec{x}) = \frac{\alpha}{[\vec{x}^2]^s} \quad \Leftrightarrow \quad V_{\vec{q}} = \int d^3x \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \frac{\alpha}{|\vec{x}^2|^s} = ? \tag{VII.129}$$

Schwinger-Trick:

$$\frac{1}{(\vec{x}^2)^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt \, t^{s-1} e^{-t \cdot \vec{x}^2}$$

 $1 \int_{1}^{\infty} 1 \sqrt{-2}$ 

Da:

$$\int_{0}^{\infty} dt \, t^{s-1} e^{-t \cdot \vec{x}^{2}} = \frac{1}{t' = t \cdot \vec{x}^{2}} \int_{0}^{\infty} \frac{dt' \, t'^{s-1} e^{-t'}}{\int_{0}^{\infty} \frac{dt' \, t'^{s-1} e^{-t'}}{\Gamma(s)}}$$

 $\operatorname{Somit}$ 

$$V(\vec{q}) = \int d^3x \int_0^\infty dt \, \frac{\alpha}{\Gamma(s)} t^{s-1} e^{-t\vec{x}^2 - i\vec{q}\cdot\vec{x}}$$

 $\sim$ 

Quadratische Ergänzung:

$$\vec{x} \to \vec{x} - \frac{i}{2t}\vec{q}$$
$$t\vec{x}^2 \to t\left(\vec{x}^2 - \frac{i\vec{q}\cdot\vec{x}}{t} - \frac{\vec{q}^2}{4t^2}\right)$$
$$-t\vec{x}^2 - i\vec{q}\cdot\vec{x} \to -t\vec{x}^2 + \frac{\vec{q}^2}{4t} - \frac{\vec{q}^2}{2t} = -t\vec{x}^2 - \frac{\vec{q}^2}{4t}$$

 $\operatorname{Somit}$ 

$$V(\vec{q}) = \int_{0}^{\infty} dt \frac{\alpha}{\Gamma(s)} \underbrace{\left(\int d^{3}x \, e^{-t\vec{x}^{2}}\right)}_{\frac{1}{t^{3/2}} \left(\int dx \, e^{-x^{2}}\right)^{3} = \left(\frac{\pi}{t}\right)^{3/2}}_{\vec{t}}$$
$$= \frac{\alpha \pi^{3/2}}{\Gamma(s)} \int_{0}^{\infty} dt \, t^{s-5/2} e^{-\frac{\vec{q}^{2}}{4t}}$$

Substitution: 
$$\tilde{s} = \frac{\vec{q}^2}{4t} \Leftrightarrow t = \left(\frac{\vec{q}^2}{4}\right) \frac{1}{t}, dt = -\frac{\vec{q}^2}{4} \cdot \frac{d\tilde{s}}{\tilde{s}^2}$$
  

$$\Rightarrow \qquad V(\vec{q}) = \frac{\alpha \pi^{3/2}}{\Gamma(s)} \underbrace{\left(\int_{0}^{\infty} d\tilde{s} \, \tilde{s}^{\frac{5}{2}-s-2} e^{-\tilde{s}}\right)}_{=\Gamma(3/2-s)} \left(\frac{\vec{q}^2}{4}\right)^{s-3/2}$$

$$\Rightarrow \qquad V(\vec{q}) = \left(\frac{\vec{q}^2}{4}\right)^{s-3/2} \frac{\Gamma(3/2-s)}{\Gamma(s)} \alpha \pi^{3/2} \qquad (VII.130)$$

Das heißt im Fall des Coulombpotentials  $(s = 1/2, V(\vec{x}) = \frac{\alpha}{r})$ :

$$V(\vec{q}) = \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(1/2)} \frac{4\alpha \pi^{3/2}}{\vec{q}^{\,2}} = \frac{4\pi\alpha}{\vec{q}^{\,2}}$$
(VII.131)

Betrachte nun für das Elektronengas mit Coulomb-Wechselwirkung (VII.128) die Wechselwirkung als Störung. Betrachten zunächst die Energie des ungestörten Systems  $E_0$  im Grundzustand:

$$E_{0} = \langle \phi_{0} | \hat{H}_{kin} | \phi_{0} \rangle = \frac{\hbar^{2}}{2m} \sum_{\vec{k},\sigma} \vec{k}^{2} \theta \left( k_{F} - |\vec{k}| \right)$$
  
$$= \frac{\hbar^{2}}{2m} \cdot 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k \, k^{2} \theta \left( k_{F} - |\vec{k}| \right)$$
  
$$= \frac{\hbar^{2}}{2m} \cdot 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^{3}} 4\pi \int_{0}^{k_{F}} dk \, k^{4} = \frac{3}{5} \underbrace{\left( \frac{\hbar^{2} k_{F}^{2}}{2m} \right)}_{\frac{1}{5} k_{F}^{5}} N \qquad (VII.132)$$

Nebenbemerkung:  $N=\frac{V}{3\pi^2}k_{\rm F}^3$ 

## 1. Ordnung Störungstheorie

$$E_{1} = \langle \phi_{0} | \hat{H}_{\text{INT}} | \phi_{0} \rangle = \frac{e^{2}}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma' \\ |\vec{q}| \neq 0}} \frac{4\pi}{\vec{q}^{2}} \langle \phi_{0} | a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^{\dagger} a_{\vec{k},\sigma} | \phi_{0} \rangle$$
(VII.133)

mit  $|\phi_0\rangle = \left(\prod_{|\vec{k}| < k_F, \sigma} a^{\dagger}_{\vec{k}, \sigma}\right)|0\rangle$ . Der divergente Term  $|\vec{q}| = 0$  wird ausgeschnitten. Man kann zeigen, dass dieser Term sich für Elektronen in einem Festkörper gegen die Wechselwirkung der Elektronen mit den positiv geladenen Gitterionen heraushebt (siehe z.B. Schwabl, QM II).

Wegen  $|\vec{q}| \neq 0$  liefert (VII.133) nur dann einen nichtverschwindenden Beitrag für den Fall  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$  und  $\sigma = \sigma'$ , ansonsten kommt es nicht zur Kompensation der Erzeuger und Vernichter.

$$E_{1} = \frac{e^{2}}{2V} \sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'\\ |\vec{q}|\neq 0}} \frac{4\pi}{\vec{q}^{2}} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\vec{k}',\vec{k}+\vec{q}} \underbrace{(-1)}_{\text{Vertauschen}} \cdot \langle \phi_{0} | \hat{n}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \hat{n}_{\vec{k},\sigma} | \phi_{0} \rangle$$

$$= -\frac{e^{2}2\pi}{V} \sum_{\vec{k},\vec{q}} 2 \widehat{\sum_{\text{Spin}}} \cdot \frac{1}{\vec{q}^{2}} \theta \left( k_{\text{F}} - |\vec{k} + \vec{q}| \right) \cdot \theta \left( k_{\text{F}} - |\vec{k}| \right)$$

$$= -\frac{4\pi e^{2}V}{(2\pi)^{6}} \int d^{3}k \, \theta \left( k_{\text{F}} - |\vec{k}| \right) \int d^{3}k' \, \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^{2}} \theta \left( k_{\text{F}} - |\vec{k}'| \right)$$
(VII.134)

Integrale:

 $\Rightarrow$ 

$$\int d^3k' \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k'}|^2} \theta\left(k_{\rm F} - k'\right) = 4\pi k_{\rm F} F\left(\frac{k}{k_{\rm F}}\right)$$

mit  $F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$  und damit

$$-\frac{e^{2}k_{\rm F}V}{\pi}\int_{k< k_{\rm F}}\frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}}\left[1+\frac{k_{\rm F}^{2}-k^{2}}{2kk_{\rm F}}\ln\left|\frac{k_{\rm F}+k}{k_{\rm F}-k}\right|\right] = -N\frac{3}{4}\frac{e^{2}k_{\rm F}}{\pi}$$

$$\boxed{E_{1}=-\frac{3}{4}\frac{e^{2}k_{\rm F}}{\pi}N}$$
(VII.135)

# VII.10. Anwendung II: Schwach wechselwirkendes Bosegas

Wir betrachten nun ein System von N Spin-0-Bosonen unter dem Einfluss einer Zweiteilchenwechselwirkung (zum Beispiel kalte Atomgase). Weiterhin gelte  $\hbar = 1$ :

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\vec{k}^2}{2m} a^{\dagger}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} V_{\vec{q}} a^{\dagger}_{\vec{k} + \vec{q}} a^{\dagger}_{\vec{p} - \vec{q}} a_{\vec{p}} a_{\vec{k}}$$
(VII.136)

mit  $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{p}}^{\dagger}] = \delta_{\vec{k}, \vec{p}}, V_{\vec{q}} = \int d^3x \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} V(\vec{x}) \text{ und } V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|).$  Grundzustand (bei tiefen Temperaturen): Bose-Einstein-Kondensation im  $\vec{k} = 0$  Zustand:

$$|\phi_0\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{N_0!}} (a_{\vec{0}}^{\dagger})^{N_0} |0\rangle$$

mit  $N_0 \simeq N$ . Das heißt, für die Zahl der angeregten Teilchen gilt  $N - N_0 \ll N$ . Näherung: Vernachlässigung der Wechselwirkung der angeregten Teilchen untereinander. Wir betrachten lediglich die Wechselwirkung der angeregten Teilchen mit dem Kondensat! Wir schreiben von nun an  $\vec{0} = 0$ . Insbesondere  $a_0^{\dagger} = a_{\vec{0}}^{\dagger}$  und  $V_{\vec{q}=\vec{0}} = V_0$ .

Entwicklung von  $\hat{H}$  nach der Zahl der  $a_0$  und  $a_0^{\dagger}$ :

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\vec{k}^{2}}{2m} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} V_{0} a_{0}^{\dagger} a_{0}^{\dagger} a_{0} a_{0} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}}' (V_{0} + V_{\vec{k}}) a_{0}^{\dagger} a_{0} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}}' V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{-\vec{k}}^{\dagger} a_{0} a_{0} + a_{0}^{\dagger} a_{0}^{\dagger} a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) + \mathcal{O} \left( a_{\vec{k}}^{4} \right)$$
(VII.137)  
mit  $\sum_{\vec{k}}' := \sum_{\vec{k} \neq 0}$ 

Näherung:

$$\begin{aligned} a_0|\phi_0\rangle &= a_0|N_0,\dots\rangle = \sqrt{N_0}|N_0-1,\dots\rangle \simeq \sqrt{N_0}|N_0,\dots\rangle \\ a_0^{\dagger}|\phi_0\rangle &= a_0^{\dagger}|N_0,\dots\rangle = \sqrt{N_0+1}|N_0+1,\dots\rangle \simeq \sqrt{N_0}|N_0,\dots\rangle \end{aligned}$$

Da  $N_0 \approx N \gg 1$ . Damit wird  $a_0$  und  $a_0^{\dagger}$  effektiv zur C-Zahl. Wir setzen

$$a_0 = \sqrt{N_0} \qquad \qquad a_0^{\dagger} = \sqrt{N_0}$$

und begehen dabei einen Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(1/N_0)$ .

Der Hamiltonoperator in dieser Näherung sieht wir folgt aus:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{N_0^2 V_0}{2V} + \frac{N_0}{V} \sum_{\vec{k}}' (V_0 + V_{\vec{k}}) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{N_0}{2V} \sum_{\vec{k}}' V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{-\vec{k}}^{\dagger} + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) + \mathcal{O}(a_{\vec{k}}^4) \quad (\text{VII.138})$$

 ${\cal N}_0$ ist aber nicht konstant, sondern die Gesamtteilchenzahl ${\cal N}$ ist konstant.

$$N = N_0 + \sum_{\vec{k}}' a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} = \text{const.}$$
$$N_0 = N - \sum_{\vec{k}}' a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}$$
$$N_0^2 = N^2 - 2N \sum_{\vec{k}}' a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \mathcal{O}(a_{\vec{k}}^4)$$

Einsetzen und Vernachlässigung der  $\mathcal{O}(a_{\vec{k}}^4)$  Terme:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{N^2 V_0}{2V} + \frac{N}{V} \sum_{\vec{k}}' V_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{N}{2V} \sum_{\vec{k}}' V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{-\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) + \mathcal{O}(a_{\vec{k}}^4)$$
(VII.139)

Die durchgeführten Näherungen gehen auf Bogoliubov (1947) zurück. Sie sind gültig, falls die Dichte der Teilchen außerhalb des Kondensats  $n' = \frac{N-N_0}{V}$  klein gegenüber der Teilchendichte  $n = \frac{N}{V}$  ist. (VII.139) ist quadratisch in Erzeugern und Vernichtern in dieser Näherung! Ziel: "Diagonalisierung", das heißt Transformation in eine Form

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\vec{k}}' \omega_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{k}} a_{\vec{k}}$$
(VII.140)

 $\operatorname{mit}$ 

$$\begin{aligned} [\alpha_{\vec{k}}, \alpha^{\dagger}_{\vec{k}'}] &= \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\ [\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}'}] &= 0 = [\alpha^{\dagger}_{\vec{k}}, \alpha^{\dagger}_{\vec{k}'}] \end{aligned} \tag{VII.141}$$

über sogenannte Bogoliubov-Transformation. Ansatz:

$$\begin{split} \hat{a}_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^{\mathsf{T}} \\ \hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger} &= u_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^{\dagger} + v_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{-\vec{k}} \end{split}$$

mit  $u_{\vec{k}},v_{\vec{k}}\in\mathbbm{R},\;u_{\vec{k}}=u_{-\vec{k}},\;v_{\vec{k}}=v_{-\vec{k}}.$  Führt auf (VII.141) falls

$$u_{vk}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1$$
 (VII.142)

Umkehrung:

$$\begin{aligned} \alpha_{\vec{k}} &= u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^{\dagger} \\ \alpha_{\vec{k}}^{\dagger} &= u_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} - v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \end{aligned}$$

Es folgt für  $\hat{H}$ :

$$\begin{split} \hat{H} &= \frac{1}{2V} N^2 V_0 + \sum_{\vec{k}}' \left( \frac{\vec{k}^2}{2m} + n V_{\vec{k}} \right) \left[ u_{\vec{k}}^2 \alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}^2 \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{-\vec{k}}^\dagger + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}}) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}}' n V_{\vec{k}} \left[ (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{-\vec{k}}^\dagger + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}}) + 2 u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger) \right] \end{split}$$

: Unerwünschte nicht-diagonale Terme!

Forderung:

$$\left(\frac{\vec{k}^2}{2m} + nV_{\vec{k}}\right)u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} + \frac{n}{2}V_{\vec{k}}(u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) \stackrel{!}{=} 0$$
(VII.143)

D.h. wir haben 2 Gleichungen (VII.142) und (VII.143) für die 2 unbekannten  $u_{\vec{k}}$  und  $v_{\vec{k}}.$  Lösung:

$$\begin{split} u_{\vec{k}}^2 &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\omega_{\vec{k}}} \Big[ \frac{\vec{k}^2}{2m} + nV_{\vec{k}} \Big] \\ v_{\vec{k}}^2 &= -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\omega_{\vec{k}}} \Big[ \frac{\vec{k}^2}{2m} + nV_{\vec{k}} \Big] \\ \omega_{\vec{k}} &= \sqrt{\left(\frac{\vec{k}^2}{2m}\right)^2 + \frac{n\vec{k}^2V_{\vec{k}}}{m}} \end{split}$$

 $\operatorname{mit}$ 

Weiterhin ist  $u_{\vec{k}}v_{\vec{k}}=-\frac{nV_{\vec{k}}}{2\omega_{\vec{k}}}.$  Es folgt für den Hamilton operator:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{N^2}{2V}V_0 - \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}' \left(\frac{\vec{k}^2}{2m} + nV_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}}\right)}_{\text{Grundzustandsenergie des Kondensats}} + \underbrace{\sum_{\vec{k}}' \omega_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\vec{k}}}_{\text{Anregungsenergieen}}$$
(VII.144)

Erzeuger und Vernichter von "Quasiteilchen":

$$[\hat{\alpha}_{\vec{k}},\hat{\alpha}^{\dagger}_{\vec{k}'}]=\delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

• Grundzustand:

$$|\phi_0\rangle: \qquad \alpha_{\vec{k}}|\phi_0\rangle = 0 \;\forall \vec{k} \tag{VII.145}$$

Nebenbemerkung:

 $a_{\vec{k}} |\phi_0\rangle \neq 0$ 

 $\Rightarrow$ Das heißt auch im Grundzustand des Systems befinden sich Teilchen außerhalb des Impuls  $\vec{0}$ Zustandes.

• Zahl der Teilchen außerhalb des Kondensats:

$$\langle N' \rangle = \langle \phi_0 | \sum_{\vec{k}}' \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} | \phi_0 \rangle$$

$$= \langle \phi_0 | \sum_{\vec{k}}' v_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{-\vec{k}} v_{\vec{k}} \alpha^{\dagger}_{-\vec{k}} | \phi_0 \rangle$$

$$= \sum_{\vec{k}}' v_{\vec{k}}^2 \langle \phi_0 | \hat{\alpha}_{\vec{k}} \alpha^{\dagger}_{\vec{k}} | \phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k}}' v_{\vec{k}}^2$$

$$= \sum_{\vec{k}}' \left[ -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\omega_{\vec{k}}} \left[ \frac{\vec{k}^2}{2m} + nV_{\vec{k}} \right] \right]$$
(VII.146)

• Dispersions relation der Quasiteilchen:

$$\omega_{\vec{k}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{nV_0}{m}} |\vec{k}| & \text{für } |\vec{k}| \ll 1; \text{ Phononenanregungen mit Schallgeschwindigkeit } c = \sqrt{\frac{nV_0}{m}} \\ \frac{\vec{k}}{2m} + nV_{\vec{k}} & \text{für } |\vec{k}| \gg 1; \text{ Teilchen mit mittlerem Potential } nV_{\vec{k}} \end{cases}$$

- Einfacher Spezialfall für das  $V_{\overrightarrow{q}}$ : Kontakt<br/>potential

$$V(\vec{x}) = \lambda \delta^{(3)}(\vec{x}) \Rightarrow V_{\vec{q}} = \lambda$$
 (VII.147)

mit einer Kopplungskonstante  $\lambda$ . Wir wollen einige Eigenschaften des Systems in diesem Spezialfall berechnen:

- Energiemoden:

$$\omega_{\vec{k}} = \sqrt{\left(\frac{\vec{k}^2}{2m}\right)^2 + \frac{n\vec{k}^2\lambda}{m}} \tag{VII.148}$$

– Zahl der Teilchen außerhalb des Kondensats:

$$N' = \sum_{\vec{k}}' \left[ -\frac{1}{2} + \frac{\frac{\vec{k}^2}{2m} + n\lambda}{2\left[\left(\frac{\vec{k}^2}{2m}\right)^2 + \frac{n\vec{k}^2\lambda}{m}\right]^{1/2}} \right]$$

-

Integration liefert:

$$n' = \frac{N'}{V'} = \frac{(m\lambda n)^{3/2}}{3\pi^2}$$

Das heißt solange  $\lambda \ll 1$ ist, gilt  $n' \ll n$ und unsere Näherung ist selbstkonsistent.