

MITSCHRIEB ZU THEORETISCHE PHYSIK E: QUANTENMECHANIK II

Prof. Dr. Klinkhamer

Vorlesung Wintersemester 2003/2004

Letzte Aktualisierung und Verbesserung: 26. April 2008

Mitschrieb der Vorlesung THEORETISCHE PHYSIK E
von Herrn Prof. Dr. KLINKHAMER im Wintersemester 2003/2004
von MARCO SCHRECK.

Dieser Mitschrieb erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit und Korrektheit.
Kommentare, Fehler und Vorschläge und konstruktive Kritik bitte an Marco.Schreck@gmx.de.

Inhaltsverzeichnis

1	Anmerkungen	5
1.1	Literatur	5
1.2	Inhaltsverzeichnis	5
2	Resumé	7
2.1	Verallgemeinerung (kurzgefaßt!)	7
3	WKB	9
3.1	Potentialtopf	11
4	Formalismus	13
4.1	Hauptidee	13
4.2	Vektoren und Operatoren	14
4.3	Hermiteische Operatoren und Observablen	15
4.4	Darstellung durch Matrizen	16
4.5	Quantentheorie	18
4.5.1	Zustände und Messungen	18
4.5.2	Bewegungsgleichungen („Reduktion des Wellenpaketes“)	19
4.5.3	Das SCHRÖDINGER-Bild	19
4.5.4	Das HEISENBERG-Bild	20
4.5.5	Erwartungswerte	20
4.5.6	Das Wechselwirkungsbild	20
4.6	Nachtrag: Wellenmechanik	21
5	Drehimpuls	23
5.1	Hauptidee	23
5.2	Spektrum	23
5.3	Standarddarstellung	24
5.4	Bahndrehimpuls	24
5.5	Drehungen im \mathbb{R}^3	25
5.6	Drehoperator	25
5.7	Drehinvarianz	26
5.7.1	Addition von Drehimpulsen	27
5.7.2	Irreduzible Operatoren	28
5.8	Der Spin	28
5.9	Nichtrelativistische Elektronentheorie (P theory)	29
5.10	Mehrteilchensysteme	30
5.11	Stationäre Störungen	30
6	Identische Teilchen	33
6.1	Das Problem	33
6.1.1	Symmetriepostulat	34
6.2	Permutationen	34
6.2.1	Projektionsoperator	35
6.3	Identische Teilchen	35
6.4	Kontinuum von identischen Teilchen	35
6.4.1	Symmetriepostulat	36
6.5	Bosonen und BOSE-EINSTEIN-Statistik	36
6.5.1	Bosonengas	36

6.6	Fermionen und FERMI-DIRAC-Statistik	36
7	Invarianz und Erhaltungsgrößen	39
7.1	Prolog	39
7.2	Antilineare Operatoren	39
7.3	Gruppe	40
7.4	Transformationsgruppen	40
7.5	Erhaltungssätze und Zeittranslation	41
7.6	Zeitumkehr	42
7.7	Zeitumkehroperator	43
7.7.1	KRAMERS-Entartung	44
8	Relativistische Quantenmechanik	45
8.1	Definition	45
8.1.1	Differentialoperator	46
8.1.2	Elektromagnetisches Feld	46
8.2	Lorentz-Gruppe	47
8.3	Klassische relativistische Dynamik	47
8.4	Klassische relativistische Mechanik	48
8.5	Bewegungsgleichung im elektromagnetischen Feld	48
8.6	KLEIN-GORDON-Gleichung	49
8.7	Kontinuitätsgleichung	50
8.8	DIRAC-Gleichung (1928)	51
8.9	Lorentzinvarianz der DIRAC-Gleichung	53
8.10	Ebene Wellen	54
8.11	Positron (DIRAC: 1931, Anderson: 1932)	55
8.11.1	DIRACsche Hypothese	55
9	Streutheorie I	57
9.1	Definition der Wirkungsquerschnitte	57
9.1.1	Intermezzo	58
9.2	Streuphasen	58
9.2.1	Intermezzo	60
9.3	Integraldarstellung	60
9.4	COULOMBpotential	61
9.5	Sphärische BESSEL-Funktionen	62
9.6	BORNsche Näherung	62
10	Zeitabhängige Störungstheorie	65
10.1	Übergangswahrscheinlichkeit	66
10.2	FERMIS Goldene Regel	67
10.3	BORNscher Wirkungsquerschnitt	68
10.4	Adiabatensatz	69
11	Streutheorie II	71
11.1	Streuamplitude	71
11.2	Die T-Matrix	73
11.2.1	Zustandsdichte	73
11.3	BORNsche Näherung	73
11.4	LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung	74
11.4.1	BORNsche Reihe für die stationäre Streuwelle	75
11.5	Kanäle	76
11.6	GREENSche Funktion der SCHRÖDINGER-Gleichung	76
11.6.1	Übergangsoperator	77
11.7	Optisches Theorem	78
12	CPT-Symmetrie	81
12.1	Experimentelle Entdeckungen	81
12.2	Zeitumkehrinvarianz	82

Kapitel 1

Anmerkungen

1.1 Literatur

- * A.MESSIAH: Quantenmechanik I und II
 - * MERZBACHER: Quantum Mechanics (DIRAC-Gleichung)
 - * SABURAI: Modern Quantum Mechanics (Ergänzend zur Vorlesung)
 - * BALLENTINE: Quantum Mechanics: Modern Development
 - * P.A.M. DIRAC: Principals of Quantum Mechanics
 - * D. BOHM: Quantum Theory
- Die letzten beiden Bücher sind komplementär; sie sollten zusammen verwendet werden.
- * W.PAULI: Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik (schwer zu lesen, aber sehr gut!)
 - * (GOTTFRIED)

1.2 Inhaltsverzeichnis

- I Resumé
- II WKB (Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung mal anders)
- III Formalismus
- IV Drehimpuls
- V Identische Teilchen
- VI Invarianz und Erhaltungssätze
- VII DIRAC-Gleichung
- VIII Streutheorie 1
- IX Streutheorie 2

Kapitel 2

Resumé

Wir erinnern uns an die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$$

$\Psi = \Psi(q_1, \dots, q_N, t)$ ist Wellenfunktion, die abhängig ist von N Freiheitsgraden und der Zeit t . H ist der HAMILTON-Operator, der auch von diesen allgemeinen Koordinaten (und außerdem Impulsen) abhängt:

$$H = H\left(q_1, \dots, q_N, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_N}, t\right)$$

Eine wichtige Randbedingung für die Funktion Ψ ist:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1$$

Sie muß also quadratintegrierbar sein. Kommen wir nun zum Erwartungswert des Operators O :

$$\langle O \rangle \equiv \frac{(\Psi, O\Psi)}{(\Psi, \Psi)}$$

Es handelt sich dabei um den Wert, der im Experiment gemessen werden kann. Eine individuelle Messung ist ein Eigenwert.

2.1 Verallgemeinerung (kurzgefaßt!)

Angenommen, wir haben eine Observable \hat{O} . Es handelt sich hierbei, um einen hermiteschen Operator, der ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenfunktionen besitzt. Ein Beispiel hierfür ist der HAMILTON-Operator:

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{q}, \dots, \hat{p}, \dots)$$

Die \hat{p}_k und \hat{q}_l sind die kanonisch konjugierten kartesischen Variablen. Für deren Kommutator gilt:

$$\boxed{[\hat{q}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl}}$$

Es sei hier auf die klassischen Poisson-Klammern verwiesen. In q -Darstellung gilt:

$$\hat{p}_l \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_l}$$

Damit kann die obige Kommutatorrelation gezeigt werden. Sehr wichtig ist außerdem die HEISENBERGSche Unschärferelation:

$$\Delta q_k \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \text{ mit } \Delta q_k = \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2}$$

Kapitel 3

WKB

Die Idee dieser Methode ist nun folgende:

- 1.) Entwicklung nach Potenzen von \hbar
- 2.) Vernachlässigung von $O(\hbar^2)$

Unser Ziel ist es nun, die stationären Lösungen der zeitunabhängigen eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung zu erhalten. Eine stationäre Lösung läßt sich schreiben als:

$$\Psi(x, t) = \bar{\Psi}(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

Durch Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung resultiert:

$$y'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) y = 0 \quad (1)$$

Zur Lösung dieser Gleichung machen wir nun folgenden Ansatz:

$$y = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W(x)\right) \text{ mit } W(x) = S(x) + \frac{\hbar}{i} \ln A(x) \quad (2)$$

S und A seien gerade Funktionen von \hbar . Man erhält dann:

$$S'^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{A''}{A} \quad (3)$$

$$2A'S' + AS'' = 0 \quad (4)$$

Gleichung (4) wird gelöst durch:

$$A = \text{const.} \cdot (S')^{-\frac{1}{2}} \quad (5)$$

Aus (4) und (5) erhalten wir dann schließlich:

$$S'^2 = 2m(E - V) + \hbar^2 \left[\frac{3}{4} \left(\frac{S''}{S'}\right)^2 - \frac{1}{2} \frac{S'''}{S'} \right] \quad (6)$$

Interessant ist nun, daß wir bisher eine exakte Rechnung durchgeführt haben. An dieser Stelle werden wir jetzt die WKB-Näherung verwenden:

$$S = S_0 + \underbrace{\hbar^2 S_1 + O(\hbar^4)}_{\text{zu vernachlässigen}} \quad (7)$$

Auch Gleichung (6) resultiert dann mit dieser Näherung:

$$S_0'^2 \approx 2m(E - V)$$

Wir unterscheiden zwei Fälle:

1.) $E > V(x)$

Wir definieren eine „Wellenlänge“ ($\lambda := \frac{\hbar}{2\pi}$):

$$\lambda(x) \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}}$$

Es gilt näherungsweise:

$$y \approx k(S'_0)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(i \frac{S_0}{\hbar}\right)$$

Für die allgemeine Lösung folgt dann:

$$y(x) \approx \alpha \sqrt{\lambda} \cos \left[\int_{x_0}^x \frac{dy}{\lambda(y)} \right] \quad (8)$$

α und x_0 seien Konstanten.

2.) $E < V(x)$

Es wird eine sogenannte Eindringtiefe („Skin-depth“ $l := \frac{\hbar}{2\pi}$) definiert:

$$l(x) \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V(x) - E)}}$$

Die allgemeine Lösung lautet hier nun:

$$y(x) \approx \sqrt{l} \left[\beta \exp\left(+ \int_{x_0}^x \frac{dy}{l(y)}\right) + \gamma \exp\left(- \int_{x_0}^x \frac{dy}{l(y)}\right) \right] \quad (9)$$

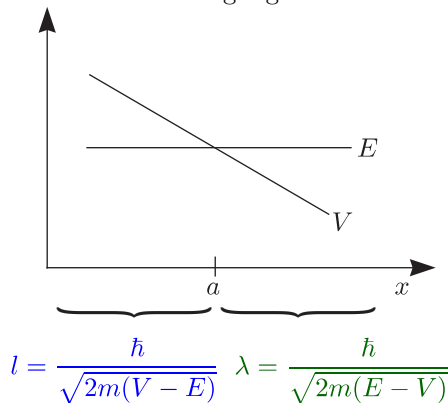
Ein Kriterium für die Exaktheit der Näherung ist:

$$y = y_{WKB} + \exp(i\hbar S_1 + O(\hbar^2)) \quad |\hbar S_1| \ll 1 \quad (10) \xrightarrow{(6)+(7)} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \text{ oder } \left| \frac{dl}{dx} \right| \ll 1 \quad (11)$$

Oder auch:

$$\frac{|m\hbar V'|}{|2m(E - V)|^{\frac{3}{2}}} \ll 1 \quad (12)$$

Die Näherung ist sicherlich nicht erfüllt für die Umkehrpunkte $x_n \cdot V(x_n) = E$. Das Fazit besteht nun darin, die Anschlußbedingungen einzuführen:

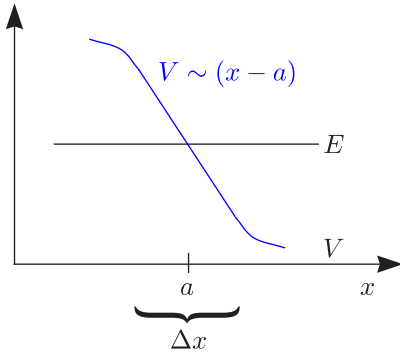


$$\Psi = Ay_1 + By_2$$

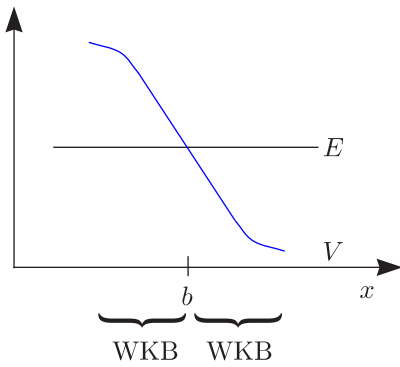
$x \ll a$	$x \gg a$
$y_1 \approx \sqrt{l} \exp \left[+ \int_x^a \frac{dy}{l(y)} \right] \quad (13)$	$y_1 \approx -\sqrt{\lambda} \sin \left[\int_a^x \frac{dy}{\lambda} - \frac{\pi}{4} \right] \quad (15)$
$y_2 \approx \frac{\sqrt{l}}{2} \exp \left[- \int_x^a \frac{dy}{l(y)} \right] \quad (14)$	$y_2 \approx \sqrt{\lambda} \cos \left[\int_a^x \frac{dy}{\lambda} - \frac{\pi}{4} \right] \quad (16)$

Die Voraussetzungen dafür, daß dies stimmt, sind:

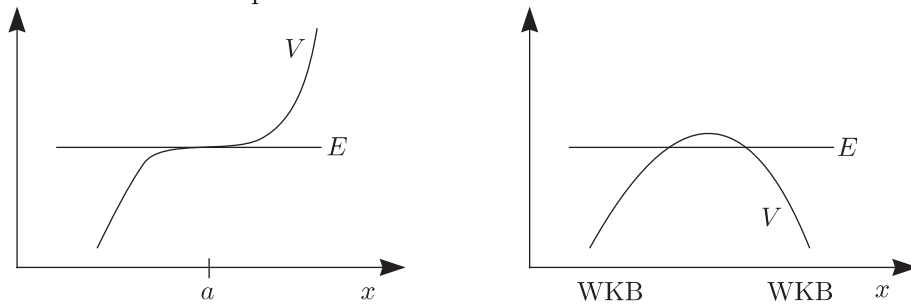
1.) Fall 1:



2.) Fall 2:



Nicht erlaubt ist beispielsweise so etwas:



ABER VORSICHT! Wenn im Bereich $x \ll a$ gilt, daß $\Psi_{\text{exakt}} \approx Ay_1$ mit $A \neq 0$, kann man auch daß $\Psi_{\text{exakt}} \approx Ay_1 + By_2$ mit beliebigem B schreiben. Also ist im Bereich $x \gg a$ die Lösung unbestimmt:

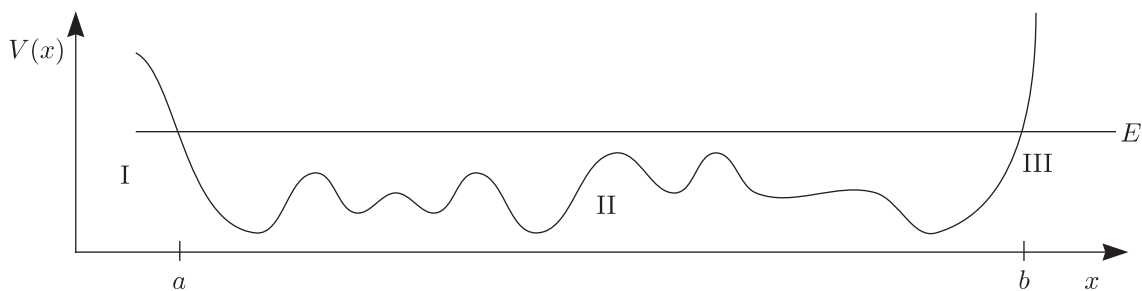
$$\Psi \approx Ay_1 \text{ oder } Ay_1 + By_2$$

Nur wenn im Bereich $x \ll a$ sicher ist, daß $\Psi_{\text{exakt}} = By_2$ ($A = 0$), findet man im Bereich $x \gg a$ sicher:

$$\Psi \approx By_2$$

Für $x \ll a$ gelte $\Psi_{\text{exakt}} = By_2$ und für $x \gg a$ By_2 .

3.1 Potentialtopf



* Bereich I: $x \ll a$

$$y_I \approx \frac{C}{2} \sqrt{l} \exp \left[- \int_x^a \frac{dy}{l(y)} \right]$$

* Bereich III: $x \gg b$

$$y_{III} \approx \frac{C'}{2} \sqrt{l} \exp \left[- \int_b^x \frac{dy}{l(y)} \right]$$

* Bereich II: $a \ll x \ll b$

$$y_a \approx C \sqrt{\lambda} \cos \left[\int_a^x \frac{dy}{\lambda(y)} - \frac{\pi}{4} \right] \quad \text{und} \quad y_b \approx C' \sqrt{\lambda} \cos \left[\int_x^b \frac{dy}{\lambda(y)} - \frac{\pi}{4} \right]$$

Diese Funktionen (y_a, b_b) sind nur gleich ($y_a(x) = y_b(x) \approx y_{II}$), wenn folgendes gilt:

$$\int_a^b \frac{dx}{\lambda(x)} \equiv \int_a^b dx \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} = \left(N + \frac{1}{2} \right) \pi \quad \text{mit } N = 0, 1, 2, \dots \quad (20)$$

Des weiteren muß gelten $C' = (-1)^N C$.

$$y_b = (-1)^N C \sqrt{\lambda} \cos \left[\int_a^b \frac{dy}{\lambda} - \int_a^x \frac{dy}{\lambda} - \frac{\pi}{4} \right]$$

Wir nehmen an, daß $N = 2$ ist. Dann folgt:

$$y_b = C \sqrt{\lambda} \cos \left[2\pi + \frac{\pi}{2} - \int_a^x \frac{dy}{\lambda} - \frac{\pi}{4} \right] = C \sqrt{\lambda} \cos \left[- \int_a^x \frac{dy}{\lambda} + \frac{\pi}{4} \right] = C \sqrt{\lambda} \cos \left[\int_a^x \frac{dy}{\lambda} - \frac{\pi}{4} \right] = y_a$$

1.) Die WKB-Methode funktioniert im Bereich II nur für $N \gg 1$. (21)

$$2.) \oint_{H=E} p \, dq = \left(N + \frac{1}{2} \right) h \quad (22)$$

Dies kann man folgendermaßen zeigen:

$$\int_a^b \frac{dx}{\frac{\lambda}{2\pi}} = \pi \cdot 2 \cdot \int_a^b \frac{dx}{\lambda} = \pi \oint \frac{dx}{\lambda}$$

Mittels der de-Broglie-Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p}$ folgt dann:

$$\pi \oint \frac{dx}{\lambda} = \pi \oint \frac{p}{h} dx = \left(N + \frac{1}{2} \right) \pi$$

$$\oint p \, dq = \left(N + \frac{1}{2} \right) h$$

Kapitel 4

Formalismus

4.1 Hauptidee

* In der Wellenmechanik gibt es eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\Psi = \Psi(q_1, \dots, q_N) \in \mathbb{C}$ im Ortsraum.

a.) Postulat 1:

$$O = O(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \text{ wird } \hat{O} \left(q_1, \dots, q_N, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_N} \right) \text{ zugeordnet.} \quad (1)$$

b.) Postulat 2:

$$\langle O \rangle \equiv \frac{\langle \Psi, \hat{O} \Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \quad (2)$$

Mit Skalarprodukten im Ortsraum:

$$\langle \Psi, \hat{A} \Psi \rangle \equiv \int dq_1 \dots dq_N \Psi^* (\hat{A} \Psi) \quad (3)$$

* Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum:

$$\phi = \phi(p_1, \dots, p_N)$$

a.) Postulat 1':

$$O(q_1, \dots, p_N) \text{ wird } \hat{O} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_1}, \dots, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_N}, p_1, \dots, p_N \right) \text{ zugeordnet.} \quad (1')$$

b.) Postulat 2':

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \Phi, \hat{O} \Phi \rangle}{\langle \Phi, \Phi \rangle} \quad (2')$$

$$\langle \Phi, \hat{A} \Phi \rangle \equiv \int dp_1 \dots dp_N \Phi^* (\hat{A} \Phi) \quad (3')$$

* Die Wellenfunktionen Ψ und Φ stellen den ein und denselben Vektor $|\Omega\rangle$ dar.

* $\Psi(q_1, \dots, q_N)$ sind die „Komponenten“ dieses Vektors in einem bestimmten orthogonalen Koordinatensystem.

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \langle q_1, \dots, q_N | \Omega \rangle$$

* Ebenso sind die Werte $\Phi(p_1, \dots, p_N)$ die Komponenten desselben Vektors in einem anderen Koordinatensystem.

$$\Phi(p_1, \dots, p_N) = \langle p_1, \dots, p_N | \Omega \rangle$$

* Superpositionsprinzip

Das führt dazu, daß wir einen linearen Vektorraum und lineare Operatoren besitzen. Daraus resultiert dann die Verwendung des HILBERT-Raums.

4.2 Vektoren und Operatoren

a.) \mathcal{E} sei ein linearer Vektorraum mit den Ket-Vektoren $|\dots\rangle$, das heißt:

$$\left. \begin{array}{l} |1\rangle \in \mathcal{E} \\ |2\rangle \in \mathcal{E} \\ \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \end{array} \right\} |3\rangle \equiv \lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle \in \mathcal{E}$$

Oder mit einem kontinuierlichem Index $\xi \in \mathbb{R}$:

$$\left. \begin{array}{l} |\xi\rangle \\ \lambda(\xi) \in \mathbb{C} \end{array} \right\} |\Xi\rangle \equiv \int_{x_1}^{x_2} d\xi \lambda(\xi)|\xi\rangle \in \mathcal{E}$$

b.) Jedem Vektorraum \mathcal{E} kann ein dualer Vektorraum \mathcal{E}' mit sogenannten Bra-Vektoren $\langle \dots |$ zugeordnet werden. Zwischen diesen beiden Vektorräumen \mathcal{E} und \mathcal{E}' gibt es eine eindeutige Zuordnung:

$$|u\rangle \in \mathcal{E} \Leftrightarrow \langle u| \in \mathcal{E}'$$

$$|v\rangle = \lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle \Leftrightarrow \langle v| = \lambda_1^*\langle 1| + \lambda_2^*\langle 2|$$

c.) Skalarprodukt des Kets $|u\rangle$ mit dem Ket $|v\rangle$ ergibt die Zahl $\langle v|u\rangle \in \mathbb{C}$. Das Skalarprodukt kann nur definiert sein in einem bestimmten Vektorraum, nämlich dem des Kets oder des Bras. Folgende Eigenschaften sind dabei zu notieren:

1.) $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$

2.) Das Skalarprodukt ist linear.

$$\left. \begin{array}{l} |3\rangle = \lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle \\ |4\rangle \end{array} \right\} \langle 4|3\rangle = \lambda_1\langle 4|1\rangle + \lambda_2\langle 4|2\rangle$$

3.) Normquadrat: $N(u) \equiv \langle u|u\rangle \geq 0$

Wir wollen an dieser Stelle die CAUCHY-SCHWARZsche-Ungleichung abführen:

$$|\langle u|v\rangle|^2 \leq \langle u|u\rangle\langle v|v\rangle$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn $|u\rangle$ und $|v\rangle$ linear abhängig sind.

d.) Vollständigkeit und Separabilität

Liegen diese Eigenschaften vor, handelt es sich um einen HILBERT-Raum.

e.) Linearer Operator A

$$|v\rangle = A|u\rangle$$

Ist die Zuordnung eindeutig, so haben wir zwei Operatoren A und B , so gilt:

$$|v\rangle = A|u\rangle \Rightarrow |u\rangle = B|v\rangle$$

A und B heißen invers, wenn $AB = \mathbf{1}$ und $BA = \mathbf{1}$. Üblicherweise schreiben wir dann $B = A^{-1}$.

f.) Definition des Tensorprodukts

Angenommen, wir haben zwei Vektoren $|u\rangle^1 \in \mathcal{E}_1$ und $|v\rangle^2 \in \mathcal{E}_2$. Das Produkt $|u^1, v^2\rangle \equiv |u\rangle^1|v\rangle^2 \in \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ nennt man Tensorprodukt. Wir haben einen linearen Operator A' im Raum \mathcal{E}_1 , dann gilt im Produktraum $A^{(1)} = A^1 \otimes \mathbf{1}^2$.

$$A^1|u\rangle^2 = |v\rangle^1 \Rightarrow A^{(1)}|u^1 u^2\rangle = |v^1 u^2\rangle$$

Ist $A^{(2)} \equiv \mathbf{1}^1 \otimes A^2$, so folgt daraus, daß die Operatoren kommutieren:

$$[A^{(1)}, A^{(2)}] = 0$$

4.3 Hermitesche Operatoren und Observablen

Sei A ein linearer Operator $|v\rangle = A|u\rangle$. Man nutzt die Relation:

$$\langle \chi | (A|u\rangle) = (\langle \chi | A) |u\rangle$$

Man kann nun auch einen linearen Operator A definieren, welcher auf Bras wirkt:

$$\langle \eta | = \langle \chi | A$$

Der zu A adjungierte Operator B wird definiert durch die Relation $\langle u|B|w\rangle \equiv \langle w|A|u\rangle^*$ und wird bezeichnet als $B = A^\dagger$. Es gilt hier auch $A^{\dagger\dagger} = A$.

a.) Konjugationsoperator:

Man ersetze überall:

- 1.) Zahlen durch konjugiert komplexe Zahlen.
- 2.) Bras durch die dazu konjugierten Kets und umgekehrt
- 3.) Die Operatoren A durch A^\dagger
- 4.) Kehre die Reihenfolge der verschiedenen Symbole um

➤ Beispiel ①:

$$\langle z|AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle \Rightarrow \langle w|C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger|z\rangle$$

➤ Beispiel ②:

$$AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle \Rightarrow \langle w|C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger$$

➤ Beispiel ③:

$$AB|u\rangle\langle v|C \Rightarrow C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger$$

b.) Ein linearer Operator H heißt hermitesch, wenn $H^\dagger = H$ ist. H heißt positiv definit, wenn für alle $|u\rangle \in \mathcal{E}$ gilt $\langle u|H|u\rangle \geq 0$.

c.) Ein Operator U heißt unitär, wenn $UU^\dagger = \mathbf{1} = U^\dagger U$.

d.) Eigenwertproblem

Es liege folgende Gleichung vor:

$$A|u\rangle = a|u\rangle \text{ mit } a \in \mathbb{C}$$

a heißt Eigenwert und $|u\rangle$ Eigenket. Für ein Bra gilt dann analog:

$$\langle u'|A = a'\langle u'| \text{ mit } a \in \mathbb{C}$$

Theorem:

Ist A hermitesch, so hat man:

- 1.) Beide Eigenwertspektren $\{a\}$ und $\{a'\}$ sind identisch: $\{a\} = \{a'\}$.
- 2.) Alle Eigenwerte sind reell, das heißt $a \in \mathbb{R}$.
- 3.) Die Orthogonalität der Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten.

Wir wollen diese Aussage beweisen. Dazu bilden wir das Skalarprodukt mit $\langle v|$:

$$A|u\rangle = a|u\rangle \Rightarrow \langle v|A|u\rangle = a\langle v|u\rangle$$

Anschließend führen wir das gleiche Skalarprodukt mit $|u\rangle$ durch:

$$\langle v|A = b\langle v| \Rightarrow \langle v|A|u\rangle = b\langle v|u\rangle$$

Durch Subtraktion der beiden Gleichungen ergibt sich dann, da die linke Seite gleich ist:

$$0 = (a - b)\langle v|u\rangle$$

Für $a \neq b$ gilt dann $\langle v|u\rangle = 0$.

- e.) Sei A der hermitesche Operator der Eigenwertgleichung $A\phi(x) = a\phi(x)$ mit diskreten Spektren a_n mit $n = 0, 1, 2, \dots$ (möglich mehrfach entartet) und mit kontinuierlichem Anteil $a(\nu)$. Die Eigenfunktionen $\phi_n^{(r)}$ (r ist Entartungsindex) stellen orthonormierte Kets $|nr\rangle$ und die Eigenfunktionen $\phi^{(r)}(\nu, \varrho)$ die Kets $|\nu\varrho_r\rangle$. Die Orthonormierungsrelationen sind:

$$\langle nr|n'r'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'}$$

$$\langle nr|\nu'\varrho'r'\rangle = 0$$

$$\nu\varrho_r|\nu'\varrho'r'\rangle = \delta(\nu - \nu')\delta(\varrho - \varrho')\delta_{rr'}$$

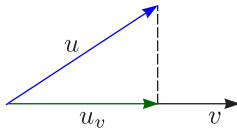
Spannen diese Vektoren den gesamten Raum auf, so sagt man, daß sie ein vollständiges System bilden und daß der hermitesche Operator A eine Observable ist. Wenn dies so ist, dann hat man die Vollständigkeitsrelation.

$$P_A \equiv \sum_{n,r} |nr\rangle\langle nr| + \sum_r \iint |\nu\varrho_r\rangle d\nu d\varrho \langle \nu\varrho_r| = \mathbf{1}$$

Man bezeichnet dies als „Zerlegung der Einheit“.

- Projektionsoperatoren

Gegeben sei der Vektor $|v\rangle$ mit $\langle v|v\rangle = 1$. Für jedes $|u\rangle$ haben wir den projizierten Vektor $|u_v\rangle = |v\rangle\langle v|u\rangle$.



Wir nennen $\hat{p}_v \equiv |v\rangle\langle v|$ den Projektor mit $|u_v\rangle = \hat{p}_v|u\rangle$. Der Projektor besitzt die Eigenwerte 1 und 0. Für einen linearen Operator \hat{A} mit normierten Eigenvektoren $|a_n\rangle$ ($\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$) definiert man:

$$P_A \equiv \sum_{n=1}^{\infty} |a_n\rangle\langle a_n|$$

Ein Vektor $|u\rangle$ wird somit auf den durch $|a_n\rangle$ aufgespannten Untervektorraum projiziert. Ist A eine Observable, findet man $P_A = \mathbf{1}$ (Zerlegung der Einheit).

4.4 Darstellung durch Matrizen

- * Wir haben die Eigenwertgleichung $\hat{Q}|m\rangle = q_m|m\rangle$ mit $m = 1, 2, 3, \dots$

Die Vektoren $|k\rangle$ und $|l\rangle$ seien normiert, also gelte $\langle k|l\rangle = \delta_{kl}$.

$$P_Q \equiv \sum_m |m\rangle\langle m| = \mathbf{1}$$

$|m\rangle$ sind die Basisvektoren in der $\{Q\}$ -Darstellung. Für jeden Vektor $|u\rangle$ kann man schreiben:

$$|u\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} |m\rangle \underbrace{\langle m|u\rangle}_{u_m \in \mathbb{C}} \equiv \sum_m u_m |m\rangle$$

Die Zahlen u_m kann man als die Elemente einer Spaltenmatrix mit dem Zeilenindex m . Der Spaltenvektor $|u_1, u_2, u_3, \dots\rangle$ definiert $|u\rangle$ vollständig. Ebenso kann man dies für einen Bra-Vektor schreiben:

$$\langle v| = \sum_n \langle v|n\rangle \langle n| \equiv \sum_n v_n \langle n|$$

Der Zeilenvektor (\dots, v_3, v_2, v_1) stellt den Bra-Vektor $\langle v|$ in der Q -Darstellung dar. Ebenso kann jeder linearer Operator \hat{A} in eine Doppelreihe entwickelt werden:

$$\hat{A} = \sum_{m,n} |m\rangle \underbrace{\langle m|\hat{A}|n\rangle}_{A_{m,n} \in \mathbb{C}} \langle n| = \sum_{m,n} A_{mn} |m\rangle\langle n|$$

Die A_{mn} können als die Elemente einer quadratischen Matrix mit Zeilenindex n und Spaltenindex m angesehen werden.

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Diese Matrix stellt den Operator \hat{A} in der Q -Darstellung dar. Man kann dies nachlesen in BORN-HEISENBERG-JORDAN, Z.Phys. 35 (1926), 537.

* Erinnern wir uns an die Definition des adjungierten Operators:

$$(A^\dagger)_{mn} \equiv \langle m | \hat{A}^\dagger | n \rangle = \langle n | \hat{A} | m \rangle^* = (A_{nm})^*$$

Man muß also die Matrix \mathcal{A} transponieren und komplex konjugieren. Wir betrachten nun ein Produkt der Operatoren \hat{A} und \hat{B} :

$$(AB)_{mn} = \langle m | \hat{A}\hat{B} | n \rangle = \sum_k \langle m | \hat{A} | k \rangle \langle k | \hat{B} | n \rangle = \sum_k A_{mk} B_{kn}$$

Dies entspricht also gerade der Matrixmultiplikation.

* Observable Q in der $\{Q\}$ -Darstellung

Diese wird dargestellt durch eine Diagonalmatrix:

$$Q_{mn} \equiv \langle m | Q | n \rangle = q_n \langle m | n \rangle = q_n \delta_{mn}$$

Wir haben einen Operator \hat{X} mit $[\hat{X}, \hat{Q}] = \hat{0}$ und führen nun damit block-diagonale Matrizen ein. Dadurch, daß Q eine Observable ist, gilt:

$$0 = \langle m | [X, Q] | n \rangle = (q_n - q_m) \langle m | X | n \rangle$$

Damit folgt dann:

$$\langle m | X | n \rangle = 0 \text{ für alle } (m, n) \text{ mit } q_m \neq q_n$$

$$\begin{pmatrix} & q_{n-1} & & q_n & & q_{n+1} \\ & \boxed{} & & & & \mathbf{0} \\ & & & & & \\ \mathbf{0} & & & \boxed{} & & \\ & & & & & \\ & & & & & \boxed{} \end{pmatrix}$$

* Darstellungswechsel (beispielsweise für zwei Basissysteme)

$|n\rangle$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$ sei Eigenvektor der Observable \hat{Q} (siehe oben) und $|\xi\rangle$ mit $\xi \in (-\infty, +\infty)$ Eigenvektor der Observable $\hat{\Xi}$.

$$\langle \xi | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi')$$

$$P_{\Xi} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi |\xi\rangle \langle \xi| = \mathbf{1}$$

$$|n\rangle = \int |\xi\rangle d\xi \langle \xi | n \rangle \equiv \int |\xi\rangle d\xi S(\xi, n)$$

$$|\xi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \xi \rangle \equiv \sum_n |n\rangle T(n, \xi)$$

Die Koeffizienten $S(\xi, n)$ bilden eine „Matrix“ mit „Zeilenindex“ ξ und „Spaltenindex“ n . Das Fazit ist nun:

$$T = S^\dagger, SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbf{1}$$

Daraus folgt, daß die Matrix unitär ist. Erinnern wir uns an folgende Eigenschaft des Skalarprodukts:

$$\langle \xi | n \rangle = \langle n | \xi \rangle^*$$

Daraus ergibt sich $T = S^\dagger$.

$$\sum_n \langle \xi | n \rangle \langle n | \xi' \rangle = \delta(\xi - \xi')$$

Hieraus folgt $SS^\dagger = \mathbf{1}$. Analog folgt:

$$\int \langle n | \xi \rangle d\xi \langle \xi | n' \rangle = \delta_{nn'}$$

Daraus ergibt sich $TT^\dagger = \mathbf{1}$. Vorsicht ist hier geboten, denn $S(\xi, n)$ ist keine Matrixdarstellung eines Operators, da $S(\xi, n)$ nicht quadratisch ist.

4.5 Quantentheorie

4.5.1 Zustände und Messungen

Zu jedem Zustand eines Quantensystems gehört ein bestimmter $|\Psi\rangle$ des HILBERT-Raums \mathcal{E} . Jeder dynamischen Variablen wird eine Observable des Raumes \mathcal{E} zugeordnet. Es gibt drei Grundpostulate:

1.) Wahrscheinlichkeitspostulat:

Wir haben eine physikalische Größe A verknüpft mit der Funktion F . Dann nennen wir $\langle F(A) \rangle = \langle \Psi | F(\hat{A}) | \Psi \rangle$ den Erwartungswert.

2.) Messungspostulat:

- a.) Die einzigsten Werte, welche die Größe A annehmen kann, sind die Eigenwerte der Observable \hat{A} .
- b.) Die Wahrscheinlichkeit W_D dafür, daß das Meßergebnis zum Bereich D des Spektrums gehört, ist gegeben durch:

$$W_D = \langle P_D \rangle = \langle \Psi | P_D | \Psi \rangle, \text{ wobei } |\Psi_D\rangle = P_D |\Psi\rangle$$

$$W_D = \langle P_D \rangle = \langle \Psi | P_D P_D | \Psi \rangle \equiv \langle \Psi_D | \Psi_D \rangle = N(\Psi_D)$$

3.) Das Postulat der „Reduktion des Wellenpakets“:

Ein System befinde sich im Zustand $|\Psi\rangle$. Eine Idealmessung ergebe das Resultat D . Durch das Eingreifen in das Experiment ergibt sich ein neuer Zustandsvektor:

$$|\Psi\rangle \mapsto \frac{P_D |\Psi\rangle}{|\langle \Psi | P_D | \Psi \rangle|^{\frac{1}{2}}}$$

Beispiel:

Wir nehmen an, daß D ein Eigenwert a_1 des diskreten Spektrums ist. Also gilt die Eigenwertgleichung:

$$\hat{A}|n\rangle = a_1|n\rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n | \Psi \rangle \equiv \sum_n c_n |n\rangle \equiv \sum_n |\Psi_n\rangle \text{ mit } \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

Die Wahrscheinlichkeit W_1 , um für A den Wert a_1 zu finden, berechnet sich nun nach:

$$W_1 = \langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi | 1 \rangle \langle 1 | \Psi \rangle = |C_1|^2$$

Wenn ich nun a_1 gemessen habe, verändert sich die Situation:

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\text{Messung ergibt } a_1} |1\rangle$$

4.5.2 Bewegungsgleichungen („Reduktion des Wellenpaketes“)

Ein isoliertes System ist deterministisch. Zur Zeit t_0 sei ein Vektor $|\Psi(t_0)\rangle$ und zur Zeit t ein Vektor $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$ gegeben. $U(t, t_0)$ nennt man Entwicklungsoperator. Wir postulieren:

* Integralgleichung:

$$U(t, t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'$$

H sei hermitesch.

* Differentialgleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0)$$

Es gelte die Randbedingung $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$.

Daraus folgt dann das vierte Quantenpostulat (Postulat 4^(S)), nämlich die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$$

$$\left[i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) \right] |\Psi(t_0)\rangle = [H(t) U(t, t_0)] |\Psi(t_0)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$$

Wir machen einen kleinen „Zeitsprung“:

$$|\Psi(t' + dt)\rangle = \left[\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} H(t') dt \right] |\Psi(t')\rangle$$

Daraus folgt dann:

$$U(t' + dt, t') = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} H dt$$

Wir wollen zeigen, daß der Operator unitär ist:

$$U U^\dagger = U^\dagger U = \left(\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) \left(\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar} H dt \right) = \mathbf{1} + O(dt^2)$$

Man kann nun das Zeitintervall von t_0 nach t in infinitesimal kleine Stückchen einteilen. Dann kann $U(t, t_0)$ als Produkt geschrieben werden:

$$U(t, t_0) = \prod U(t' + dt, t')$$

Als Produkt der unitären Operatoren $U(t' + dt, t')$ ist auch $U(t, t_0)$ unitär.

4.5.3 Das Schrödinger-Bild

$|\Psi(t)\rangle$ sei gegeben. Die Wahrscheinlichkeit, χ zu finden ergibt sich dann aus:

$$|\langle \chi | \Psi(t) \rangle|^2$$

Wir wenden den Entwicklungsoperator an:

$$|\Psi(t_1)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle$$

$$|\langle \chi | \Psi(t_1) \rangle|^2 = |\langle \chi | U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle|^2$$

4.5.4 Das Heisenberg-Bild

Wir erhalten das HEISENBERG-Bild aus dem SCHRÖDINGER-Bild durch eine unitäre Transformation mit dem Operator $U^\dagger(t, t_0)$. Damit ergibt sich:

$$|\Psi_H\rangle = U^\dagger(t, t_0)|\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(t_0)\rangle$$

$$A_H(t) = U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)$$

Daraus folgt die „neue Bewegungsgleichung“, also das 4.Quantenpostulat im HEISENBERG-Bild (Postulat 4^(H)):

$$i\hbar \frac{dA_H}{dt} = [A_H, H_H] + i\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t}$$

Man nennt diese die HEISENBERG-Gleichung. Wir setzen $A_H(t)$ in diese Gleichung ein. Dazu werten wir zuerst die Zeitableitung auf der linken Seite aus:

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H = U^\dagger A_S H_S U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U - U^\dagger H A_S U = U^\dagger [A_S, H] U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U$$

Mit $H_H = U^\dagger H U$ folgt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H = U^\dagger (A_S U U^\dagger H - H U U^\dagger A_S) U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U = [A_H, H_H] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_H$$

Jeder Ket-Vektor im HEISENBERG-Bild beschreibt eine mögliche Bewegung des Systems.

Intermezzo:

Betrachten wir ein Quantensystem mit Observablen $(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_N, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_N)$ und den Kommutatorbeziehungen $[\hat{q}_m, \hat{q}_n] = [\hat{p}_m, \hat{p}_n] = 0$; $[\hat{q}_m, \hat{p}_n] = i\hbar \delta_{mn}$. Das klassische System habe die dynamische Variable $A_{klass} = A(q_1, \dots, q_N)$ und erfülle die Bewegungsgleichung:

$$\frac{dA_{kl}}{dt} = \{A_{kl}, H_{kl}\}_P + \frac{\partial}{\partial t} A_{kl}$$

Mit der Definition der Poisson-Klammern:

$$\{A, H\}_P \equiv \sum_n \left(\frac{\partial A}{\partial q^n} \frac{\partial H}{\partial p^n} - \frac{\partial A}{\partial p^n} \frac{\partial H}{\partial q^n} \right)$$

Man macht den Schritt von „Klassisch“ nach „Quantenmechanik“ durch:

$$\boxed{\{A, B\}_{\text{Poissonklammer}} \mapsto \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]_{\text{Kommutator}}}$$

4.5.5 Erwartungswerte

1.) HEISENBERG-Bild:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi_H | A_H | \Psi_H \rangle$$

2.) SCHRÖDINGER-Bild:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi_S | U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) | \Psi_S \rangle = \langle \Psi_S | A_S | \Psi_S \rangle$$

Die Erwartungswerte im SCHRÖDINGER- und HEISENBERGBild sind damit gleich.

4.5.6 Das Wechselwirkungsbild

Es sei folgender HAMILTON-Operator gegeben:

$$H = H^{(0)} + H^{(1)} \text{ mit } H = H^\dagger \quad [H^{(0)}, H^{(1)}] = 0$$

$H^{(1)}$ sei klein. Wir betrachten die strenge Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^{(0)} = H^{(0)} U^{(0)}(t, t_0) \text{ mit } U(t_0, t) = \mathbf{1}$$

$$|\Psi_I(t)\rangle = U^{(0)\dagger}(t, t_0)|\Psi_S(t)\rangle; A_I(t) = U^{(0)\dagger} A_S U^{(0)}$$

Im Wechselwirkungsbild ändern die Kets sich langsam, da $H^{(1)}$ klein ist:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = [A_I, H_I^{(0)}] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_I}$$

Es gilt allgemein:

$$\boxed{U^{(0)\dagger} U^{(0)} = \mathbf{1}}$$

$$\frac{d}{dt} U^{(0)\dagger} U^{(0)} = 0$$

$$\frac{d}{dt} U^{(0)\dagger} U^{(0)} = U^{(0)} \frac{d}{dt} U^{(0)\dagger} + U^{(0)\dagger} \frac{d}{dt} U^{(0)} = 0 \Leftrightarrow U^{(0)} \frac{d}{dt} U^{(0)\dagger} = -U^{(0)\dagger} \frac{d}{dt} U^{(0)}$$

Dies wird im folgenden benötigt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^{(0)\dagger} = i\hbar \cdot U^{(0)\dagger} U^{(0)} \frac{d}{dt} U^{(0)\dagger} = -U^{(0)\dagger} \left[i\hbar \frac{d}{dt} U^{(0)} \right] U^{(0)\dagger} = -U^{(0)\dagger} H^{(0)} U^{(0)} U^{(0)\dagger} = -U^{(0)\dagger} H^0$$

Durch Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung unter Berücksichtigung der Produktregel folgt dann:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^{(0)\dagger} |\Psi_S\rangle = -U^{(0)\dagger} H^{(0)} |\Psi_S\rangle + U^{(0)\dagger} \left(H^{(0)} + H^{(1)} \right) |\Psi_S\rangle = [U^{(0)\dagger} H^{(1)} U^{(0)}] U^{(0)\dagger} |\Psi_S\rangle = H_I^{(1)}(t) |\Psi_I(t)\rangle$$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_I\rangle = H_I^{(1)}(t) |\Psi_I(t)\rangle}$$

Das Wechselwirkungsbild ist sehr gut geeignet zur Beschreibung von Streuprozessen.

4.6 Nachtrag: Wellenmechanik

Wir wählen das SCHRÖDINGER-Bild und die Ortsdarstellung.

$$\hat{q}_1 \equiv \hat{q} : \hat{q}|q'\rangle = q'|q'\rangle$$

Die Basisvektoren sind orthonormiert:

$$\langle q'|q''\rangle = \delta(q' - q'')$$

$$P_q \equiv \int_{-\infty}^{\infty} |q'\rangle dq' \langle q'| = \mathbf{1}$$

Jedes $|\Psi\rangle$ wird durch die „Einspaltenmatrix“ mit „Komponenten“ $\langle q'|\Psi\rangle$ dargestellt. $\langle q'|\Psi\rangle \equiv \Psi(q')$ ist die Wellenfunktion. Wir bilden das Skalarprodukt von $|\Psi\rangle$ mit $|\Phi\rangle$:

$$\langle \Phi|\Psi\rangle = \int \langle \Phi|q'\rangle dq' \langle q'|\Psi\rangle = \int dq' \Phi^*(q') \Psi(q)$$

Wir schreiben die Funktion $V(\hat{q})$ wirkend auf $|\Psi\rangle$ auf:

$$\langle q'|V(\hat{q})|\Psi\rangle = V(q') \Psi(q')$$

Hierbei handelt es sich um eine einfache Multiplikation. Ebenso gilt:

$$\langle q'|\hat{p}|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'} \Psi(q') \quad \left(\text{Tipp: } \langle q'|\hat{p}|q''\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'} \delta(q - q'') \right)$$

Wir betrachten den HAMILTON-Operator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$$

Durch Einsetzen in die obige Beziehung folgt:

$$\langle q' | \hat{H} | \Psi \rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + V(q') \right] \Psi(q')$$

Im SCHRÖDINGER-Bild gilt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_S(t)\rangle = \hat{H}_S |\Psi_S(t)\rangle$$

Daraus folgt schließlich die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q', t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + V(q') \right] \Psi(q', t)}$$

Ebenso gilt dies in der $\{p\}$ -Darstellung:

$$\langle p' | \Psi \rangle \equiv \Phi(p')$$

Daraus folgt dann auch hier die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p', t) = H\Phi}$$

Kapitel 5

Drehimpuls

5.1 Hauptidee

Der Drehimpuls ist ein Vektoroperator, dessen drei Komponenten nicht kommutativ sind.

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$$

In der Wellenmechanik stellt man \vec{L} durch einen Differentialoperator dar: $\vec{l} = -i\vec{r} \times \vec{\nabla}$ ($\hbar \equiv 1$). Damit kann man die Vertauschungsrelationen $[l_x, l_y] = il_z$ etc. ableiten. Mit diesen Beziehungen und Definitionen findet man außerdem $[\vec{l}, l^2] = 0$. Angenommen, wir haben N Teilchen. Das n -te Teilchen habe den Drehimpuls $\vec{l}^{(n)} = \vec{r}^{(n)} \times \vec{p}^{(n)}$. Der Gesamtdrehimpuls ergibt sich durch Summation über alle Einzeldrehimpulse:

$$\vec{L} = \sum_{n=1}^N \vec{l}^{(n)}$$

Außerdem gilt $[\vec{l}^{(m)}, \vec{l}^{(n)}] = 0$ für $n \neq m$. Damit ergeben sich weitere Vertauschungsrelationen mit der Definition des Gesamtdrehimpulses:

$$[L_x, L_y] = \sum_{m,n} [l_x^{(m)}, l_y^{(n)}] = \sum_n [l_x^{(n)}, l_y^{(n)}] = \sum_n il_z(n) = iL_z$$

Definition:

Der Vektoroperator \vec{J} ist ein Drehimpuls, wenn $[J_k, J_l] = i\varepsilon_{klm}J_m$, mit dem total antisymmetrischen Tensor ε_{klm} . Es ist außerdem sehr geschickt, folgenden Operator einzuführen:

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$$

Dieser besitzt folgende Eigenschaften:

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \text{ und } [J_+, J_-] = 2J_z$$

Daraus folgt dann mit diesen Vertauschungsrelationen:

- 1.) $J_- J_+ = J^2 - J_z(J_z + 1)$
- 2.) $J_+ J_- = J^2 - J_z(J_z - 1)$

5.2 Spektrum

J^2 und J_z haben gemeinsame Eigenvektoren. Wir notieren uns zwei wichtige Sätze, auf deren Herleitung wir aber verzichten wollen:

Satz 1:

Die Eigenwerte von J^2 sind von der Form $j(j+1)\hbar^2$ für $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

Satz 2:

Sind $|\tau, j, m\rangle$ Eigenvektoren von J^2 und J_z mit Eigenwerten $j(j+1)\hbar^2$ und $m\hbar$, so sind die Werte von m gleich $-j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j$.

Ableitung (kurz):

Angenommen, wir haben einen beliebigen Vektor $|u\rangle$. Dann betrachten wir:

$$\langle u|J^2|u\rangle = N(J_x|u\rangle) + N(J_y|u\rangle) + N(J_z|u\rangle) \geq 0$$

Damit haben wir bewiesen, daß J^2 ein positiv semidefiniter Operator ist. So sind dessen Eigenwerte ≥ 0 . Wir schreiben diese als $j(j+1)$ mit $j \geq 0$. Für einen beliebigen Vektor $|j, m\rangle$ folgt mit den Identitäten 1.) und 2.), daß $-j \leq m \leq j$ ist. Dies ergibt sich unter anderem daraus, daß die Norm nie kleiner als Null sein darf! Mit den Leiteroperatoren L_{\pm} erhalten wir für einen Vektor $|j, j\rangle$:

$$2j = p + q \in \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$$

Daraus resultiert dann schließlich $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

5.3 Standarddarstellung

Die Vektoren J^2 zum Eigenwert $j(j+1)$ und J_z zum Eigenwert $m = +j$ bilden einen Untervektorraum $\mathcal{F}^j \subseteq \mathcal{E}$. $|\tau, j, j\rangle$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem in \mathcal{F}^j , es gilt also $\langle \tau, j, j | \tau', j, j \rangle = \delta_{\tau\tau'}$.

$|\tau, j, -j\rangle; |\tau, j, -j+1\rangle \dots |\tau, j, j\rangle$

Es gelten folgende Eigenwertgleichungen:

- 1.) $J^2|\tau, j, m\rangle = j(j+1)|\tau, j, m\rangle$
- 2.) $J_z|\tau, j, m\rangle = m|\tau, j, m\rangle$
- 3.) $J_{\pm}|\tau, j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|\tau, j, m \pm 1\rangle$

Dadurch ist die Normierung festgelegt. Das konkrete System bestimmt,

- 1.) welche ganz- oder halbzahlgigen Werte tatsächlich zum Spektrum gehören.
- 2.) „ τ “

5.4 Bahndrehimpuls

Wir betrachten ein Einteilchensystem mit den Polarwinkeln (ϑ, φ) . Dazu schreiben wir den Differentialoperator des Drehimpulsquadrats in Kugelkoordinaten auf:

$$\hat{l}^2 = -\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Der Drehimpulsoperator in z -Richtung lautet außerdem:

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Gesucht sind nun Lösungen folgender Eigenwertgleichungen:

- 1.) $\hat{l}^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) = l(l+1) Y_l^m$
- 2.) $\hat{l}_z Y_l^m = m Y_l^m$

Wir machen folgenden Ansatz durch Trennung der Variablen:

$$Y_l^m(\vartheta, \varphi) = f_l^m(\vartheta) \exp(im\varphi)$$

Jede Wellenfunktion ändert sich nicht unter $\varphi \mapsto \varphi + 2\pi$. Dies ist aber nur dann der Fall, wenn $\exp(im(\varphi+2\pi)) = \exp(im\varphi) \cdot \exp(im2\pi) = \exp(im\varphi)$. Und das gilt nur für $m \in \mathbb{Z}$. Und damit ist nach Satz 2 $j \in \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$. Es gibt keinen halbzahlgigen Bahndrehimpuls. Halbzahlgiger Eigendrehimpuls (Spin) ist jedoch erlaubt:

- * Elektron: $s_e = \frac{1}{2}$
- * Quark: $s_q = \frac{1}{2}$

5.5 Drehungen im \mathbb{R}^3

Wir führen drei Beschreibungen ein:

- A.) Gegeben sei ein Einheitsvektor $|\hat{u}$ und ein Winkel φ . Dann wird eine Drehung beschrieben durch $\mathcal{R}_{\hat{u}}(\varphi)$.
Im infinitesimalen Fall gilt:

$$\vec{v}' = R_{\hat{u}}(\varepsilon)\vec{v} = \vec{v} + \varepsilon\hat{u}\vec{v} + O(\varepsilon^2)$$

- B.) Wir haben orthonormierte Einheitsvektoren $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3 \xrightarrow{\mathcal{R}} \hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3$

$$\hat{A}_j \equiv \mathcal{R}[\hat{a}_j] = \hat{a}_i R_{ij} \text{ mit } R_{ij} \equiv \hat{a}_i \cdot \hat{A}_j \in \mathbb{R}$$

R_{ij} ist eine orthogonale und unimodulare Matrix: $R_{ij} \in SO(3)$. Für jeden Vektor $\vec{v} = \hat{a}_j v_j$ folgt:

$$\vec{v}' \equiv \mathcal{R}[\vec{v}] = \hat{A}_j v_j = \hat{a}_i R_{ij} v_j$$

- C.) Man kann Drehungen auch durch die Eulersche Winkel α, β und γ beschreiben: $\mathcal{R}(\alpha, \beta, \gamma)$.

5.6 Drehoperator

Wir haben ein einzelnes Teilchen im Zustand a mit der Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$ und nach der Drehung einen Zustand a' mit der neuen Wellenfunktion $\Psi'(x)$.

* Zustand a : Wellenfunktion $\Psi(x), \langle x|a \rangle$

* Zustand a' : Wellenfunktion $\Psi(x), \langle x|a' \rangle$

Allgemein ist jeder Drehung \mathcal{R} eines physikalischen Systems ein unitärer Operator R zugeordnet. Es muß also gelten $R^\dagger R = R R^\dagger = \mathbf{1}$. Die Zustände ändern sich also wie folgt:

$$|a'\rangle = R|a\rangle$$

Für die Observable folgt $Q' = R Q R^\dagger$. Bei skalaren Observablen S gilt für alle Drehungen \mathcal{R} , daß $S' = R S R^\dagger = S$ gilt. Dann findet man die Bedingung, daß R und S kommutieren: $[R, S] = 0$. Ein Vektoroperator \vec{K} besteht aus drei Komponenten, welche selbst Operatoren sind. Für die einzelnen Komponenten gilt:

$$K'_i \equiv R K_i R^\dagger = \tilde{R}_{ij} K_j$$

„ \sim “ bedeutet „transponiert“.

Wir machen eine infinitesimale Drehung um die Achse z -Achse. Wir lassen den unitären Operator R_z (z ist keine Komponente, sondern nur eine Bezeichnung!) auf die Wellenfunktion wirken:

$$R_z(\varepsilon)[\Psi(x, y, z)] = \Psi(x + y\varepsilon, -x\varepsilon + y, z)$$

Dann machen wir eine Taylor-Entwicklung:

$$\Psi(x + y\varepsilon, -x\varepsilon + y, z) = \Psi(x, y, z) + \varepsilon y \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \varepsilon x \frac{\partial}{\partial y} \Psi = (\mathbf{1} - i\varepsilon l_z) \Psi(x, y, z)$$

Also haben wir die Darstellung des Operators R_z erhalten:

$$\boxed{R_z = \mathbf{1} - i\varepsilon l_z}$$

Ist \vec{J} der Gesamtdrehimpuls eines Systems, so gilt für eine bestimmte Drehung um die Achse \hat{u} mit dem infinitesimal kleinen ε :

$$\boxed{R_{\hat{u}}(\varepsilon) = \mathbf{1} - i\varepsilon \vec{J} \cdot \hat{u}}$$

Für einen skalaren Operator S gilt folgende Kommutatorrelation für alle \hat{u} :

$$[\hat{u} \cdot \vec{J}, S] = 0$$

\vec{J} ist hierbei der Gesamtdrehimpuls. Für einen Vektoroperator \vec{K} mit den Komponenten $K_a \equiv \vec{K} \cdot \hat{a}$ gilt für alle \hat{u} und \hat{a} :

$$[\hat{u} \cdot \vec{J}, \hat{a} \cdot \vec{K}] = i(\hat{u} \times \hat{a}) \cdot \vec{K}$$

Wir wollen diese Beziehung kurz ableiten:

$$K'_a = R_u(\varepsilon)K_a R_u(\varepsilon)^\dagger = K_a - i\varepsilon [J_u \cdot K_a]$$

$$K'_a \equiv \vec{K} \cdot \hat{a}' = K \cdot (\hat{a} + \varepsilon \hat{u} \times \hat{a})$$

Durch Vergleich dieser beiden Beziehungen erhalten wir:

$$[J_u, K_a] = i\vec{K} \cdot (\hat{u} \times \hat{a})$$

Alle Drehungen können als Verkettungen von infinitesimal kleinen Drehungen angesehen werden:

$$\mathcal{R}_{\hat{u}}(\varphi + d\varphi) = R_{\hat{u}}(d\varphi)\mathcal{R}_{\hat{u}}(\varphi)$$

Jetzt nutzen wir unseren Operator im HILBERT-Raum:

$$R_{\hat{u}}(\varphi + d\varphi) = R_{\hat{u}}(d\varphi)R_{\hat{u}}(\varphi) = (\mathbf{1} - iJ_u d\varphi) R_u(\varphi)$$

Daraus folgt dann durch Differentiation nach φ :

$$\frac{d}{d\varphi} R_{\hat{u}}(\varphi) = -iJ_u R_{\hat{u}}(\varphi) \text{ mit } R_{\hat{u}}(0) = \mathbf{1}$$

Hierbei handelt es sich um eine Differentialgleichung für $R_{\hat{u}}(\varphi)$. Die Lösung dieser Gleichung erhält man mit einem Exponentialansatz, womit gilt:

$$R_{\hat{u}}(\varphi) = \exp[-i\varphi J_u]$$

Diesen Ausdruck kann man dann als Taylor-Reihe verstehen.

Bemerkung:

Wir könnten beispielsweise eine Drehung um 2π durchführen:

$$R_{\hat{u}}(2\pi) = \exp(-2\pi i J_u)$$

Betrachten wir die Darstellung mit diagonalem J_u , womit wir folgende Eigenwertgleichung erhalten:

$$R_{\hat{u}}(2\pi)|j, +j\rangle = \exp(2\pi i j)|j, +j\rangle$$

Die Eigenwerte sind ± 1 , je nachdem, ob j ganz oder halbzahlig ist. Dies ergibt sich aus den Eigenschaften der komplexen Exponentialfunktion.

5.7 Drehinvarianz

Die Invarianz einer Größe bei Drehungen kann durch bestimmte Eigenschaften des Drehimpulses zum Ausdruck gebracht werden. Da jede Drehung durch Hintereinanderausführung infinitesimaler Drehungen beschrieben werden kann, betrachten wir auch nur infinitesimale Drehungen. $|\Psi\rangle$ ist drehinvariant, wenn für alle \hat{u} gilt, daß $\hat{u} \cdot \vec{J}|\Psi\rangle = 0$ ist. Die Observable S ist auch drehinvariant, wenn für alle \hat{u} die Kommutatorrelation $[\hat{u} \cdot \vec{J}, S] = 0$ gilt. Betrachten wir beispielsweise die Drehinvarianz des HAMILTON-Operators. Für alle Drehungen \mathcal{R} muß der unitäre Operator R mit H vertauschen:

$$[R, H] = 0$$

Daraus resultiert dann, daß die Bewegungsgleichungen drehinvariant sind. Das heißt: Wenn $|\Psi(t)\rangle$ eine Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist, dann ist auch $R|\Psi(t)\rangle$ eine Lösung. Notieren wir uns hierzu die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) R|\Psi(t)\rangle = R \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right) |\Psi(t)\rangle = R \cdot 0 = 0$$

Der Operator R kann nach vorne gezogen werden, da R mit H kommutiert und außerdem zeitunabhängig ist. Da $|\Psi\rangle$ eine Lösung ist, gilt dann dies.

Betrachten wir beispielsweise die Drehinvarianz des HAMILTON-Operators:

$$[R, H] = 0$$

Des weiteren vertauschen die Operatoren J^2 , J_x und H paarweise. Das bedeutet, daß diese Operatoren gemeinsame Eigenfunktionen $|n, j, m\rangle$ besitzen. Damit kann man ableiten, daß die Eigenwerte E_j $(2j + 1)$ -fach entartet sind; man spricht auch von Dreherentartung. Nehmen wir an, es sei $m = -j$. Dann gilt:

$$HJ_+|j, -j\rangle = \text{const.} \cdot H|j, -j + 1\rangle$$

Da H und J_+ vertauschen, gilt außerdem:

$$HJ_+|j, -j\rangle = J_+H|j, -j\rangle$$

Damit können wir die Energieeigenwerte aufschreiben:

$$E_{j,-j}J_+|j, -j\rangle = \text{const.} \cdot E_{j,-j+1}|j, -j + 1\rangle = E_{j,-j+1}J_+|j, -j\rangle$$

Daher gilt also $E_{j,-j} = E_{j,-j+1}$ usw. Für alle m ist $E_{j,m} = E_{j,-j} \equiv E_j$.

5.7.1 Addition von Drehimpulsen

Wir schreiben den Gesamtdrehimpuls \vec{J} als Summe der Einzeldrehimpulse \vec{j}_n , welche bekannt sein sollen:

$$\vec{J} = \sum_n \vec{j}_n$$

Betrachten wir das einfachste Beispiel:

$$\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$$

Damit erhalten wir mittels des Tensorprodukts:

$$|\tau, j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |\tau, j_1, m_1\rangle \otimes |\tau, j_2, m_2\rangle \in \mathcal{E}(\tau, j_1, j_2)$$

Gesucht ist dann $|\tau, j_1, j_2, J, M\rangle$, wobei J der Eigenwert von \vec{J}^2 und M der Eigenwert von J_z ist. Das Additionstheorem besagt nun:

- 1.) Die Eigenwerte J sind $j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2|$.
Alle Eigenwerte sind somit positiv und liegen zwischen $j_1 + j_2$ und dem Absolutwert der Differenz, also $|j_1 - j_2|$.
- 2.) Zu jedem dieser Werte gehört eine Folge von $(2J + 1)$ Eigenwerten $|\tau, j_1, j_2, J, M\rangle$.

Den Beweis schlage man in geeigneter Literatur nach. Machen wir dazu eine Kontrolle: Nehmen wir an, daß $j_1 \geq j_2$. Dann schreiben wir J auf:

$$J = j_1 \boxed{+j_2}, j_1 \boxed{+j_2 - 1}, \dots, j_1 \boxed{-j_2} = j_1 + n \text{ mit } n = -j_2, \dots, +j_2$$

$$\begin{aligned} N &= \sum_{n=-j_2}^{+j_2} [2(j_1 + n) + 1] = \sum_{n=-j_2}^{+j_2} [(2j_1 + 1) + 2n] = \sum_{n=-j_2}^{+j_2} (2j_1 + 1) + \sum_{n=-j_2}^{+j_2} 2n = \\ &= \sum_{n=-j_2}^{+j_2} (2j_1 + 1) = (2j_1 + 1) \cdot \sum_{n=-j_2}^{+j_2} 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned}$$

Damit ist der Satz für diesen Fall gezeigt. Betrachten wir nun folgende Basen:

$$\{|\tau, j_1, j_2, J, M\rangle\}, \{|\tau, j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$$

Damit kann man einen bestimmten Vektor $|\tau, j_1, j_2, J, M\rangle$ schreiben als:

$$|\tau, j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |\tau, j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M\rangle$$

Man nennt nun j_1, j_2, m_1 und m_2 die CLEBSCH-GORDAN-Koeffizienten. Diese sind τ -unabhängig und können reell gewählt werden.

5.7.2 Irreduzible Operatoren

Sei S ein skalarer Operator, dann gilt $[\vec{J}, S] = 0$. Dann gilt:

$$\tau, J, M |S| \tau', J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} S_{\tau\tau'}^{(J)}$$

$S_{\tau\tau'}^{(J)}$ nennt wir das reduzierte Matrixelement. Diese Beziehung kann mit den Auf- und Absteigeoperatoren J_+ und J_- gezeigt werden. Man kann nun einen reduziblen Tensoroperator k -ter Stufe $T^{(k)}$ mit $2k+1$ Komponenten $T_q^{(k)}$. Machen wir dazu zwei Beispiele:

- 1.) Tensoroperator 0-ter Stufe: $T^{(0)} = S$
Hierbei handelt es sich gerade um einen skalaren Operator.
- 2.) Tensoroperator erster Stufe: $T^{(1)} = \vec{K}$
Dies ist ein Vektoroperator.

Das Analogon hierzu ist das WIGNER-ECKART-Theorem. Das reduzierte Matrixelement ist unabhängig von m und m' .

5.8 Der Spin

Das SCHRÖDINGER-Theorem der Atomphysik braucht zwei Modifikationen:

- 1.) Den Spin des Elektrons
- 2.) Die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion

Betrachten wir ein Atom mit Z „Elektronen“ (ohne Spin) im Schwerpunktsystem:

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2}$$

Das Atom soll sich nun in einem konstanten Magnetfeld \vec{B} befinden. Das Vektorpotential läßt sich dann schreiben als:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$$

Wir schreiben den HAMILTON-Operator nun als:

$$H = H_0 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{B} \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar} + O(B^2)$$

Um zu zeigen, daß dies gilt, machen wir folgende Transformation:

$$p_i \mapsto p_i - \frac{e}{c} A_i$$

$$\left(\vec{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \vec{p}^2 - \frac{e}{c} (\vec{A}\vec{p} + \vec{p}\vec{A}) + O(B^2)$$

Nach einer längeren Rechnung folgt:

$$\vec{p}^2 - \frac{e}{c} (\vec{A}\vec{p} + \vec{p}\vec{A}) + O(B^2) = \vec{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) + O(B^2) = \boxed{\vec{p}^2 - \frac{e}{c} \vec{B} \cdot \vec{L} + O(B^2)}$$

Wir führen das Bohrsche Magneton μ_B ein:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

Es sei nun $\vec{B} \parallel \hat{z}$ und des weiteren haben wir ein vollständiges Eigensystem von H_0 , L^2 und L_z bestehend aus den Eigenvektoren $|n, L, M\rangle$. L ist hierbei ganzzahlig und M laufe von $-L$ bis $+L$. Es liegen außerdem die Energie-Eigenwerte $E^{n,L,M}$ vor, für die gilt:

$$E^{n,L,M} = E_0^{n,L} - \mu_B B M$$

Wir erwarten damit ein Multiplett von $2L+1$ äquidistanten Niveaus. $2L+1$ ist nun eine ungerade Zahl. Man findet aber experimentell leider etwas anderes:

- * Bei Atomen mit ungeradem Z sind die Multipletts geradzahlig. Hierbei handelt es sich um den „anomalen“ Zeeman-Effekt.
- * Der Abstand benachbarter Niveaus eines Multipletts beträgt $g\mu_B B$, wobei G der Landé-Faktor, wobei dieser bei verschiedenen Multipletts variieren kann.

Die Lösung des Problems ist nun folgende: Das Elektron besitzt einen Eigendrehimpuls von der Größe $\frac{1}{2}\hbar$ (Spin $s = \frac{1}{2}$), den das magnetische Moment $\mu_s = g_s \frac{e}{2mc} s$ zugeordnet ist. Aus die relativistischen DIRAC-Theorie erhält man exakt $g_s = 2$. In der relativistischen Quantenfeldtheorie (QED) findet man jedoch:

$$g_s = 2 + C_1\alpha + C_2\alpha^2 + \dots$$

Es handelt sich hier um die sogenannte Lamb-Verschiebung (Lamb-Shift).

5.9 Nichtrelativistische Elektronentheorie (P theory)

Angenommen, wir haben einen Spinvektor \vec{S} mit dem Eigenwert $s(s+1) = \frac{3}{4}$ von \vec{S}^2 . Für die Eigenvektoren von \vec{S}^2 und S_z folgt:

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |+\rangle$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |-\rangle$$

Wir können \vec{S} mit den Pauli-Matrizen darstellen:

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma} \text{ mit } \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \text{ und } \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Dann können wir die Eigenvektoren auch darstellen als Spinoren

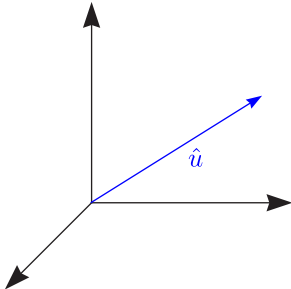
$$|+\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|-\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Spinoren sind keine Zweivektoren!

$$S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ mit } \mu = +\frac{1}{2}, S_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ mit } \mu = -\frac{1}{2}$$

Betrachten wir eine Drehung $\mathcal{R}_{\hat{u}}(\varphi)$:



$$R_{\hat{u}}^{(1/2)}(\varphi) = \exp \left[-i\varphi \frac{\vec{\sigma}}{2} \cdot \hat{u} \right] = \cos \left(\frac{\varphi}{2} \right) \mathbf{1}_2 - \sin \left(\frac{\varphi}{2} \right) i\vec{\sigma} \cdot \hat{u} \text{ mit } R(2\pi) = -\mathbf{1}$$

Die letzte Beziehung ergibt sich durch Betrachtung der Taylor-Entwicklung der Exponentialfunktion. Betrachten wir nun ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$. Dieses habe die Bahnvariablen r_k und p_k und es gelte $[r_k, p_l] = i\delta_{kl}$. Für die Spinvariablen gilt:

$$[r_k, S_l] = 0 = [p_k, S_l], |\vec{S}|^2 = \frac{3}{4}\mathbf{1}, [S_k, S_l] = i\varepsilon_{klm}S_m$$

Der Zustandsraum ist das Tensorprodukt $\mathcal{E} = \mathcal{E}^{Ort} \otimes \mathcal{E}^{Spin}$. Wir betrachten die Darstellung mit \vec{r} und diagonalem S_z :

$$\langle \vec{r} | \mu | \psi \rangle \equiv \psi(r, \mu) \hat{=} \text{Wellenfunktion}$$

Der Gesamtdrehimpuls \vec{j} setzt sich zusammen aus Bahndrehimpuls \vec{l} und Spin \vec{s} :

$$\vec{j} = \vec{l}^{(Ort)} \otimes \mathbf{1}^{(Spin)} + \mathbf{1}^{(Ort)} \otimes \vec{s}^{(Spin)} = \vec{l} + \vec{s}$$

Wir schreiben nun die Wellenfunktion in Zweikomponentenform:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_+(r) \\ \psi_-(r) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi\left(r, +\frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(r, -\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix}$$

Wir wollen das als Spinorfeld bezeichnen. Machen wir eine Drehung, so wird das Spinorfeld auch gedreht. Erstens wird die Position des Feldes gedreht, zweitens ändern sich die Komponenten.

$$\mathcal{R}(\alpha, \beta, \gamma) : R\psi = R^{1/2} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathcal{R}_x^{-1}) \\ \psi_-(\mathcal{R}_x^{-1}) \end{pmatrix}$$

Zum Vergleich notieren wir uns die Drehung eines Skalarfeldes und eines Vektorfeldes:

$$R\Phi = \Phi(\mathcal{R}_x^{-1})$$

$$R\vec{A} = R^{(1)} \begin{pmatrix} A_1(\mathcal{R}_x^{-1}) \\ A_2(\mathcal{R}_x^{-1}) \\ A_3(\mathcal{R}_x^{-1}) \end{pmatrix}$$

5.10 Mehrteilchensysteme

Haben wir mehrere Teilchen, so gilt analog zu einem Teilchen:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Schauen wir uns den HAMILTON-Operator im konstanten Magnetfeld an. Bei einem einzigen Teilchen war dies eine 2×2 -Matrix. Haben wir jedoch Z Teilchen, so handelt es sich um eine $(2Z) \times (2Z)$ -Matrix.

$$H = H^{(0)} - \mu_B \vec{B} \cdot \frac{(\vec{L} + 2\vec{S})}{\hbar^2} + O(B^2)$$

S ist ein Operator, welcher auf $2Z$ Spinvariablen wirkt. Nach kurzer Rechnung findet man den Zeeman-Effekt:

$$E = E_0 - g_{Landé} \cdot \mu_B B M$$

E_0 ist $(2J + 1)$ -fach entartet und M geht von $-J$ bis $+J$. Schreiben wir den Landé-Faktor nochmals explizit auf:

$$g_{Landé} = 1 + \frac{J(J + 1) + S(S + 1) - L(L + 1)}{2J(J + 1)}$$

5.11 Stationäre Störungen

Wir betrachten den HAMILTON-Operator H mit einer Störung W :

$$H = H_0 + \lambda W$$

Das Eigenwertproblem von H_0 ist gelöst:

$$H_0 |E_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |E_n^{(0)}\rangle$$

Nehmen wir einen bestimmten Eigenwert $E_a^{(0)}$, welche nicht entartet sein soll. Dann verwenden wir im folgenden die Schreibweise:

$$|E_a^{(0)}\rangle \equiv |0\rangle \text{ und } E_a^{(0)} \equiv \varepsilon_0$$

Die betreffenden Vektoren $|0\rangle$ und $|\psi\rangle$ seien normiert, es gelte also $\langle 0|0\rangle = 1$ und $\langle \psi|\psi\rangle = 1$. Außerdem seien die Vektoren orthogonal:

$$\langle 0|1\rangle = \langle 0|2\rangle = \dots = 0$$

Dann können wir die Eigenwertgleichung des HAMILTON-Operators schreiben als:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \text{ mit } \lim_{\lambda \rightarrow 0} E(\lambda) = \varepsilon_0$$

Die Lösung wollen wir in eine Potenzreihe entwickeln:

$$E = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \dots$$

$$|\psi\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \dots$$

Das Spektrum von H hängt von λ stetig ab:

$$(H_0 - \varepsilon_0)|0\rangle = 0$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (W - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$$

\vdots

Wir finden also eine unendliche Reihe von Gleichungen. Aus der zweiten Gleichung erhalten wir durch Multiplikation mit $\langle 0|$:

$$\langle 0|(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + \langle 0|(W - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$$

Da H_0 hermitesch ist, können wir schreiben:

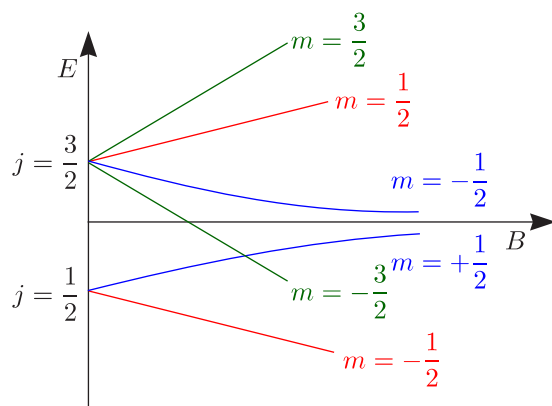
$$\langle 0|(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle = \langle 0|H^\dagger - \varepsilon_0|1\rangle = \langle 0|\varepsilon_0^* - \varepsilon_0|1\rangle = \langle 0|\varepsilon_0 - \varepsilon_0|1\rangle = 0$$

Der vorletzte Schritt mit $\varepsilon_0^* = \varepsilon_0$ ergibt sich aus der Tatsache, daß ein hermitescher Operator reelle Eigenwerte besitzt. Damit erhalten wir schließlich:

$$\boxed{\lambda\varepsilon_1 = \lambda\langle 0|W|0\rangle}$$

Es resultiert nun:

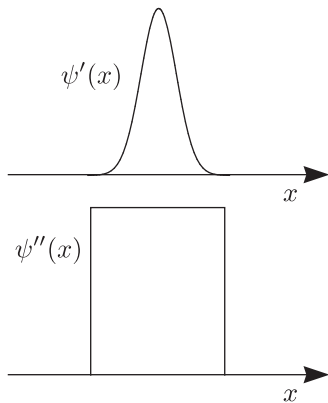
$$\boxed{|1\rangle = P_{\perp 0} \frac{1}{\varepsilon_0 - H_0} P_{\perp 0} W|0\rangle \text{ mit } P_{\perp 0} \equiv \mathbf{1} - |0\rangle\langle 0|}$$



Kapitel 6

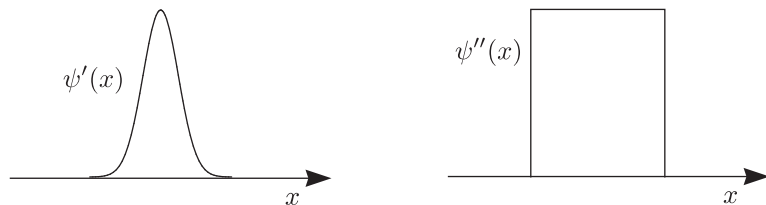
Identische Teilchen

6.1 Das Problem

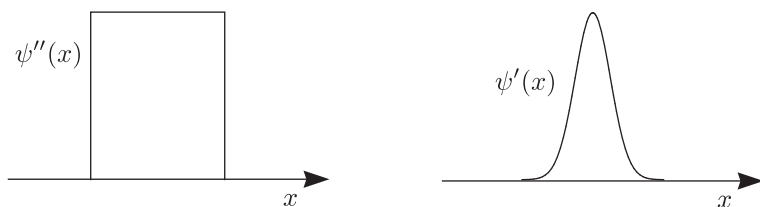


Wir betrachten den Stoß zweier identischer Teilchen. Vor dem Stoß befindet sich ein Teilchen im Zustand $\psi'_0(x)$ und das andere im Zustand $\psi''_0(x)$. Diese Wellenfunktionen sollen sich vor dem Stoß nicht überlappen.

$$\psi_0(x^{(1)}, x^{(2)}) \equiv \psi'_0(x^1)\psi''_0(x^2)$$



$$\tilde{\psi}_0(x^1, x^2) \equiv \psi''_0(x^1)\psi'_0(x^2)$$



Andererseits definieren wir („S“ bedeutet symmetrisch und „A“ antisymmetrisch):

$$\psi_0^{(S)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0 + \tilde{\psi}_0), \quad \psi_0^{(A)} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0 - \tilde{\psi}_0)$$

Die allgemeinste Beschreibung des Systems am Anfang ist:

$$\Psi_0 \equiv \alpha\psi_0^{(A)} + \beta\psi_0^{(S)} \quad \text{mit} \quad |\alpha|^2 = |\beta|^2 = 1$$

Man bezeichnet dies als Austauschentartung. Zur Zeit t schreiben wir die Wellenfunktion als:

$$\Psi(x^1, x^2, t) = \alpha\psi^{(A)} + \beta\psi^{(S)}$$

Was ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, eines der Teilchen in \vec{x}' zu finden und das andere in \vec{x}'' , lautet:

$$P(\vec{x}', \vec{x}'') = |\Psi(x', x'')|^2 + |\Psi(x'', x')|^2 = \boxed{2|\alpha|^2 \cdot |\psi^{(A)}(x', x'')|^2 + 2|\beta|^2 \cdot |\psi^{(S)}(x', x'')|^2}$$

Damit dieser Ausdruck unabhängig von α und β ist, muß $|\psi^{(A)}(x', x'')| = |\psi^{(S)}(x', x'')|$ gelten. Im allgemeinen ist dies jedoch nicht gegeben. Betrachten wir beispielsweise Wellenpakete ϕ , welche überlappen:

$$\psi = \phi'(x^1, t)\phi''(x^2, t)$$

Nehmen wir an, daß sich diese in einem Punkt \vec{y} überlappen.

$$|\psi^{(S)}(y, y)| = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\phi'(y)\phi''(y) + \phi''(y)\phi'(y)) = \sqrt{2}|\psi'(y)\psi''(y)| \neq 0$$

$$|\psi^{(A)}(y, y)| = 0 \text{ nach Definition}$$

Es handelt sich also um einen Widerspruch!

6.1.1 Symmetriepostulat

Damit wollen wir nun das Symmetriepostulat einführen:

Entweder sind die Zustände alle symmetrisch ($\alpha = 0, \beta = 1$) oder sind alle antisymmetrisch ($\alpha = 1, \beta = 0$).

6.2 Permutationen

Betrachten wir N Teilchen $\{\vec{x}^{(i)}, \vec{p}^{(i)}, \vec{s}^{(i)} \mid i = 1, \dots, N\}$. Diese Teilchen sollen gleichartig sein (aber nicht identisch). Teilchen bezeichnet man als gleichartig, wenn für alle i, j gilt, daß die Spins gleich sind: $\vec{s}^{2(i)} = \vec{s}^{2(j)}$. Dann führen wir folgendes Tensorprodukt ein. Der Zustandsraum besitze folgende Struktur (Spindimension: $2s + 1$).

$$\mathcal{E} = \mathcal{F}^{(1)} \otimes \mathcal{F}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{F}^{(N)}$$

Nehmen wir an, wir haben einen vollständigen Satz von kommutierenden Observablen $\{q\}$ mit Basisvektoren $|q_\mu\rangle$ und den Eigenwerte q (beispielsweise \vec{x}, s_z).

$$|q_\alpha^{(1)}, q_\beta^{(2)}, \dots, q_\omega^{(N)}\rangle \equiv |q_\alpha\rangle^{(1)} \otimes \dots \otimes |q_\omega\rangle^{(N)}$$

Die Basisvektoren ergeben sich als Tensorprodukt der Einteilchenvektoren. Beschäftigen wir uns nun mit Permutationen. Die einfachste Permutation ist die Transposition, also die Vertauschung zweier benachbarter Elemente:

$$P = (12) \text{ das heißt: } P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & N \\ 2 & 1 & 3 & \dots & N \end{pmatrix}$$

Der unitäre Permutationsoperator ist nun definiert als:

$$P_{(12)} = |q_\alpha^{(1)}, q_\beta^{(2)}, \dots, q_\omega^{(N)}\rangle = |q_\alpha^{(2)}, q_\beta^{(1)}, \dots, q_\omega^{(N)}\rangle$$

Das ist eine Art von Quasi-Rotation. Im allgemeinen gilt:

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ \Pi_1 & \Pi_2 & \dots & \Pi_N \end{pmatrix}, P_l |q_\alpha^{(1)}, \dots, q_\omega^{(N)}\rangle = |q_\alpha^{(\Pi_1)}, \dots, q_\omega^{(\Pi_N)}\rangle$$

Betrachten wir eine Observable $O(\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)})$. Speziell für diese Observable gilt dann:

$$PO(\xi^{(1)}, \dots, \xi^{(N)})P^\dagger = O(\xi^{(\Pi_1)}, \dots, \xi^{(\Pi_N)})$$

Eine beliebige Permutation P ist zusammengesetzt aus M_P Transpositionen $P = ()() \dots ()()$ (M_P -fach). Wir wollen außerdem den Begriff der Parität einführen. Die Parität ist folgendermaßen definiert:

$$(-)^{M_P} \equiv (-)^{\mathcal{P}}$$

Für einen symmetrischen Vektor $|u\rangle$ gilt für beliebiges P , daß $P|u\rangle = |u\rangle$ ist, und für einen antisymmetrischen Vektor $|v\rangle$ gilt $P|v\rangle = (-)^{\mathcal{P}}|v\rangle$. Symmetrische Vektoren ändern sich somit unter Permutationen gar nicht und bei antisymmetrischen nur die Phase.

6.2.1 Projektionsoperator

Folgende Beziehungen können als Übung abgeleitet werden:

$$S \equiv \frac{1}{N!} \sum_p P_p \text{ und } A \equiv \frac{1}{N!} \sum_p (-)^p P_p$$

Lemma:

Sei P_1 ein spezieller Projektionsoperator. Dann gilt $P_1 S = S P_1 = S$ und $P_1 A = A P_1 = (-)^{P_1} A$.

6.3 Identische Teilchen

N Teilchen sind identisch, wenn keine dynamische Eigenschaft des System sich ändert unter beliebigen Permutationen. Zum Zeitpunkt $t = 0$ haben wir einen Zustand $|\psi_0\rangle$ und zum Zeitpunkt t haben wir $U(t, t_0)|\psi_0\rangle$. Lassen wir eine Permutation auf den Zustand wirken, so gilt zum Zeitnullpunkt $P|\psi_0\rangle$ und zum Zeitpunkt t finden wir $U(t, t_0)P|\psi_0\rangle$. Man kann auch zuerst die zeitliche Entwicklung des Systems anwenden und danach die Permutation, also $PU(t, t_0)|\psi_0\rangle$. Es gilt $U(t, t_0)P|\psi_0\rangle = PU(t, t_0)|\psi_0\rangle$, weil es sich um „identische“ Teilchen handelt. Damit kommutieren die beiden Operatoren, also gilt $[P, U] = 0$.

Erinnern wir uns an folgende Differentialgleichung für $U(t, t_0)$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

Deren Lösung ist:

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

Damit finden wir, daß für identische Teilchen P und H vertauschen, also $[P, H] = 0$.

Betrachten wir nun eine Observable A des Systems.

Zustand	$ \psi\rangle$
Messung (ergibt Resultat a)	$A \psi\rangle = a \psi\rangle$ $AP \psi\rangle = aP \psi\rangle$ $PA \psi\rangle = aP \psi\rangle$

Auch hieraus ergibt sich dann, daß P und A vertauschen, daß also $[P, A] = 0$ gilt.

Betrachten wir nochmals die symmetrischen und antisymmetrischen Vektoren:

- 1.) $P|u\rangle = |u\rangle$
- 2.) $P|v\rangle = (-)^p |v\rangle$

Wir wollen zeigen, daß die symmetrischen Vektoren senkrecht zu den antisymmetrischen sind. P ist unitär, es gilt also $P^{-1} = P^\dagger$. Mit $PP = \mathbf{1}$ folgt $P = P^\dagger$, womit P auch hermitesch ist. Aus $P|u\rangle = |u\rangle$ und $P|v\rangle = -|v\rangle$ ergibt sich $\langle u|v\rangle = 0$, womit die Vektoren senkrecht aufeinander stehen.

6.4 Kontinuum von identischen Teilchen

n_1 Teilchen befinden sich im Zustand $|q_1\rangle$ und n_2 Teilchen im Zustand $|q_2\rangle$ für $n_1 + n_2 + \dots = N$. Wir behaupten, daß es im Raum $\mathcal{E} \frac{N!}{n_1!n_2!\dots}$ Basisvektoren gibt. Betrachten wir:

$$|\underbrace{q_1, \dots, q_1}_{n_1}, \underbrace{q_2, \dots, q_2}_{n_2}, \dots\rangle$$

Es gibt $n_1!n_2!\dots$ Permutation, welche den Vektor nicht ändern. Im allgemeinen gibt es $N!$ solche Permutationen. Dadurch wird der Zustand durch die obige Zahl von Basisvektoren genau beschrieben. Als Beispiel betrachten wir $N = 3$, also drei Teilchen, von denen sich zwei Teilchen im Zustand $|q_1\rangle$ und ein Teilchen im Zustand $|q_2\rangle$ befindet, also $n_1 = 2$ und $n_2 = 1$ gilt. Dann gibt es drei Basisvektoren, welche das System beschreiben:

$$\{|q_1, q_1, q_2\rangle, |q_1, q_2, q_1\rangle, |q_2, q_1, q_1\rangle\}$$

6.4.1 Symmetriepostulat

Haben wir ein System mit N identischen Teilchen, dann sind deren Zustände notwendig alle symmetrisch (Bosonen) oder alle antisymmetrisch (Fermionen).

Experimentell/Theoretisch (siehe Quantenfeldtheorie) hat man herausgefunden, daß Elementarteilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ sind Fermionen (antisymmetrische Wellenfunktionen) und Teilchen mit Spin 0, 1, 2 sind Bosonen (symmetrische Wellenfunktion).

6.5 Bosonen und Bose-Einstein-Statistik

N Teilchen befinden sich im Zustandsraum $\mathcal{E}_N^{(S)} \subseteq \mathcal{E}$ in der Q -Darstellung. In jedem Unterraum $\mathcal{E}_{n_1, n_2, n_3, \dots}$ mit $n_1 + n_2 + \dots = N \subseteq \mathcal{E}_N^{(S)}$ suchen wir genau einen symmetrischen und normierten Vektor:

$$\left(\frac{N!}{n_1! n_2! \dots} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot S | \underbrace{q_1, \dots, q_1}_{n_1}, \underbrace{q_2, \dots, q_2}_{n_2}, \dots \rangle$$

Die n_1 ersten Teilchen besetzen den Zustand $|q_1\rangle$ usw. Damit haben wir unseren HILBERT-Raum eingeschränkt.

6.5.1 Bosonengas

Es handelt sich um eine große Anzahl ohne Wechselwirkung in der Q -Darstellung:

$$H = h^{(1)} + h^{(2)} + \dots + h^{(N)}$$

BOLTZMANN besagt nun, daß sich ein System in einem thermodynamischen Gleichgewicht ist, wenn sich dieses in seinem wahrscheinlichsten „makroskopischen“ Zustand befindet. Es gibt sehr viele Mikrozustände, welche einen Makrozustand beschreiben. Die Wahrscheinlichkeit ist proportional zur Anzahl der Mikrozustände, welche natürlich kompatibel mit dem Makrosystem sind. Ein Mikrozustand, bei welchem sich beispielsweise alle Luftmoleküle im Hörsaal auf einer Seite befinden, beschreibt das Makrosystem nicht.

Jede Verteilung $\{n_1, n_2, n_3, \dots | n_1 + n_2 + \dots = N\}$ der N Bosonen auf die verschiedenen Einzelzustände $|q_1\rangle, |q_2\rangle, \dots$ definiert genau einen Mikrozustand.

$$w^{(\text{BOSE-EINSTEIN})} = \sum_{\substack{\text{Verteilungen} \\ n_1, n_2, n_3}} 1$$

$$w^{(\text{BOLTZMANN})} = \sum_{\text{Verteilung}} \left(\frac{N!}{n_1! n_2! \dots} \right)$$

6.6 Fermionen und Fermi-Dirac-Statistik

Es seien N Teilchen im Unterraum $\mathcal{E}_N^{(A)} \subseteq \mathcal{E}$ in der Q -Darstellung gegeben.

$$A |q_1^{n_1}, q_2^{n_2}, \dots\rangle \neq 0$$

Nehmen wir an, daß es einen Besetzungsgrad J_k gibt mit $n_k \geq 2$.

$$J_{i,j} |q_1^{n_1}, q_2^{n_2}, \dots\rangle = |\dots, q_k^{(i)}, \dots, q_k^{(j)}, \dots\rangle = \left(\frac{1 + P_{(ij)}}{2} \right) |\dots, q_k^{(i)}, \dots, q_k^{(j)}, \dots\rangle$$

Lemma:

$$A(1 + P_{ij}) = A + (-)^{P_{(j)}} A = A - A = 0$$

Dies führt zum sogenannten Paulischen Ausschließungsprinzip. Dieses besagt, daß zwei Fermionen nicht denselben Einzelteilchenzustand besetzen können. Wir nehmen nun einen bestimmten Vektor $|q_\alpha^{(1)}, q_\beta^{(2)}, \dots, q_\omega^{(N)}\rangle$ und führen folgende Operation durch:

$$\sqrt{N!}A|q_\alpha^{(1)}, q_\beta^{(2)}, \dots, q_\omega^{(N)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |q_\alpha\rangle^{(1)} & |q_\beta\rangle^{(2)} & \dots \\ |q_\beta\rangle^{(1)} & |q_\beta\rangle^{(2)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}$$

Für $N = 1$ ist die Beziehung trivial. Für $N = 2$ gilt für die linke Seite der Gleichung:

$$|\psi\rangle = \sqrt{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot (|q_\alpha^{(1)}, q_\beta^{(2)}\rangle - |q_\alpha^{(2)} q_\beta^{(1)}\rangle)$$

Für die rechte Seite der Gleichung erhalten wir die SLATER-Determinante:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |q_\alpha\rangle^{(1)} & |q_\alpha\rangle^{(2)} \\ |q_\beta\rangle^{(1)} & |q_\beta\rangle^{(2)} \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|q_\alpha^{(1)}, q_\beta^{(2)}\rangle - |q_\alpha^{(2)} q_\beta^{(1)}\rangle)$$

Damit haben wir die Gleichung für den Fall $N = 2$ gezeigt. Betrachten wir nun die verschiedenen Statistiken:

a.) FERMI-DIRAC-Statistik:

$$w_N^{(FD)} = \sum_{\substack{\text{Verteilung} \\ n_1+n_2+\dots=N \\ n_i \in \{0;1\}}} 1$$

Dieses findet Anwendung bei:

- * Helium-Atom (Ortho- und Parahelium)
- * Stoß zweier identischer Teilchen

b.) BOSE-EINSTEIN-Statistik:

$$w_N^{(BE)} = \sum_{\substack{\text{Verteilung} \\ n_1+n_2+\dots=N \\ n_i \in \{0;1;\dots;N\}}} 1$$

Kapitel 7

Invarianz und Erhaltungsgrößen

7.1 Prolog

Satz 1:

Sind für alle $|u\rangle$ die Matrixelemente der Operatoren A und B gleich, gilt also $\langle u|A|w\rangle = \langle u|B|w\rangle$, so ist $A = B$.

Beweis von Satz 1:

$|u\rangle$ kann geschrieben werden als eine Summe $\sum \lambda_n |n\rangle$. Für beliebiges λ_n erhalten wir:

$$\sum_{m,n} \lambda_m^* \lambda_n \langle m|A|n\rangle = \sum_{k,l} \lambda_k^* \lambda_l \langle k|B|l\rangle$$

Daraus ergibt sich $\langle m|A|n\rangle = \langle m|B|n\rangle$ und damit $\langle m|A - B|n\rangle = 0$, also $A = B$.

Satz 2 (Wigner, 1931):

Besteht zwischen Vektoren $|u_i\rangle \in \mathcal{E}$ ein Zusammenhang \mathcal{T} mit $|u'_i\rangle \in \mathcal{E}$ derart, daß $|\langle u_i|u_j\rangle| = |\langle u'_i|u'_j\rangle|$ ist, daß also alle Vektoren bis auf eine Phase gleich sind, gilt $|u'_i\rangle = T|u_i\rangle$, wobei T ein (anti)linearer unitärer Operator ist.

7.2 Antilineare Operatoren

Angenommen, wir haben einen Vektor $|v\rangle = A|u\rangle$ (und einen antilinearen Operator A), dann gelten folgende Eigenschaften:

1.) $A(\lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle) = \lambda_1^* A|1\rangle + \lambda_2^* A|2\rangle$

2.) $(\mu_1\langle 1| + \mu_2\langle 2|)A = \mu_1^* \langle 1|A + \mu_2^* \langle 2|A$

3.) Skalarprodukt:

$$(\langle \chi|A|u\rangle = [\langle \chi|(A|u\rangle)]^*$$

Für einen linearen Operator L selbst gilt:

$$(\langle \chi|L|u\rangle = \langle \chi|(L|u\rangle)$$

4.) Adjungierter Operator A^\dagger :

$$\langle \chi|(A^\dagger|u\rangle) = \langle u|(A|\chi\rangle)$$

Für einen linearen Operator gilt hier:

$$\langle \chi|L^\dagger|u\rangle = \langle u|L|\chi\rangle^*$$

5.) „Antiunitärer“ Operator: $AA^\dagger = A^\dagger A = \mathbf{1}$

6.) Unitärer Operator: $L^\dagger L = LL^\dagger = \mathbf{1}$

7.3 Gruppe

Eine Menge $\{a, b, c\}$ bildet eine Gruppe G , wenn gilt:

- 1.) Für alle a, b ist $a, b \in G$
- 2.) $(ab)c = a(bc)$
- 3.) Es existiert ein I für alle a , so daß $Ia = aI = a$ gilt. Man nennt I neutrales Element.
- 4.) Es existiert ein a^{-1} für alle a , so daß $aa^{-1} = a^{-1}a = I$ ist. a^{-1} ist das inverse Element.

7.4 Transformationsgruppen

Sei T_k eine solche Transformation: $|u'\rangle = T_k|u\rangle$ mit $Q' = T_kQT_k^\dagger$, dann besagt WIGNER, daß T_k (anti)unitär ist. Bilden die Transformationen $\{T_k|k = 1, 2, 3, \dots\}$ eine Gruppe \mathcal{G} ($T_kT_l = T_m$), dann bilden die Transformations-Operatoren $\{T_k\}$ eine sogenannte projektive Repräsentation von dieser Transformationsgruppe. Dies bedeutet, daß $T_kT_l = \exp(i\eta_{k,l}^m)T_m$ mit $\eta_{k,l}^m \in \mathbb{R}$ gilt. Manchmal ist es möglich, die Phasen von T_k so zu wählen, daß $\eta = 0$ ist. Dann bilden die Operatoren T_k eine Gruppe G , die isomorph zur Gruppe \mathcal{G} ist, also $G = \mathcal{G}$.

Betrachten wir nun eine kontinuierliche Gruppe mit Elementen $T_{\alpha_1} \equiv T(\alpha_n)$ mit $\alpha_n \in \mathbb{R}^n$. Nehmen wir beispielsweise $n = 1$ an: $\alpha_1 \equiv \alpha \in D \subset \mathbb{R}$. Im Ursprung gelte $T(\alpha = 0) = I$.

Zu jeder infinitesimalen Transformation gehört ein unitärer Operator, welcher sich infinitesimal vom Einsoperator unterscheidet, daß also $T(\delta\alpha) = \mathbf{1} - i\Theta\delta\alpha$. $\mathbf{1}$ ist hierbei ein unitärer und Θ ein hermitescher Operator.

$$\xi \xrightarrow{T(\delta\alpha)} \xi + \delta\xi \Rightarrow \xi + \delta\xi = T(\delta\alpha)\xi T(\delta\alpha)^\dagger = \xi - i\delta\alpha [\Theta, \xi]$$

Damit folgt für den Kommutator:

$$[\Theta, \xi] = \frac{i\delta\xi}{\delta\alpha}$$

Man spricht im Zusammenhang von $[\Theta, \xi]$ auch von einem Generator.

Beispiel: Translationsuntergruppe eines Teilchens

Betrachten wir die Transformation $T_x(a)$:

$$x \mapsto x - a, y \mapsto y, z \mapsto z$$

$$\bar{p} = \bar{p}, \bar{s} \mapsto \bar{s}$$

Es muß also gelten:

$$T_x(a)xT_x(a)^\dagger = x - a$$

$$T_x(a)yT_x(a)^\dagger = y$$

$$T_x(a)zT_x(a)^\dagger = z$$

$$T_x(a)pT_x(a)^\dagger = p$$

$$T_x(a)sT_x(a)^\dagger = s$$

Betrachten wir also $T_x(\delta\alpha)$ mit $\delta x = -\delta\alpha$. Dann gilt:

$$[\Theta_x, x] = i\frac{\delta x}{\delta\alpha} = -i$$

$$[\Theta_x, y] = 0, [\Theta_x, z] = 0, [\Theta_x, \bar{p}] = 0, [\Theta_x, \bar{s}] = 0$$

$$\Theta_x = \frac{p_x}{\hbar} \text{ mit } [x, p_x] = i\hbar$$

$$\hat{T}_x(\delta\alpha) = \hat{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x \delta\alpha$$

$$\hat{T}_x(a) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{p}_x a\right]$$

Für die Translationsuntergruppe finden wir:

$$T(\vec{a}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{P} \vec{a}\right]$$

\hat{P} ist der Gesamtimpuls des Systems.

Bemerkung:

Führen wir zwei solche Translationen hintereinander aus:

$$T(\vec{a})T(\vec{b}) = T(\vec{b})T(\vec{a}) = T(\vec{a} + \vec{b})$$

Wir finden, daß diese Translationsgruppe G_{trans} im HILBERT-Raum ist isomorph zur Translationsgruppe \mathcal{G}_{trans} im euklidischen Raum.

Beispiel: Gruppe der Punktspiegelungen

Es handelt sich um den Operatoren $\{\mathbf{1}, S_0\}$ mit $S_0^2 = \mathbf{1}$. Dann müssen folgende Transformationen gelten:

$$P\vec{r}P^\dagger = -\vec{r}$$

$$P\vec{p}P^\dagger = -\vec{p}$$

$$P\vec{s}P^\dagger = \vec{s}$$

Der Operator P hat die Eigenschaft, daß $P^2 = \mathbf{1}$ ist. Die P -Eigenwerte sind unimodular, $|\eta| = 1$.

7.5 Erhaltungssätze und Zeittranslation

Wir betrachten die Gruppe der Translationen $\mathcal{G} \ni T_i \leftrightarrow G \ni T_i$.

$$O' \equiv T_i O T_i^\dagger = O$$

Es liegt hier Invarianz einer Observablen O vor. Dies bedeutet für alle $T_i \in G$, daß $[T_i, O] = 0$ ist. Eine irreduzible Darstellung besitzt Basisvektoren $|\tau, j, \mu\rangle$, wo μ zur Unterscheidung der Basisvektoren innerhalb einer Darstellung gilt. j kennzeichnet, um welche Darstellung es sich handelt und τ sind zusätzliche Quantenzahlen. Man kann nun ableiten, daß für die Matrixelemente gilt: $\langle \tau, j, \mu | O | \tau', j', \mu' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} O_{\tau\tau'}^{(j)}$. Damit sind alle Matrixelemente gleich 0 bis auf die Diagonalelemente (vergleiche WIGNER-ECKART-Theorem für skalare Operatoren). Ebenso ist der HAMILTON-Operator symmetrisch; es gilt also für alle T_i , daß $[T_i, H] = 0$.

Betrachten wir die HEISENBERG-Gleichung für die Observable A mit $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$:

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = [A, H]$$

Jede Observable, die Funktion der Operatoren der Symmetriegruppe ist, ist eine Konstante der Bewegung.

Logik: Symmetrie \Rightarrow Erhaltungssatz

Wenn Symmetrien also vorausgesetzt sind, finden wir Erhaltungssätze. Diese sind sehr wichtig für das Verständnis der Natur. Betrachten wir dazu folgende Beispiele:

1.) Drehinvarianz:

Hier vertauscht der HAMILTON-Operator mit dem Generator \vec{J} der Drehungen, also dem Drehimpuls. Es gilt also $[H, \vec{J}] = 0$ und damit ist $\vec{J} = \text{const.}$ im HEISENBERG-Bild.

2a.) Translationsinvarianz:

In diesem Falle vertauscht H mit dem Generator \vec{P} , womit der Gesamtimpuls erhalten ist: $\frac{d\vec{P}}{dt} = 0$.

2b.) Zeittranslationsinvarianz:

Der Generator für Zeittranslationen ist gerade der HAMILTON-Operator und der vertauscht mit sich selbst, so daß gilt $[H, H] = 0$. Daraus folgt Energieerhaltung.

3.) Spiegelungsinvarianz:

Hier kommutiert H mit P und daraus ergibt sich Paritätserhaltung.

$$P|\psi\rangle_t = P|\psi\rangle_0$$

4.) Phaseninvarianz:

Wir nennen den entsprechenden Generator Q und dann gilt $[H, Q] = 0$, womit Q also konstant ist. Diese Invarianz hat etwas mit Ladungserhaltung (Weyl) zu tun.

Später werden wie die Punkte 2a.) und 2b.) in der speziellen Relativitätstheorie zusammenfassen, wenn wir Vierer-Vektoren $(\frac{H}{c}, \vec{p})$ einführen.

Auch der SCHRÖDINGER-Entwicklungsoperator U kann invariant sein. (Dieser besitzt nämlich eine Integraldarstellung mit H und vertauscht deswegen auch mit H .) Für alle T_i muß daher $[T_i, U(t, t_0)] = 0$ gelten. Die Bewegungsgleichungen sind dann invariant, es sind also folgende Erwartungswerte für alle T_k gleich:

$$\left| \langle \chi | \underbrace{T_k^\dagger U(t, t_0) T_k}_{U'(t, t_0)} | \varphi \rangle \right|^2 = |\langle \chi | U | \varphi \rangle|^2$$

Damit gilt nach Satz 1:

$$T_k^\dagger U(t, t_0) T_k = \exp(i\alpha_k) U(t, t_0)$$

Meistens ist $\alpha_k = 0$ und damit vertauschen die T_k und H : $[T_k, H] = 0$.

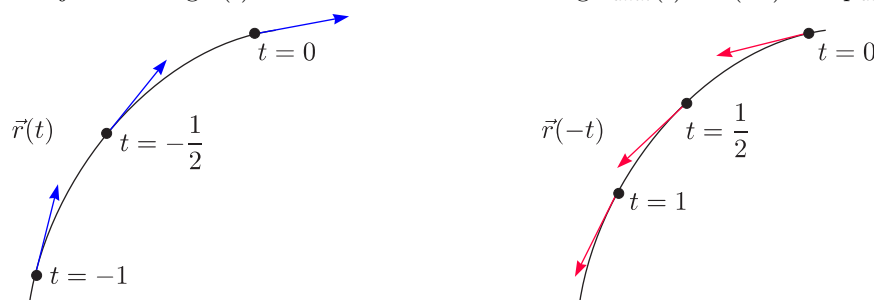
7.6 Zeitumkehr

a.) Klassisch:

Betrachten wir als erstes das Problem klassisch. Wir schauen uns ein Teilchen in einem statischen Potential an. Dann gilt für die HAMILTON-Funktion:

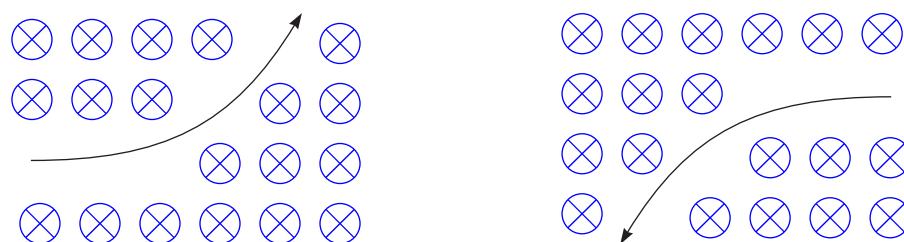
$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = H(-\vec{p}, \vec{r})$$

Für jede Lösung $\vec{r}(t)$ kann ich eine andere Lösung $\vec{r}_{umk}(t) \equiv \vec{r}(-t)$ und $\vec{p}_{umk} = -\vec{p}_{umk}$ finden.



Man durchläuft die Bahn also mit entgegengesetzter Geschwindigkeit. Mathematisch kann man zwar t durch $-t$ ersetzen, aber physikalisch läuft die Zeit immer weiter. Hier ist jedoch Vorsicht geboten. Für ein klassisches System mit Magnetfeld gilt:

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}) \neq H(-\vec{p}, \vec{r})$$



b.) Quantenmechanisch:

Kommen wir nun zur Quantenmechanik. Hier gilt die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

Ersetzt man nun t durch $-t$, so erhalten wir auf den linken Seite aufgrund der zeitlichen Ableitung ein Minuszeichen. Wir führen also eine „Zeitumkehr“ und eine komplexe Konjugation durch:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, -t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi^*(\vec{r}, t)$$

Wir definieren also:

$$\psi_{umk}(\vec{r}, t) \equiv \psi^*(\vec{r}, -t)$$

Sei ψ eine Lösung, so ist ψ_{umk} auch eine Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung. Da dies für ein Problem mit einem Magnetfeld klassisch schon nicht geklappt hat, wird dies auch quantenmechanisch fehlschlagen.

7.7 Zeitumkehroperator

Betrachten wir zuerst ein Teilchen ohne Spin. Wir wollen den betreffenden Operator als K bezeichnen mit den Eigenschaften $K\vec{r}K^\dagger = \vec{r}$ und $K\vec{p}K^\dagger = -\vec{p}$. Beispielsweise vertauschen x und p_x nicht: $[x, p_x] = i\hbar$. Durch Anwendung des Operators K folgt $K[x, p_x]K^\dagger = Ki\hbar K^\dagger$. Andererseits muß gelten $K[x, -p_x]K^\dagger = -K[x, p_x]K^\dagger = -Ki\hbar K^\dagger$. K muß somit $i\hbar$ in $-i\hbar$ überführen. K muß damit „antiunitär“ sein:

$$Ki\hbar K^\dagger = (-i\hbar)KK^\dagger = -i\hbar$$

$$K(\vec{r} \times \vec{p})K^\dagger = -(\vec{r} \times \vec{p}) \Rightarrow K\vec{J}K^\dagger = -\vec{J}$$

K ändert sowohl den Impulsoperator als auch Drehimpulsoperatoren. In der Wellenmechanik bezeichnen wir den Komplexkonjugations-Operator mit K_0 ; es gilt also durch Anwendung von K_0 auf einen Zustand $\phi(\vec{r})$: $K_0\phi(\vec{r}) = \phi^*(\vec{r})$ und außerdem $[K_0, H] = 0$.

$$K_0 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = K_0 H |\psi(t)\rangle$$

Aufgrund der Vertauschungsrelation von K_0 mit H ergibt sich:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K_0 |\psi(t)\rangle = H K_0 |\psi(t)\rangle$$

Schreiben wir nun $t = -t'$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} K_0 |\psi(-t')\rangle = H K_0 |\psi(-t')\rangle$$

Lassen wir nun einfach den Strich weg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K_0 |\psi(-t)\rangle = H K_0 |\psi(-t)\rangle \Leftrightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [K_0 |\psi(-t)\rangle] = H [K_0 |\psi(-t)\rangle]}$$

Wir haben damit eine neue Lösung der Gleichung gefunden, nämlich $|\psi(t)\rangle_{umk} \equiv K_0 |\psi(-t)\rangle$. Betrachten wir nun ein Teilchen mit Spin: Hier gilt dann $K\vec{J} = -\vec{J}K$ und außerdem liegt Antiunitarität vor. Schauen wir, was mit dem Drehoperator R nach einer Zeitumkehr passiert:

$$K \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \hat{u} \varphi \right] K^\dagger = \exp \left[+\frac{i}{\hbar} K \vec{J} \hat{u} K^\dagger \varphi \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \hat{u} \varphi \right]$$

Damit gilt also $KR = RK$ und somit $[K, R] = 0$; die Operatoren R und K vertauschen also. Angenommen, wir haben nun ein Teilchen mit dem Spin s in der $\{\vec{r}, S_z\}$ -Darstellung:

$$K_0 \vec{r} K_0^\dagger = \vec{r}, K_0 \vec{p} K_0^\dagger = -\vec{p}$$

Außerdem gilt:

$$K_0 \begin{Bmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{Bmatrix} K_0^\dagger = \begin{Bmatrix} S_x \\ -S_y \\ S_z \end{Bmatrix}$$

Für $S = \frac{1}{2}$ gilt:

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma} = \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}$$

Da die zweite Paulimatrix imaginär ist, entsteht das Minuszeichen! Dies gilt auch in der Standarddarstellung:

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \quad \text{und} \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$$

Wir wollen aber, daß dies für alle Operatoren s_x , s_y und s_z gilt. Machen wir deshalb den Ansatz $K = RK_0$, wobei R unitär und K antiunitär ist. R muß folgende Eigenschaften haben:

$$R \begin{Bmatrix} \vec{r} \\ \vec{p} \end{Bmatrix} R = \begin{Bmatrix} \vec{r} \\ \vec{p} \end{Bmatrix} \quad \text{und} \quad R \begin{Bmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{Bmatrix} R^\dagger = \begin{Bmatrix} -S_x \\ S_y \\ -S_z \end{Bmatrix}$$

Diese Eigenschaften sind gerade dann erfüllt, wenn R eine Drehung um die y -Achse beschreibt:

$$R = R_y^{(\text{Spin})}(\pi) \equiv \exp \left[-i\pi \frac{S_y}{\hbar} \right]$$

Für N Teilchen mit Gesamtspin S gilt:

$$K = \exp \left[-i\pi \frac{S_y}{\hbar} \right] K_0$$

Wir schreiben nun $N = N_{\text{halb}} + N_{\text{ganz}}$. Wenden wir den Zeitumkehroperator K zweimal an, so folgt $K^2 = (-1)^{N_{\text{halb}}}$.

$$K^2 = \exp \left[-\frac{i\pi S_y}{\hbar} \right] K_0 \exp \left[-\frac{i\pi S_y}{\hbar} \right] K_0 = \exp \left[-\frac{2\pi i S_y}{\hbar} \right] K_0^2 = \exp \left[-\frac{2\pi i S_y}{\hbar} \right] \cdot \mathbf{1}$$

Für solche Drehungen um 2π gilt (wie wir zuvor gesehen haben):

$$\exp \left[-\frac{2\pi i S_y}{\hbar} \right] = (1)^{N_{\text{ganz}}} (-1)^{N_{\text{halb}}}$$

Eine Folgerung daraus ist die sogenannte KRAMERS-Entartung. Sei der nun HAMILTON-Operator „reell“, also gilt $KHK^\dagger = H$ (1). Nehmen wir an, daß wir einen Eigenvektor $|u\rangle$ haben mit $H|u\rangle = E|u\rangle$ (2). Des weiteren ist H hermitesch, womit E reell ist (3). Dann ist die Behauptung, daß auch $K|u\rangle$ Eigenvektor von H ist. Wir wollen dies beweisen. Dazu wenden wir H auf $K|u\rangle$ an:

$$H(K|u\rangle) = KH|u\rangle \stackrel{\textcircled{1}}{=} KH|u\rangle \stackrel{\textcircled{2}}{=} KE|u\rangle \stackrel{\textcircled{3}}{=} E(K|u\rangle)$$

7.7.1 Kramers-Entartung

Haben wir eine ungerade Anzahl von 1/2-Spins, dann gibt es eine orthonormierte Basis mit Paaren von komplex konjugierten Vektoren. Dann liegt eine $2n$ -fache Entartung vor (KRAMERS-Entartung, 1930).

Beweis:

Betrachten wir zuerst den Fall $K^2 = 1$. Dann ist die Behauptung, daß $|u\rangle$ und $K|u\rangle$ proportional sind. Wir wenden K auf $|u\rangle$ an:

$$K|u\rangle = \exp(i\alpha) K|u\rangle \Rightarrow K|u\rangle = \exp(-i\alpha) K^2|u\rangle = \exp(-i\alpha)|u\rangle$$

Daraus ergibt sich dann $\exp(i\alpha)K|u\rangle = |u\rangle$. Für $K^2 = -1$ behaupten wir, daß $|u\rangle$ und $K|u\rangle$ unabhängig sind. Dies zeigen wir analog:

$$K|u\rangle = \exp(i\alpha)K|u\rangle \Rightarrow K|u\rangle = \exp(-i\alpha)(-1)|u\rangle \Rightarrow |u\rangle = -\exp(i\alpha)K|u\rangle$$

Dies ist nur erfüllt für $|u\rangle = 0$, womit also $|u\rangle = \exp(i\alpha)K|u\rangle$ falsch sein muß!

Kapitel 8

Relativistische Quantenmechanik

- * SCHRÖDINGER-Gleichung

Diese ist galilei-invariant.

$$\vec{x}' = \vec{x} - \vec{t}, t' = t$$

Sie ist aber nicht lorentz-invariant.

- * Bei der nichtrelativistischen Theorie ist die Teilchenzahl erhalten. Die relativistische Theorie führt zur Erzeugung und Vernichtung von Teilchen. (siehe relativistische Quantenfeldtheorie)
- * Wir haben ein relativistisches Teilchen mit dem Spin 0 oder $\frac{1}{2}$.

- a.) KLEIN-GORDON-Gleichung
- b.) DIRAC-Gleichung

8.1 Definition

Wir wählen die Einheiten $\hbar = 1$ und $c = 1$. Die elektrischen Ladungen sind dann dimensionslose Größen:

$$e^2 \left(\equiv \frac{e^2}{\hbar c} \right)$$

Damit ist die Feinstrukturkonstante $\alpha \equiv ce^2 \approx \frac{1}{137}$. Pauli hat diese Konstante nie verstanden; er ist schließlich in einem Krankenhaus auf Zimmer 137 gestorben.

$$\alpha \approx \frac{1}{137,035989}$$

Dies gilt für einen Impulsübertrag von $p^2 = mc^2$. Wir benutzen außerdem die Gaußschen Einheiten (cgs-System) (siehe Jackson). Die Koordinaten eines Raum-Zeit-Punktes werden wir schreiben als (x^0, x^1, x^2, x^3) , also $x^\mu \equiv (x^0, x^m) = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x^1, x^2, x^3)$. Betrachten wir nun den Minkowski-Tensor. Dabei handelt es sich um einen pseudo-euklidischen Tensor:

$$\eta_{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Wir unterscheiden außerdem zwischen:

- * Kovariante Vektoren V_μ
Ein Beispiel hierfür ist $\frac{\partial \varphi}{\partial x^\nu}$.
- * Kovarianter Vektor: K^μ
Ein Beispiel ist dx^μ .

Mittels des Minkowski-Tensors können kontravariante und kovariante Vektoren ineinander umgewandelt werden:

$$A_\mu \equiv \eta_{\mu\nu} A^\nu$$

Wenn ein Index oben und unten gleich ist, wird über diese Indizes nach der EINSTEINSchen Summenkonvention summiert. Es gilt also:

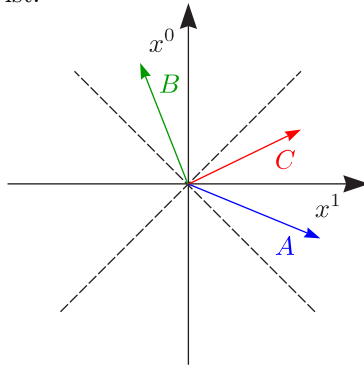
$$A_\mu \equiv \sum_{\nu=0}^3 \eta_{\mu\nu} A^\nu$$

Mit diesen Vektoren läßt sich nun ein Skalarprodukt zweier Vierervektoren A^μ und B^μ bilden:

$$A \cdot B \equiv A_\mu B^\mu = A^\mu \eta_{\mu\nu} B^\nu = A_\nu B^\nu = A^0 B^0 - A^1 B^1 - A^2 B^2 - A^3 B^3$$

Klassifizierung:

A^μ ist raumartig, wenn $A_\mu A^\mu < 0$ und ist zeitartig, wenn $B_\mu B^\mu > 0$. C^μ ist der Nullvektor, wenn $C_\mu C^\mu = 0$ ist.



8.1.1 Differentialoperator

* Gradientenoperator:

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \vec{\nabla} \right)$$

* d'Alembert-Operator:

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2$$

8.1.2 Elektromagnetisches Feld

Das elektromagnetische Potential wird mit einem Vierer-Vektor $A^\mu: A^\mu(x^0, \vec{x})$ bezeichnet.

$$A^\mu(x^0, \vec{x}) \equiv \left(\varphi(x^0, \vec{x}), \vec{A}(x^0, \vec{x}) \right)$$

Es handelt sich um ein Vierer-Vektor-Feld. Damit können wir den elektromagnetischen Feld-Tensor definieren:

$$F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x)$$

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -B_z & +B_y \\ -E_y & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

Aus der Elektrodynamik kennen wir außerdem folgenden Beziehungen:

$$\vec{E} = \vec{\nabla}\varphi - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A} \text{ und } \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Der Differentialoperator muß eich-kovariant sein:

$$D_\mu \equiv D_\mu + ieA_\mu$$

Eichinvarianz bedeutet für beliebige Funktion $g(x) \in \mathbb{R}$:

$$\psi'(x) = \exp(ieg(x))\psi(x)$$

Dies klappt nur, wenn $A'_\mu(x)$ einen Verschiebungsterm enthält: $A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu g(x)$ ist. Wenn sich das Potential mit einer Ableitung ändert, gilt $F'_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}$.

$$D'_\mu \psi'(x) = \exp(ieg(x))D_\mu \psi$$

$F'_\mu = F_{\mu\nu}$ ist also eichinvariant und $D'_\mu \psi'(x) = \exp(i\vec{g}(x))D_\mu \psi$ ist eichkovariant.

8.2 Lorentz-Gruppe

Wir führen eine Wechsel des Bezugssystems durch eine Lorentz-Transformation (reell z , linear):

$$x'^\mu = \Omega^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu$$

$$ds^2 \equiv \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = \eta_{\mu\nu} dx'^\mu dx'^\nu$$

Die Poincaré-Gruppe haben die Parameter $\{\Omega^\mu{}_\nu, a^\mu\}$. Es ist einfach zu Hause abzuleiten, daß folgendes gilt:

- 1.) $\Omega_{\mu\nu}^* = \Omega_{\mu\nu}$
- 2.) $\Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\lambda} = \delta_\nu^\lambda$ (Kronecker-Symbol)
- 3.) $\det(\Omega^\mu{}_\nu) = \pm 1$

Für $a^\mu = 0$ und $\Omega_0^0 > 0$ ist dies eine orthochrone Lorentz-Gruppe. Wir schreiben eine Matrix für die infinitesimale Lorentz-Transformation:

$$\Omega_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + \omega_{\mu\nu}$$

$\omega_{\mu\nu}$ ist hierbei infinitesimal. Es gilt $\omega_{\mu\nu} = \omega_{\mu\nu}^* = -\omega_{\nu\mu}$. Dies ist also reell und antisymmetrisch. Es gibt damit sechs infinitesimale Transformationen, nämlich Drehungen in x^2x^2 -Ebene, x^2x^3 -Ebene und x^3x^1 -Ebene. Außerdem haben wir die Boosts in den x^0x^1 -, x^0x^2 -, x^0x^3 -Ebenen. Ein Boost ist eine Pseudo-Drehung. Des weiteren gibt es zwei diskrete Transformationen.

- * Räumliche Spiegelung $S: x^0 \mapsto x^0, x^m \mapsto -x^m$
- * „Zeitliche Spiegelung“ $T: x^0 \mapsto -x^0, x^m \mapsto x^m$

Diese sind nicht Teil der orthochronen Transformationen.

8.3 Klassische relativistische Dynamik

Wir betrachten ein Teilchen mit der Ruhemasse m , der Ladung e in einem elektromagnetischen Potential $A^\mu = (\varphi, \vec{A})$. Mit der Geschwindigkeit $\vec{v} \equiv \frac{d\vec{r}}{dt}$ kann man einen Vierer-Vektor der mechanischen Bewegungsgröße definieren. (Hierbei handelt es sich nicht um den Impuls).

$$\Pi^\mu \equiv (M, M\vec{v}) \text{ mit } M = \frac{m}{\sqrt{1-v^2}}$$

$$\Pi \cdot \Pi = M^2 - M^2|\vec{v}|^2 = m^2$$

Führen wir außerdem die Eigenzeit τ eines Teilchens ein:

$$d\tau = \sqrt{dx^\mu dx_\mu} = \sqrt{1-v^2} dt$$

Damit können wir die Vierergeschwindigkeit schreiben als:

$$u^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{d\tau} = \left(\frac{dt}{d\tau}, \vec{v} \frac{dt}{d\tau} \right) \text{ mit } u_\mu u^\mu = 1$$

u_μ ist damit ein zeitartiger Vierervektor, da seine Norm positiv ist. Damit gilt nun $\Pi^\mu = mu^\mu$. Somit ist p^μ ebenfalls ein Vierervektor und man kann sehr einfach die Bewegungsgleichungen aufschreiben:

$$\frac{d\Pi^\mu}{d\tau} = eF^{\mu\nu}u_\nu$$

$$\frac{d\Pi^m}{dt} = eF^{\mu\nu}u_\nu \frac{d\tau}{dt} = e \left[E^m + (\vec{v} \times \vec{B})^m \right]$$

Wir haben also hier sowohl Lorentz- als auch COULOMBkraft.

8.4 Klassische relativistische Mechanik

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m und Ladung e im elektromagnetischen Potential $A^\mu = (\varphi, \vec{A})$. Wir setzen der Einfachheit halber $\hbar = c = 1$. Die Teilchenbahn werde durch $\vec{x}(t)$ beschrieben. Außerdem führen wir den Vierervektor $(x^\mu) = (t, \vec{x}(t))$. Dann ergibt sich für die Eigenzeit (Bogenlänge):

$$\tau = \int_0^t \sqrt{\dot{x}_\Gamma(t')\dot{x}^\Gamma(t')} dt'$$

$$\frac{d\tau}{dt} = \sqrt{\dot{x}_\mu\dot{x}^\mu}$$

Dann ergibt sich durch Ableiten nach t :

$$\dot{x}^\mu = \frac{d}{dt}x^\mu = (1, \vec{v}(t))$$

$$d\tau = \sqrt{1 - \vec{v}^2} dt$$

Dann ergibt sich die Vierer-Geschwindigkeit durch Ableiten von x^μ nach der Zeit t :

$$u^\mu = \frac{dx^\mu(t)}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - \vec{v}^2}} \frac{dx^\mu}{dt}$$

$$(u^\mu) = \frac{1}{\sqrt{1 - \vec{v}^2}} (1, \vec{v})$$

Der „kinematische Impuls“ bezeichnet man auch als „Vierervektor der Bewegungsgröße“:

$$\Pi^\mu := mu^\mu = (M, M\vec{v}) \text{ mit der relativistischen Masse } M = \frac{m}{\sqrt{1 - \vec{v}^2}}$$

8.5 Bewegungsgleichung im elektromagnetischen Feld

$$\frac{d\Pi^\mu}{d\tau} = eF^{\mu\nu}u_\nu$$

Der räumliche Anteil ist:

$$\frac{d\Pi^k}{dt} = \frac{d\Pi^k}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} = \sqrt{1 - \vec{v}^2} \frac{d\Pi^k}{d\tau} = eF^{k\nu}u_\nu \sqrt{1 - \vec{v}^2} = eF^{k0} \cdot 1 + eF^{kl}(-v^l) = eE^k + e\varepsilon^{klm}B^m v^l = (\vec{v} \times \vec{B})^k$$

Dies gilt mit $F^{kl} = \varepsilon^{klm}B^m$.

$$\boxed{\frac{d\vec{\Pi}}{dt} = e \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right)}$$

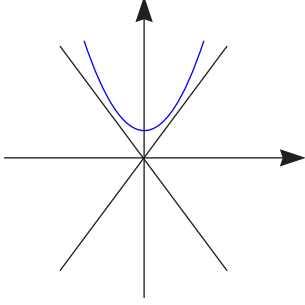
Den Energie-Impulsvektor (kanonischer Impuls) können wir nun schreiben als:

$$p^\mu := \Pi^\mu + eA^\mu$$

Die Energie ist dann gegeben durch $E = p^0 = \Pi^0 + eA^0 = M + e\varphi$ und der kanonische Impuls lautet $\vec{p} = \vec{\Pi} + e\vec{A}$. Wir berechnen nun $\Pi_\mu\Pi^\mu$ ($\Pi_\mu = mu_\mu$):

$$\Pi_\mu\Pi^\mu = m^2 u_\mu u^\mu = m^2 \frac{1}{1 - \vec{v}^2} (1 - \vec{v}^2) = m^2$$

Man spricht auch davon, daß Π^μ „auf der Massenschale liegt“.



Mit $\Pi^\mu = p^\mu - eA^\mu$ ergibt sich:

$$(p_\mu - eA_\mu)(p^\mu - eA^\mu) = m^2$$

$$(E - e\varphi)^2 - (\vec{p} - e\vec{A})^2 = m^2$$

Daraus ergibt sich dann:

$$E = \sqrt{m^2 + (\vec{p} - e\vec{A})^2} + e\varphi$$

Die HAMILTON-Funktion lautet:

$$H = e\varphi + \sqrt{m^2 + (\vec{p} - e\vec{A})^2}$$

8.6 Klein-Gordon-Gleichung

Hierbei handelt es sich um die relativistische Wellengleichung für ein Teilchen ohne Spin mit Masse m und Ladung e im elektromagnetischen Potential A . Die SCHRÖDINGER-Gleichung „folgt“ aus der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \text{ mit der Korrespondenzregel } E \mapsto i\frac{\partial}{\partial t} \text{ und } \vec{p} \mapsto -i\vec{\nabla}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(-\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + V\right)\psi$$

Relativistisch müssen wir die Transformation durchführen:

$$(E, \vec{p}) \mapsto i\partial^\mu = \left(i\frac{\partial}{\partial t}, -i\vec{\nabla}\right)$$

Die Wurzel ist leider problematisch. Wir verwenden deshalb die quadrierte Gleichung:

$$(E - e\varphi)^2 = m^2 + (\vec{p} - e\vec{A})^2$$

Daraus ergibt sich dann die KLEIN-GORDON-Gleichung:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2 \phi(x) = \left[(-i\vec{\nabla} - e\vec{A})^2 + m^2\right] \phi(x)$$

$\phi(x) = \phi(t, \vec{x})$ ist im allgemeinen komplex.

$$[(i\partial_\mu - eA_\mu)(i\partial^\mu - eA^\mu) - m^2] \phi(x) = 0$$

Mit der (eich-)kovarianten Ableitung $D_\mu := \partial_\mu + ieA_\mu$ können wir die KLEIN-GORDON-Gleichung außerdem schreiben als:

$$[D_\mu D^\mu + m^2] \phi = 0$$

Falls $A_\mu = 0$ ist, gilt:

$$(\square + m^2) \phi(x) = 0$$

8.7 Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

P beschreibt hierbei die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und j die Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Eine solche Gleichung gilt beispielsweise auch für die SCHRÖDINGER-Gleichung. Da schöne daran ist, daß wir diese in kovarianter Form schreiben können:

$$\partial_\mu \partial^\mu = 0 \text{ mit } j^\mu = (P, \vec{j})$$

Wir betrachten nun den Fall $A_\mu = 0$:

$$j^\mu = \frac{i}{2m} [\phi^* (\partial^\mu \phi) - (\partial^\mu \phi^{star}) \phi]$$

Als Übung kann gezeigt werden, daß $\partial_\mu j^\mu = 0$ gilt. Bei der SCHRÖDINGER-Gleichung gilt $P = |\psi|^2$ und außerdem:

$$\vec{j} = \frac{1}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*]$$

$$P = \frac{i}{2m} \left[\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right]$$

Zwei Überraschungen:

- 1.) P ist nicht positiv definit, kann also nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden.
- 2.) Betrachte ebene Wellen:

$$\phi(x) = \exp(-iEt + i\vec{k} \cdot \vec{x})$$

Durch Einsetzen dieses Ansatzes in die Wellengleichung erhalten wir:

$$(\square + m^2) \phi = (-E^2 + \vec{k}^2 + m^2) \phi = 0$$

Daraus ergibt sich dann $E^2 = \vec{k}^2 + m^2$ und somit:

$$E = \pm \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$$

Es gibt somit Lösungen mit negativer Energie. Dies gibt es jedoch auch beim Wasserstoffatom. Das Problem ist jedoch, daß die Energie nicht nach unten beschränkt ist.

Erklärung:

- 1.) Änderung der Interpretation von j^μ : P ist keine Wahrscheinlichkeitsdichte. $e j^\mu$ wird infolgedessen als elektrische Stromdichte interpretiert. eP ist hierbei die elektrische Ladungsdichte (nach Pauli, Weißkopf (1934)).
- 2.) Da sowohl positive als auch negative Ladung vorkommt, beschränkt sich die Theorie nicht nur auf ein einziges Teilchen. Die Teilchenzahl ist nicht erhalten und wir interpretieren die unerwünschte Lösung mit $E < 0$ als Antimaterie. Das Antiteilchen besitzt die entgegengesetzte Ladung.

Quantenfeldtheorie:

Wir machen einen Übergang vom Feld $\phi(x)$ zum Operator $\hat{\phi}(x)$ im Fockraum: Wir zerlegen in ebene Wellen, wobei sich das Teilchen in einem Kasten mit diskreten \vec{k} -Werten befinden soll:

$$\hat{\phi}(x) = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{1}{2V w_{\vec{k}}} \right)^{\frac{1}{2}} \left[a(\vec{k}) \exp(-ik_\mu x^\mu) + b^\dagger(\vec{k}) \exp(+ik_\mu x^\mu) \right] \text{ mit } k^0 \equiv w_{\vec{k}} := \sqrt{m^2 + \vec{k}^2}$$

V ist hierbei das Volumen eines Würfels mit periodischen Randbedingungen.

$$[a(\vec{k}), a^\dagger(\vec{k}')] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$

$$[b(\vec{k}), b^\dagger(\vec{k}')] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$

$$[a, a] = [a, b] = [a^\dagger, b] = \dots = 0$$

$$[\hat{\phi}(\vec{x}, t), \hat{a}^\dagger(\vec{y}, t)] = i\hbar\delta(\vec{x} - \vec{y})$$

a^\dagger genügt Teilchen und b^\dagger genügt Antiteilchen. Da Vakuum wird beschrieben durch $|0\rangle$.

$$a^\dagger(\vec{k})|0\rangle = |T\vec{k}\rangle$$

$$b^\dagger(\vec{k}_2)a^\dagger(\vec{k}_1)a^\dagger(\vec{k}_3)|0\rangle = |A \cdot \vec{k}_2, T \cdot \vec{k}_1, T \cdot \vec{k}_3\rangle$$

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}} \left(a^\dagger(\vec{k})a(\vec{k}) + b^\dagger(\vec{k})b(\vec{k}) \right)$$

Der Ladungsoperator ist dann definiert durch:

$$Q = e \sum_{\vec{k}} \left(a^\dagger(\vec{k})a(\vec{k}) - b^\dagger(\vec{k})b(\vec{k}) \right)$$

8.8 Dirac-Gleichung (1928)

Die nichtrelativistische Pauli-Theorie des Elektrons ($s = \frac{1}{2}$) wird mit 2 Komponenten behandelt. Die relativistische Theorie benötigt den N -Komponenten-Spinor:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \vdots \\ \psi_N(x) \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\Psi}(\vec{x}, s) \text{ mit } \tilde{\Psi}(x, 1) = \psi_1(x), \tilde{\Psi}(x, 2) = \psi_2(x)$$

Betrachten wir nun den Produktraum $\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(0)} \otimes \mathcal{E}^{(s)}$. Betrachten wir den Vektor $|\Psi(t)\rangle$ und eine Welle $\psi_s(x, t) \equiv \langle x, s | \Psi(t) \rangle$. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist dann gegeben durch:

$$P(\vec{r}, t) = \sum_{s=1}^N |\psi_s|^2$$

Wir suchen nun eine Wellengleichung erster Ordnung:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H_D \Psi$$

H_D muß hierbei ein hermitescher Operator sein, weil diese nur dann die gleiche Struktur wie die SCHRÖDINGER-Gleichung besitzt. Bei der SCHRÖDINGER-Gleichung war ψ eine komplexe Funktion; hier ist Ψ ein N -komponentiger Spinor. Das Relativitätsprinzip fordert eine gewisse Symmetrie zwischen Raum und Zeit. Da auf der linken Seite eine erste Ableitung nach t steht, muß in H_D deshalb auch eine erste Ableitung nach x erhalten sein. Wir machen deshalb den Ansatz:

$$H_D = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m \text{ mit } \vec{p} = i\vec{\nabla}$$

$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ und β sind außerdem hermitesche Operatoren in $\mathcal{E}^{(s)}$. Üblicherweise können wir $i \frac{\partial}{\partial t} \equiv E$ schreiben, womit also gilt:

$$[\mathbf{1}E - \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta m] \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (1)$$

$\mathbf{1}$ ist eine Matrix im Spin-Raum, $\vec{\alpha}$ besteht aus drei Matrizen und βm ist auch eine Matrix. Schreiben wir außerdem folgende Gleichung auf:

$$\mathbf{1} [E^2 - |\vec{p}|^2 - m^2] \Psi = 0 \quad (2)$$

Die Idee ist, daß aus Gleichung (1) Gleichung (2) folgt, wenn $\alpha^0 \equiv \beta$, $\alpha^\mu \alpha^\nu + \alpha^\nu \alpha^\mu = 0 \forall \mu \neq \nu$ und $\alpha^0 \alpha^0 = \alpha^1 \alpha^1 = \alpha^2 \alpha^2 = \alpha^3 \alpha^3 = 1$ gilt. Damit ist Gleichung (1) die wohlbekannte DIRAC-Gleichung. In dieser DIRAC-Gleichung befindet sich N -fach die KLEIN-GORDON-Gleichung.

Beweis:

Multiplizieren wir dazu Gleichung (1) von links mit dem Operator $E + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m$. Daraus ergibt sich dann:

$$\left[E^2 - \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 - \beta^2 m^2 - \sum_{k < l} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) p^k p^l - \sum_k (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k) m p^k \right] \Psi = 0$$

Gilt $\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = 0$, $\alpha^k \beta + \beta \alpha^k = 0$ und $(\alpha^k)^2 = 1$, $\beta^2 = 1$, so ergibt sich die DIRAC-Gleichung. Hierbei wird vorausgesetzt, daß es $\vec{\alpha}$ und β gibt, welche diese Eigenschaften erfüllen. Dies ist der Fall für $\mathcal{E}^{(s)} \geq 4$. Der übliche DIRAC-Spinor besitzt $N = 4$, was jedoch Zufall ist. Im elektromagnetischen Feld führen die Transformationen $E \mapsto E - e\varphi$ und $\vec{p} \mapsto \vec{p} - e\vec{A}$ durch, wobei e die Elementarladung ist.

Diese Form der DIRAC-Gleichung sieht nun aber gar nicht relativistisch aus. Deshalb wollen wir diese in kovarianter Form schreiben. Dazu multiplizieren wir von links mit β :

$$\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3), \quad \gamma^0 \equiv \beta, \quad \gamma^n = \beta \alpha^n$$

Damit erhalten wir:

$$0 = [i\gamma^\mu D_\mu - \mathbf{1}m] \Psi \quad \text{mit} \quad D_\mu \equiv \partial_\mu + ieA_\mu$$

Von FEYNMAN stammt dann folgende Schreibweise:

$$0 = [i\mathcal{D} - m] \psi \quad \text{mit} \quad \mathcal{D} \equiv \gamma^\mu D_\mu$$

Die γ^μ genügen einer sogenannten CLIFFORD-Algebra:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu}$$

$$\beta \alpha^m + \beta \alpha^m \beta = \alpha^m - \alpha^m \beta \beta = \alpha^m - \alpha^m = 0$$

Schreiben wir uns die sogenannten Hermitizitätsbedingungen auf:

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \quad (\gamma^m)^\dagger = -\gamma^m$$

Wir wollen dies überprüfen. Bekanntlich ist β hermitesch; es gilt also $\beta^\dagger = \beta$. Des weiteren gilt mit den Antikommutatorbeziehungen zwischen α^m und β :

$$(\gamma^m)^\dagger = (\beta \alpha^m)^\dagger = (\alpha^m)^\dagger \beta^\dagger = \alpha^m \beta = -\beta \alpha^m = -\gamma^m$$

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$$

Außerdem gilt $\partial_\mu = \eta_{\mu\nu} \partial^\nu$. Die γ -Matrizen haben nun die Dimension $\mathbb{N} = 2^{\lfloor \frac{D}{2} \rfloor}$, wobei D die Raumzeit-Dimension ist und $[x] \equiv \text{Entier}(x)$ die Gaußsche Klammer (Treppenfunktion, „Jeder Zahl wird die größte ganze Zahl zugeordnet, welcher kleiner oder gleich der Zahl ist.“). Betrachten wir folgende Beispiele: Für $D = 1 + 1$ gilt $N = 2$, für $D = 2 + 1$ erhalten wir $N = 2$, für $D = 3 + 1$ entsprechend $N = 4$ und schließlich ergibt sich für $D = 9 + 1$, daß $N = 32$ ist. Schauen wir uns für $D = 4$ die DIRAC-Darstellung an:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^m = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^m \\ -\sigma^m & 0 \end{pmatrix}$$

σ^m sind hierbei die Pauli-Matrizen:

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Zu Hause kann als Übung überprüft werden, ob diese γ tatsächlich die CLIFFORD-Algebra erfüllen. In dieser Darstellung wird die Energie diagonal sein, da diese mit $\beta = \gamma^0$ verknüpft ist. Eine andere Darstellung ist die sogenannte MAJORANA-Darstellung:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} i\sigma^3 & 0 \\ 0 & i\sigma^3 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} -i\sigma^1 & 0 \\ 0 & -i\sigma^1 \end{pmatrix}$$

Auch diese Darstellung genügt der CLIFFORD-Algebra. In dieser Darstellung ist die DIRAC-Gleichung reell; man kann daher die Lösungen (Spinoren) reell wählen.

Greifen wir nun im folgenden auf DIRAC-Spinoren zurück. Betrachten wir dazu den folgenden komplexen Spinor:

$$\Psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$$

$$0 = [(i\partial_\mu - eA_\mu) \gamma^\mu \psi - m\psi]^\dagger = (-i\partial_\mu - eA_\mu) \psi^\dagger (\gamma^m)^\dagger - m\psi^\dagger (\gamma^0)^2$$

$$(\gamma^m)^\dagger = \gamma^0 \gamma^m \gamma^0, \quad \bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma_0$$

Also folgt daraus die adjungierte DIRAC-Gleichung:

$$\boxed{\bar{\psi} [\gamma^\mu (-i\partial_\mu - eA_\mu) - m\mathbf{I}] = 0 \text{ mit } \bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0} \quad (\bar{\text{I}})$$

Wir berechnen nun $\bar{\psi} \cdot (1) - (\bar{\text{I}}) \cdot \psi$:

$$0 = [\bar{\psi} (i\partial_\mu - eA_\mu) \gamma \psi - m\bar{\psi} \psi] - [\bar{\psi} (-i\partial_\mu - eA_\mu) \gamma \psi - m\bar{\psi} \psi] = \bar{\psi} \left(i\vec{\partial}_\mu + i\overleftarrow{\partial}_\mu \right) \gamma \psi = i\partial_\mu (\bar{\psi} \gamma \psi)$$

Also gilt $i\partial_\mu (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi) = 0$. Mit der Stromdichte $j^\mu \equiv \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$ erhalten wir die Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu j^\mu = 0$.

8.9 Lorentzinvarianz der Dirac-Gleichung

Wir betrachten den Zustand eines Elektrons im Bezugssystem R . Dessen Komponenten $\psi_s(x)$ genügen vier Gleichungen.

$$\boxed{\sum_{t=1}^4 \sum_{\mu=0}^3 (\gamma^\mu)_{st} [i\partial_\mu - eA_\mu(x)] \psi_t(x) - m\psi_s(x) = 0} \quad (1)$$

Machen wir nun eine orthochrone Lorentztransformation, wobei wir das neue Bezugssystem R' erhalten:

$$\mathcal{L} \text{ (mit Parameter } \Omega_\nu^\mu, \Omega_0^0 > 0) : R \xrightarrow{\mathcal{L}} R'$$

Schreiben wir die Lorentztransformation kontravariant:

$$x'^\mu = \Omega_\nu^\mu x^\nu \text{ oder } x^\mu = x'^\nu \Omega_\nu^\mu$$

Betrachten wir außerdem den partiellen Differentialoperator, welcher einer kovarianten Transformation unterliegt: $\partial_\mu = \partial'_\nu \Omega_\mu^\nu$. Die Komponenten des Potential muß auch so transformieren wie der partielle Differentialoperator: $A_\mu(x) = A'_\nu(x') \Omega_\mu^\nu$. Aus Gleichung (1) ergibt sich dann:

$$[\hat{\gamma}^\mu (i\partial'_\mu - eA'_\mu(x')) - m] \psi(\mathcal{L}^{-1}x') = 0 \text{ mit } \hat{\gamma}^\mu \equiv \Omega_\nu^\mu \gamma^\nu$$

Die Krux ist, daß die neuen Matrizen $\hat{\gamma}^\mu$ auch die CLIFFORD-Algebra erfüllen. Dies wollen wir überprüfen:

$$\hat{\gamma}^\mu \hat{\gamma}^\nu + \hat{\gamma}^\nu \hat{\gamma}^\mu = \Omega_\alpha^\mu \Omega_\beta^\nu (\gamma^\alpha \gamma^\beta + \gamma^\beta \gamma^\alpha) = \Omega_\alpha^\mu \Omega_\beta^\nu \cdot 2\eta^{\alpha\beta} = 2\eta^{\mu\nu}$$

Der letzte Schritt folgt aus der Tatsache, daß die $\Omega_\alpha^\mu \Omega_\beta^\nu$ Lorentztransformationen beschreiben. Also (ohne Beweis) gibt es eine Matrix Λ mit $\hat{\gamma}^\mu \equiv \Omega_\alpha^\mu \gamma^\alpha = \Lambda^{-1} \gamma^\mu \Lambda$. Explizit aufgeschrieben bedeutet dies $(\gamma^\mu)_{st} = (\Lambda^{-1})_s^u (\gamma^\mu)_{uv} (\Lambda)_t^v$. μ ist ein Raumzeitindex und Λ ist im Raum $\mathcal{E}^{(S)}$ definiert. Wir definieren nun $\psi'(x) \equiv \Lambda \psi(x) = \Lambda \psi(\mathcal{L}^{-1}x')$. Wir multiplizieren diese Gleichung von links mit Λ :

$$\boxed{[\gamma^\mu (i\partial'_\mu - eA'_\mu(x')) - m] \psi'(x') = 0}$$

Das bedeutet, daß die DIRAC-Gleichung forminvariant ist bei Lorentztransformationen. Damit haben wir explizit bewiesen, daß die DIRAC-Gleichung lorentzinvariant ist. Λ kann so gewählt werden, daß $\Lambda^\dagger = \gamma^0 \Lambda^{-1} \Gamma^0$ ist. Λ ist damit quasi-unitär. Wenn Λ diese Eigenschaften besitzt, gilt $(\hat{\gamma}^\mu)^\dagger = \gamma^0 \hat{\gamma}^\mu \gamma^0$. Die adjungierte DIRAC-Gleichung ist auch forminvariant mit $\bar{\psi}'(x') \equiv \bar{\psi}(x) \Lambda^{-1}$. Betrachten wir eine infinitesimale Lorentztransformation. Zu jeder der 6 infinitesimalen „Drehungen“ gilt $\Omega_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} - \varepsilon Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}$, wobei $Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)} \equiv \eta_{\mu\alpha} \eta_{\nu\beta} - \eta_{\mu\beta} \eta_{\nu\alpha}$. Zu jeder dieser infinitesimalen Drehungen gehört eine Matrix $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon) \sim \mathbf{1} + i\varepsilon S_{\alpha\beta}$. Mit der Bedingung $\Omega_\nu^\mu \gamma^\nu = \Lambda^{-1} \gamma^\mu \Lambda$ findet man $[S_{\alpha\beta}, \gamma^\mu] = i(\delta_\beta^\mu \gamma_\alpha - \delta_\alpha^\mu \gamma_\beta)$. Die Lösung ist $S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\sigma_{\alpha\beta}) \equiv \frac{1}{2}(\frac{i}{2}[\gamma_\alpha, \gamma_\beta])$. Machen wir dazu zwei Beispiele:

* Beispiel ①: Spezielle Lorentztransformation mit Geschwindigkeit $v \equiv \tanh(\eta)$ in x -Richtung

$$\Lambda^{xt}(\eta) = \exp[iS_{10}\eta] = \mathbf{1} \cosh\left(\frac{\eta}{2}\right) + 2iS_{10} \sinh\left(\frac{\eta}{2}\right)$$

Damit wissen wir, wie das Spinorfeld transformiert.

* Beispiel ②: Drehung um die z -Achse:

$$\Lambda^{xy}(\varphi) = \exp[iS_{12}\varphi] = \mathbf{1} \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + 2iS_{12} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)$$

Ein Boost ist also eine Pseudo-Drehung mit einem imaginären Winkel.

In der DIRAC-Darstellung der γ -Matrizen findet man:

$$\sigma_{kl} = \varepsilon_{klm} \begin{pmatrix} \sigma^m & 0 \\ 0 & \sigma^m \end{pmatrix}$$

Damit findet man $2iS_{12} = i\sigma_3 \otimes \mathbf{1}_2$. In der DIRAC-Darstellung gilt:

$$\Lambda_{\hat{z}}(\varphi) = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \mathbf{1}_4 + \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) (i\sigma_3 \otimes \mathbf{1}_2)$$

Das ist genau die Transformation eines Teilchens mit Spin 1/2. Damit transformiert die Wellenfunktion bei Drehungen wie die Wellenfunktion eines Teilchens mit Spin 1/2. Vergleichen wir dies mit der Pauli-Theorie, wo wir folgende Transformation hatten:

$$R_{\hat{z}}^{Pauli}(\varphi) = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) - \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) (i\sigma_3)$$

Damals hatten wir einen Spinor mit zwei Komponenten; aber nun besitzt unser Spinor vier Komponenten. Hier gilt dann $x^{\mu'} = \Omega^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$ und $\psi' = \Lambda\psi$. Der adjungierte Spinor transformiert nach $\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)\Lambda^{-1}$.

$$\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda = \Omega^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu}$$

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon) = \mathbf{1} + i\varepsilon S_{\alpha\beta}, \quad S_{\alpha\beta} = \frac{i}{4}[\gamma_{\alpha}, \gamma_{\beta}]$$

Es gibt 16 kovariante Größen, welche linear unabhängig sind. Diese fassen wir in einer Tabelle zusammen:

Tensor	Anzahl	Klassifizierung	Bemerkungen
$S(x) \equiv \bar{\psi}(x)\psi(x)$	1	Skalar	$S'(x') = \bar{\psi}'(x')\psi(x') = \bar{\psi}(x)\Lambda^{-1}\Lambda\psi(x) = \bar{\psi}(x)\psi(x) = S(x)$
$P(x) \equiv \bar{\psi}(x)\gamma^5\psi(x)$	1	Pseudoskalar	$\gamma^5 = \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \{\gamma^5, \gamma^{\mu}\} = 0$
$V^{\mu}(x) \equiv \bar{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)$	4	Vektor	Stromdichte $j^{\mu} = \bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$ mit Kontinuitätsgleichung $\partial_{\mu}j^{\mu} = 0$
$T^{\mu\nu}(x) = \bar{\psi}(x)\sigma^{\mu\nu}\psi$	6	Tensor 2.Stufe	$P'(x') = \det(\Omega)P(x)$
$A^{\mu}(x) = \bar{\psi}\gamma^5\gamma^{\mu}\psi$	4	Pseudovektor	

8.10 Ebene Wellen

Wir betrachten $A_{\mu}(x) = 0$ (DIRAC-Darstellung). Wichtig ist, daß H_D mit \vec{p} kommutiert, also $[H_D, \vec{p}] = 0$. Wir bestimmen die Eigenlösungen von H_D zu einem bestimmten Wert \vec{p} . Wie können wir die Wellenfunktion aufschreiben?

$$\psi(x) = u(\vec{p}) \exp(i\vec{p}\vec{r})$$

Wir haben $\psi(x)$ also separiert in einen konstanten Spinor $u(\vec{p})$ und eine ebene Welle $\exp(i\vec{p}\vec{r})$. $u(\vec{p})$ muß eine Lösung folgender Eigenwertgleichung sein:

$$H_D u(\vec{p}) \equiv [\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m] u(\vec{p}) = E u(\vec{p})$$

Die Spinoren sind Eigenlösungen zum HAMILTON-Operator H_D .

$$H^2 = (|\vec{p}|^2 + m^2) \mathbf{1}$$

Daraus ergeben sich dann die Energieeigenwerte $E = \pm\sqrt{|\vec{p}|^2 + m^2} \equiv \pm E(\vec{p})$. Im Ruhesystem gilt $p^{\mu} = (m, 0, 0, 0)$. Betrachten wir $\beta mu(0) = Eu(0)$:

$$\begin{pmatrix} m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m \end{pmatrix} u(0) = \begin{pmatrix} E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E \end{pmatrix} u(0)$$

Hieraus lassen sich direkt die Eigenwerte $E = \pm m$ ablesen. Für die Eigenvektoren gilt:

$$u_{(1)}^{(\vec{0})} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u_{(2)}^{(\vec{0})} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u_{(3)}^{(\vec{0})} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, u_{(4)}^{(\vec{0})} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Daher gilt im Ruhesystem:

$$\psi_0^{(2)}(x) = u_{(2)}^{(\vec{0})} \exp(-iEt)$$

Betrachten wir nun einen Lorentz-Boost in z -Richtung: $p'^\mu = (E', 0, 0, p')$. Dann gilt in der DIRAC-Darstellung:

$$\psi^{(2)}(x') = \Lambda u_{(2)}^{(\vec{0})} \exp(ip'^\mu x'_\mu) \text{ mit } \Lambda \equiv \cosh\left(\frac{\eta}{2}\right) + i\sigma_{12} \sinh\left(\frac{\eta}{2}\right), \sigma_{12} \equiv \frac{i}{2}[\gamma_1, \gamma_2]$$

$$u^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p'}{E'} + m \\ 0 \end{pmatrix}$$

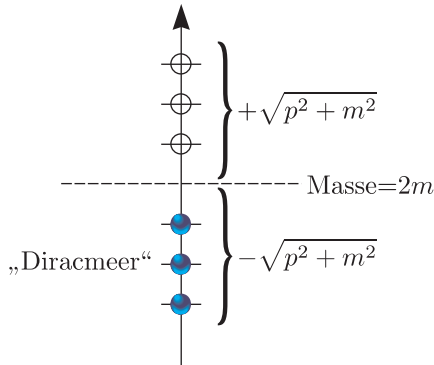
8.11 Positron (Dirac: 1931, Anderson: 1932)

8.11.1 Diracsche Hypothese

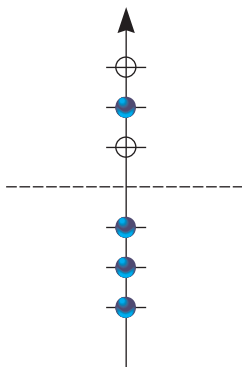
Im „Vakuum“ sind alle Zustände mit negativen Energien besetzt. Die beobachtbaren Eigenschaften eines bestimmten Zustandes sind die Unterschiede dieses Zustands im Vergleich zum „Vakuum“.

1.) Vakuum:

Wir bezeichnen das Vakuum mit $|0\rangle$. Dann gilt $\langle Q \rangle \equiv 0$ und $\langle E \rangle \equiv 0$.



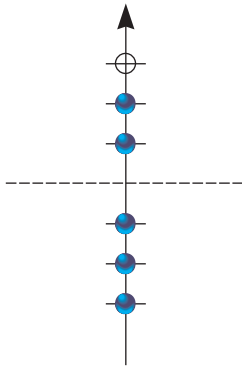
2.) 1-Teilchen-Zustand:



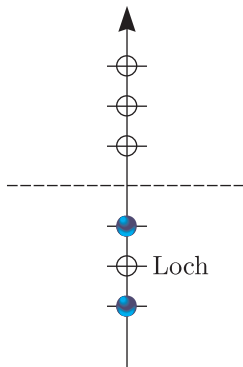
Betrachten wir einen „1-Teilchen-Zustand“ $|\vec{k}\rangle$ mit $\langle Q \rangle = e$ und $\langle E \rangle = +\sqrt{|\vec{k}|^2 + m^2}$.

3.) 2-Teilchen-Zustand:

Für einen „2-Teilchen-Zustand“ gilt:



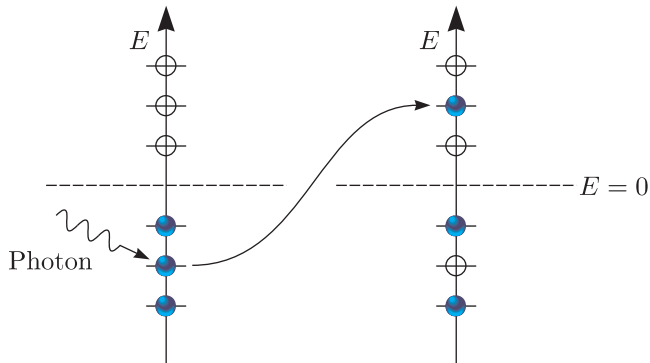
4.) 1-Loch-Zustand:



Es handelt sich um einen 1-Teilchen-Zustand $|\vec{k}\rangle$ mit $\langle Q \rangle = (\infty - 1) \cdot e - \infty \cdot e = -e$ und der Energie $\langle E \rangle = +\sqrt{|\vec{k}|^2 + m^2}$. Die Vorhersage ist, daß es ein „Teilchen“ gibt mit der Ladung $-e$ und der Masse m . Dieses Teilchen wurde von Anderson in der kosmischen Strahlung entdeckt. Man bezeichnet dieses als Positron (Antimaterie).

5.) Paarbildung und Zerstrahlung:

$$\gamma^+ \gamma^- \Leftrightarrow e^- e^+$$

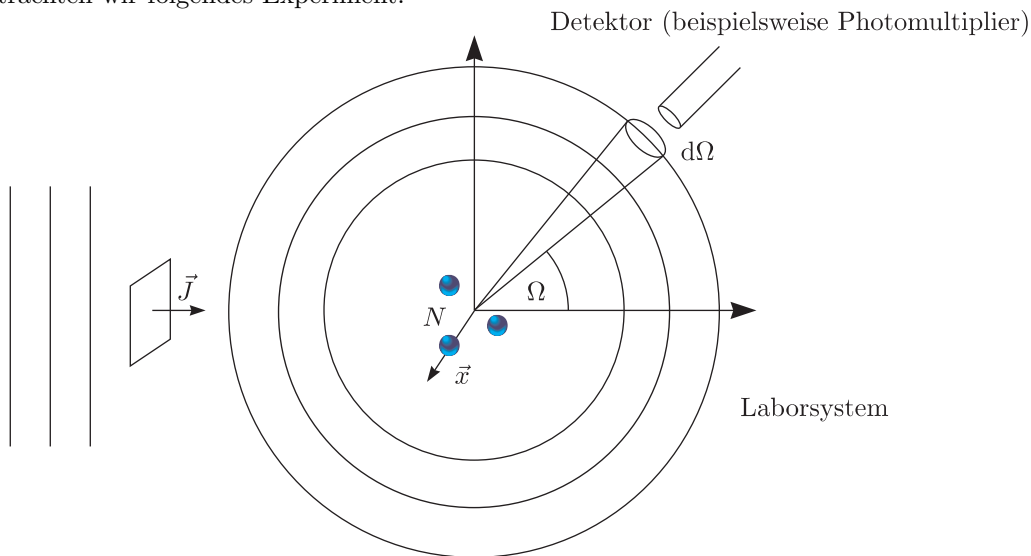


Kapitel 9

Streutheorie I

9.1 Definition der Wirkungsquerschnitte

Betrachten wir folgendes Experiment:



Wir führen die Größe η ein, welche maßgebend für die pro Zeiteinheit in den Raumwinkel $d\Omega$ in die Richtung $\Omega \equiv (\vartheta, \varphi)$ gestreuten Teilchen ist. η ist proportional zur Anzahl der Targets N , zum Betrag der Stromdichte J der gestreuten Teilchen und zum Raumwinkelelement $d\Omega$. Wir fassen dies zusammen als $\eta = \sigma(\Omega) \cdot J \cdot N d\Omega$, wobei wir $\sigma(\Omega)$ als differentiellen Streuquerschnitt bezeichnen. Schreiben wir die Einheitengleichung auf:

$$\eta = \sigma(\Omega) J N d\Omega \quad \left[\frac{1}{s} \right] = [\text{cm}^2] \cdot \left[\frac{1}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} \right] \cdot [1] \cdot [1]$$

Die Gesamtzahl aller gestreuten Teilchen ergibt sich dann als:

$$\eta_{tot} = J \cdot N \cdot \sigma_{tot} \quad \text{mit} \quad \sigma_{tot} = \int \sigma(\Omega) d\omega$$

Das Problem ist, den Streuquerschnitt zu berechnen. Dazu betrachten wir nun eine elastische Streuung von Teilchen der Masse m an einem statischen Potential $V(\vec{x})$ mit $\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} |\vec{x}| V(\vec{x}) = 0$. Diese Teilchen besitzen die Energie E und den Impuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ mit $k \equiv |\vec{k}|$. Für jeden Wert von \vec{k} gibt es eine Lösung der stationären SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right] \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = E \psi_{\vec{k}}(\vec{x})$$

deren Verhalten im Unendlichen von der Form $\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \mapsto \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) + f(\Omega) \frac{\exp(ikr)}{r}$ (mit $r = |\vec{x}|$) ist. Damit haben wir zwei Wellen:

- I.) Welle der Dichte 1 mit der Stromdichte $\frac{\hbar \vec{k}}{m}$.

Die Dichte P ist definiert durch $P = \psi(\vec{x})^* \psi(\vec{x})$ und für die Stromdichte gilt:

$$\vec{J}(\vec{x}) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right] \text{ mit } \frac{\partial}{\partial t} P + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0$$

Die Stromdichte kann auf diese Weise (als Übung) berechnet werden.

II.) Welle der Dichte $\frac{|f(\Omega)|^2}{r^2}$ mit der Stromdichte $\frac{\hbar k}{m} x \frac{|f(\Omega)|^2}{r^2}$.

Auch dies kann mit den obigen Beziehungen für \vec{J} und P gezeigt werden.

Die Zahl der pro Zeiteinheit in den Raumwinkel $(\Omega, d\Omega)$ emittierten Teilchen ist:

$$\frac{\hbar k}{m} \left(\frac{f(\Omega)}{r} \right)^2 r^2 d\Omega$$

Diese Zahl dividiert durch den einfallenden Strom $J = \frac{\hbar k}{m}$ ergibt dann den Streuquerschnitt $\sigma(\Omega) = |f_{\vec{k}}(\Omega)|^2$, wobei man $f_{\vec{k}}(\Omega)$ als Streuamplitude bezeichnet.

9.1.1 Intermezzo

Betrachten wir die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

$V(r)$ soll ein Zentralpotential sein. Mit $p_r \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$ und $\vec{l} = \frac{\hbar}{i} (\vec{x} \times \vec{\nabla})$ erhalten wir daraus:

$$\boxed{\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{|\vec{l}|^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \vartheta, \varphi) = E\psi(r, \vartheta, \varphi)}$$

Hierbei gelten folgende Eigenwertgleichungen bei $|\vec{l}|^2$ und l_z :

- 1.) $|\vec{l}|^2 Y_l^m(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$
- 2.) $l_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$

Die Kugelfunktionen Y_l^m bilden auf der Einheitskugel ein vollständiges Orthonormalsystem von quadratintegrierbaren Funktionen. Zur Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung führen wir eine Trennung der Variablen durch, also:

$$\boxed{\psi_l^m(r, \vartheta, \varphi) = \frac{y_l(r)}{r} Y_l^m(\vartheta, \varphi)}$$

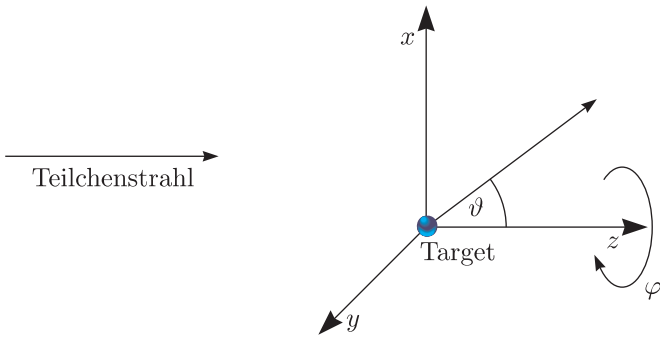
Durch Einsetzen erhalten wir folgende Gleichung, welche nur noch den Radialanteil $y_l(r)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] y_l(r) = 0 \text{ mit } y_l(0) = 0$$

- 1.) $E < 0$: Nur für diskrete Energiewerte gilt $y_l \mapsto \exp(-kr)$ für $r \mapsto \infty$
- 2.) $E > 0$: Bei beliebigen Energien gilt $y_l \mapsto \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)$ mit der Phasenverschiebung δ_l

9.2 Streuphasen

Betrachten wir also Teilchen im Zentralpotential $V(r)$ mit $\lim_{r \rightarrow \infty} rV = 0$. Hierbei ist $\vec{k} \parallel \hat{z}$.



$$\psi(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r} y_l(r) P_l(\cos \vartheta)$$

$$f(\vartheta) = \sum_l f_l P_l(\cos \vartheta)$$

Nun ist y_l die im Ursprung reguläre Lösung der Radialgleichung:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\varepsilon - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_l = 0 \text{ mit } \varepsilon \equiv k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ und } U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$$

Hierbei findet man das asymptotische Verhalten $y_l \mapsto a_l \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)$ für $r \mapsto \infty$, wobei δ_l die Streuphase ist. Es gilt:

$$a_l = i^l \frac{2l+1}{k} \exp(i\delta_l) \text{ und } f_l = \frac{2l+1}{k} \exp(i\delta_l) \sin(\delta_l)$$

Daraus folgt die Streuamplitude mit $\lambda \equiv \frac{1}{k}$ und $\hbar \equiv 1$:

$$f(\vartheta) = \lambda \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_l) \sin(\delta_l) P_l(\cos \vartheta)$$

$$\frac{y_l}{r} \sim \frac{2l+1}{2ikr} [(-1)^{l+1} \exp(-ikr) + \exp(2i\delta_l) \exp(ikr)]$$

Wir vergleichen dies mit der Form von ebenen Wellen, wobei wir diese nach Legendre-Koeffizienten entwickeln:

$$\exp(i\vec{k}\vec{r}) \Big|_{P_l(\cos \vartheta)} \sim \frac{2l+1}{2ikr} [(-1)^{l+1} \exp(-ikr) + \exp(ikr)]$$

Der Unterschied steckt in der Phase $\exp(2i\delta_l)$ der auslaufenden Kugelwelle oder mit anderen Worten: Die Wirkung des Streupotentials besteht in einer Phasenverschiebung bei jeder auslaufenden Welle.

$$\sigma(\Omega) = \lambda^2 \sum_{l,l'} l' \delta_l \delta_{l'} P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta)$$

Mittels Integration und der Orthogonalitätsrelationen der P_l findet man:

$$\sigma_{tot} = 4\pi\lambda^2 \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) \equiv \sum_l \sigma_l$$

Jede Partialwelle hat damit einen Beitrag σ_l . Das Maximum tritt natürlich genau dann ein, wenn der Sinus gleich eins ist: $\sigma_{l_{max}} = 4\pi\lambda^2(2l+1)$. Wenn die Phasenverschiebung gleich 0 ist, gilt $\sigma_{tot} = 0$; es findet also keine Streuung statt.

a.) Erste Bemerkung:

Wir berechnen:

$$\text{Im} f(\vartheta) = \lambda \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{Im}(\exp(i\delta_l)) \sin(\delta_l) P_l(1) = \lambda \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l) \cdot 1 = \lambda \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l)$$

Hieraus ergibt sich also das sogenannte „optische Theorem“:

$$\sigma_{tot} = 4\pi\lambda \text{Im} f(\vartheta)$$

b.) Zweite Bemerkung:

Als Übung kann man Zentralpotentiale endlicher Reichweite betrachten: $V(r) = 0$ für $r > r_0$.

9.2.1 Intermezzo

Wir wollen allgemeine Eigenschaften der Eigenwertgleichung $y''(x) - U(x)y(x) = \varepsilon y(x)$ betrachten, wobei $U(x)$ nach unten beschränkt ist. (Diese Gleichung hat etwas mit unserer Radialgleichung zu tun.) Dazu wollen wir noch einmal wiederholen, was die WRONSKI-Determinante der beiden Funktionen $y_1(x)$ und $y_2(x)$ ist:

$$W(y_1, y_2) = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y_1' & y_2' \end{vmatrix} = y_1 y_2' - y_2 y_1'$$

Wenn diese Determinante in irgendeinem Punkt gleich 0 ist, so ist auch die logarithmische Ableitung von y_1 und y_2 gleich:

$$y_1 y_2' = y_1' y_2 \Leftrightarrow \frac{y_2'}{y_2} = \frac{y_1'}{y_1} \Leftrightarrow \boxed{(\ln(y_2(x)))' = (\ln(y_1(x)))'}$$

Theorem:

Sind z_1 und z_2 Lösungen der Gleichungen $z_1'' + F_1(x)z_1 = 0$ (α) und $z_2'' + F_2(x)z_2 = 0$ (β) im Intervall (a, b) , in denen die Funktionen $F_1(x)$ und $F_2(x)$ stetig sind (eventuell Unstetigkeiten erster Art, also Sprünge von endlicher Größe), so gilt:

$$W(z_1, z_2)|_a^b = \int_a^b (F_1 - F_2) z_1 z_2 dx$$

Beweis:

Wir berechnen $(\alpha) \cdot z_2 - (\beta) \cdot z_1$, woraus $z_2 z_1'' - z_1 z_2'' + (F_1 - F_2) z_1 z_2 = 0$ folgt. Dann kann man die linke Seite umformen:

$$-\frac{d}{dx} (z_1 z_2' - z_1' z_2) + (F_1 - F_2) z_1 z_2 = 0 \Leftrightarrow -\frac{d}{dx} W(z_1, z_2) + (F_1 - F_2) z_1 z_2 = 0$$

Durch Integration folgt dann die Behauptung.

Korollar:

Betrachten wir folgenden Sonderfall:

Es sei $F_1 = \varepsilon_1 - U(x)$ und $F_2 = \varepsilon_2 - U(x)$. Sind dann y_1 und y_2 Lösungen der Gleichung $y'' + (\varepsilon - U(x))y = 0$ zu den Werten ε_1 und ε_2 , so gilt:

$$W(y_1, y_2)|_a^b = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_a^b y_1 y_2 dx$$

9.3 Integraldarstellung

Wir suchen einen Zusammenhang zwischen δ_l und $\hat{\delta}_l$, die zu verschiedenen Potentialen $V(z)$ und $\hat{V}(z)$ gehören, aber zum selben Eigenwert E .

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon - \hat{U} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \hat{y}_l = 0 \text{ mit } \varepsilon \equiv k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ und } U \equiv \frac{2mV}{\hbar^2}$$

Mit der asymptotischen Form $\hat{y}_l \sim \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \hat{\delta}_l\right)$ schreiben wir die WRONSKI-Determinante auf:

$$W(y_l, \hat{y}_l) \mapsto \begin{cases} 0 & \text{für } r \mapsto 0 \\ k \sin(\delta_l - \hat{\delta}_l) & \text{für } r \mapsto \infty \end{cases}$$

Es gilt $y_l = \kappa_l r^{l+1}$, so ergibt sich die WRONSKI-Determinante $W(y_l, \hat{y}_l) = 0$. Für den zweiten Grenzwert gilt mit $\chi \equiv kr - \frac{l\pi}{2}$ und den Additionstheoremen:

$$W \sim k \sin(\chi + \delta_l) \cos(\chi + \hat{\delta}_l) - k \cos(\chi + \delta_l) \sin(\chi + \hat{\delta}_l) = k \sin(\chi + \delta_l) \cos(-\chi - \hat{\delta}_l) + k \cos(\chi + \delta_l) \sin(-\chi - \hat{\delta}_l) = k \sin(\chi + \delta_l - \chi - \hat{\delta}_l) = k \sin(\delta_l - \hat{\delta}_l)$$

Mittels des WRONSKI-Theorems finden wir:

$$W(y_l, \hat{y}_l)|_0^\infty = - \int_0^\infty \hat{y}_l (U - \hat{U}) y_l dr$$

$$\sin(\delta_l - \hat{\delta}_l) = - \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty \hat{y}_l (V - \hat{V}) y_l dr$$

Dies gilt für beliebige Potentiale mit

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \hat{V}(r) = 0 \text{ und } \lim_{r \rightarrow 0} r^2 \hat{V}(r) = 0$$

Sie dürfen folglich im Ursprung nicht zu stark konvergieren.

Beispiel:

Betrachten wir den Fall $\hat{V} = 0$ ($\hat{\delta}_l = 0$, $\hat{y} = kr j_l(kr)$). Dann finden wir:

$$\sin(\delta_l - 0) = - \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r j_l(kr) V(r) y_l(r) dr$$

Hier wird δ_l und y_l gesucht. Sowohl die BESSELFunktionen j_l als auch das Potential V sind gegeben. Bisher haben wir exakt gerechnet. Nun wollen wir uns aber näher mit der BORNschen Näherung beschäftigen:

Ist V genügend klein, so ist $y_l(r) \approx kr j_l(kr)$ und δ_l liegt in der Nähe von Null. Dann gilt:

$$\delta_l \approx \delta_l^{\text{BORN}} = - \frac{2m}{\hbar^2} k \int_0^\infty r^2 j_l^2(kr) V(r) dr$$

Der Fehler ist gering, falls $V(r)$ gegenüber $E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ fast überall hinreichend klein ist (unverbindlich). Damit ist die BORNsche Näherung bei hohen Energien bzw. großen Werten von l ziemlich gut.

9.4 Coulombpotential

Betrachten wir zwei Teilchen mit den Ladungen $Z_1 e$ und $Z_2 e$:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 r^2}{r} \text{ mit } r \equiv |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$$

$$\sigma_c(\Omega) = (f_c(\Omega))^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\Theta}{2}\right)}$$

Bemerkungen:

- 1.) RUTHERFORD hatte diese Formel vor Einführung der Quantenmechanik schon klassisch hergeleitet.
- 2.) Der Wirkungsquerschnitt ist abhängig zum Quadrat des Potentials.
- 3.) Die Winkelverteilung ist energieunabhängig.
- 4.) Der Streuquerschnitt ist proportional zum Kehrwert des Quadrats der Energie.
- 5.) Der totale Wirkungsquerschnitt σ_{tot} ist unendlich groß, da das Potential im Unendlichen zu langsam verschwindet. Praktisch wird man jedoch nie ein COULOMBpotential vorfinden (durch Abschirmung).

9.5 Sphärische Bessel-Funktionen

Betrachten wir die radiale SCHRÖDINGER-Gleichung für ein freies Teilchen: $\psi_l^m(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} y_l(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - E \right] y_l(r) = 0$$

Wir setzen $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ und $\varrho = kr$ und erhalten:

$$f_l(\varrho) = \frac{1}{r} y_l(r) = \frac{k}{\varrho} y_l\left(\frac{\varrho}{k}\right)$$

Damit erhalten wir folgende Differentialgleichung:

$$\frac{1}{\varrho} \frac{d^2}{d\varrho^2} (\varrho f_l) + f_l - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} f_l = 0$$

Die Lösungen dieser Differentialgleichung sind:

- 1.) Sphärische BESSEL-Funktionen $j_l(\varrho)$
- 2.) Sphärische NEUMANN-Funktionen $n_l(\varrho)$

Für $\varrho \mapsto 0$ ergibt sich:

- 1.) $j_l(\varrho) \sim \frac{\varrho^l}{(2l+1)!!}$ regulär bei $\varrho = 0$
- 2.) $n_l(\varrho) \sim \frac{(2l-1)!!}{\varrho^{l+1}}$ regulär bei $\varrho = 0$

Damit gilt für die Wellenfunktion: $\psi_{k,l,m}(\vec{r}) = j_l(kr) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$. Hierbei gilt:

$$\exp(ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} C_{k,l} \psi_{k,l,0}(\vec{r}) \quad \text{mit } C_{k,l} = i^l \sqrt{4\pi(2l+1)}$$

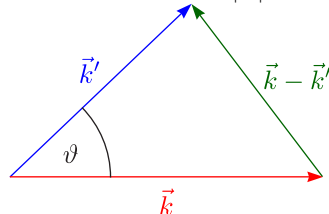
$$\exp(ikr \cos \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta)$$

9.6 Bornsche Näherung

Betrachten wir nochmals zur Wiederholung:

$$f_{\vec{k}}^{\text{BORN}}(\vec{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}') V(\vec{r}') \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}')$$

\vec{k} ist hierbei der Impuls der einlaufenden Teilchen und \vec{k}' der Impuls der auslaufenden Teilchen. Hierbei gilt $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ und $\hat{k}' = \frac{\vec{k}'}{|\vec{k}'|}$.



Als Übung soll an dieser Stelle der Zusammenhang $|\vec{k} - \vec{k}'| = 4k^2 \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)$ gezeigt werden. Für ein rotations-symmetrisches Potential gilt:

$$f_k(\vartheta) = \frac{m}{\hbar^2 k \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)} \int_0^{\infty} r \sin\left(2kr \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\right) V(r) dr \quad (\text{siehe Übungsblatt 14})$$

Wir betrachten als Beispiel das YUKAWA-Potential $V(r) = V_0 \frac{\exp(-\alpha r)}{\alpha r}$:

$$f_k(\vartheta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2\alpha} \frac{1}{4k^2 \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) + \alpha^2}$$

Wir betrachten den Übergang zum COULOMB-Potential mit $V_0 = \alpha Z_1 Z_2 e^2$:

$$V(r) = Z_1 Z_2 e^2 \frac{\exp(-\alpha r)}{r} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

$$f_k(\vartheta) \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} -\frac{2mZ_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 \cdot 4k^2 \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)}$$

Wir den Streuquerschnitt und die Energie gilt:

$$\sigma(\Omega) = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E^2 \sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right)} \text{ mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Kapitel 10

Zeitabhängige Störungstheorie

Gegeben sei ein zeitabhängiger HAMILTON-Operator $H(t)$ und gesucht ein Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ im SCHRÖDINGER-Bild. Zur Zeit t_0 liege $|\psi(t_0)\rangle$ vor und zur Zeit t gelte dann $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$. U ist definiert durch die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0)$$

und die Anfangsbedingung $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$. $U(t, t_0)$ ist hierbei unitär und $H(t)$ hermitesch. U hat außerdem die Eigenschaft $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) \cdot U(t_1, t_0)$ für $t_2 > t_1 > t_0$. Man bezeichnet diese Beziehung auch als „Zusammensetzungsregel“. Falls H zeitunabhängig ist, gilt $U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \cdot (t - t_0)\right)$.

Wir machen nun den Störungsansatz $H(t) = H^{(0)}(t) + V(t)$, wobei $V(t)$ eine Störung sein soll. Wir setzen voraus, daß die ungestörte Gleichung $i\hbar U^{(0)\dagger}(t, t_0) \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)}(t, t_0) = H^{(0)}(t)U^{(0)}(t, t_0)$ bereits gelöst ist und arbeiten im Wechselwirkungsbild:

$$* U_I(t, t_0) := U^{(0)\dagger}(t, t_0)U(t, t_0)$$

$$* |\psi(t)\rangle_I = U_I(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle_I \text{ mit } |\psi(t_0)\rangle_I = |\psi(t_0)\rangle$$

Aus diesen beiden Bedingungen ergibt sich dann:

$$|\psi(t)\rangle_I = U^{(0)\dagger}(t, t_0)U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \text{ wobei } U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle$$

* Für Operatoren A gilt:

$$A_I(t) = U^{(0)\dagger}(t, t_0)A(t)U^{(0)}(t, t_0)$$

Wir stellen die SCHRÖDINGER-Gleichung für U_I auf:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)\dagger} \right) U + U^{(0)\dagger} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U \right) = -U^{(0)\dagger} H^{(0)} U + U^{(0)\dagger} H U = \\ &= U^{(0)\dagger} V U = U^{(0)\dagger} V U^{(0)} U^{(0)\dagger} U \text{ mit } U^{(0)\dagger} V U^{(0)} = V_I \text{ und } U^{(0)\dagger} U = U_I \end{aligned}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} U_I(t', t_0) = V_I(t') U_I(t', t_0)}$$

Wir integrieren von t_0 nach t und erhalten eine Integralgleichung:

$$i\hbar U_I(t, t_0) - i\hbar U_I(t_0, t_0) = \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

Mit $U_I(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ erhalten wir:

$$\boxed{U_I(t, t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'}$$

Diese Integralgleichung wollen wir durch Iteration lösen:

$$\begin{aligned}
 U_I(t, t_0) &= \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(\tau) d\tau + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^{\tau} V_I(\tau) V_I(\tau') U_I(\tau', t_0) d\tau' = \\
 &= \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t_0)
 \end{aligned}$$

Diese bezeichnet man auch als DYSON-Reihe. Allgemein gilt:

$$U_I^{(n)}(t, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t d\tau_n \int_{t_0}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 V_I(\tau_n) V_I(\tau_{n-1}) \dots V_I(\tau_1)$$

10.1 Übergangswahrscheinlichkeit

Hier soll nun $H^{(0)}$ zeitunabhängig sein.

$$U^{(0)}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H^{(0)} \cdot (t - t_0)\right)$$

Das Eigenwertproblem von $H^{(0)}$ sei des weiteren gelöst; wir kennen also Eigenvektoren $|a\rangle$ mit $H^{(0)}|a\rangle = E_a^{(0)}|a\rangle$. Definiere die BOHRsche Frequenz $\omega_{ab} = \frac{1}{\hbar}(E_a^{(0)} - E_b^{(0)})$ und das Übergangsmatrixelement $V_{ab}(t) = \langle a|V(t)|b\rangle$. Das System befinde sich zur Zeit t_0 im $H^{(0)}$ -Eigenzustand $|a\rangle$. Wir suchen die Wahrscheinlichkeit, das System zur Zeit t im $H^{(0)}$ -Eigenzustand $|b\rangle$ zu finden:

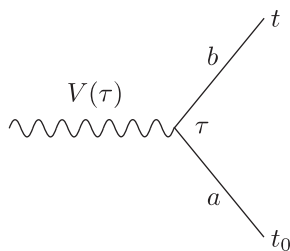
$$W_{a \rightarrow b}(t) = |\langle b|U(t, t_0)|a\rangle|^2 = \left| \sum_{n=1}^{\infty} \langle b|U^{(n)}(t, t_0)|a\rangle \right|^2$$

$$W_{a \rightarrow b}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t \exp(i\omega_{ba}\tau) V_{ba}(\tau) d\tau \right|^2$$

* Feynman-ähnliche Diagramme:

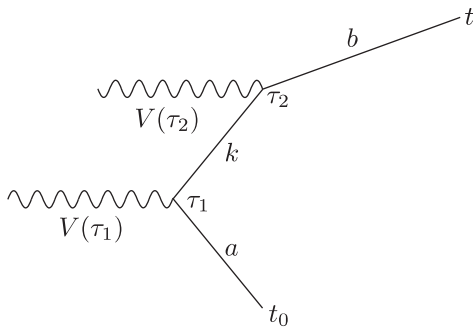
Betrachten wir die 1.Ordnung:

$$\langle b|U^{(1)}|a\rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_b^{(1)}(t - \tau)\right) V_{ba}(\tau) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_a^{(1)}(\tau - t_0)\right) d\tau \text{ „=“ } -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \text{ Diagramm 1}$$



Nun kommen wir zur 2.Ordnung:

$$\begin{aligned}
 \langle b|U^{(2)}|a\rangle &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_k \int_{t_0}^t d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_b^{(2)}(t - \tau_2)\right) V_{bk}(\tau_2) \cdot \\
 &\quad \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)}(\tau_2 - \tau_1)\right) V_{ka}(\tau_1) \exp\left(-iE_a^{(0)}(\tau_1 - t_0)\right) \text{ „=“} \\
 &\text{„=“ } \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_k \int_{t_0}^t d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \text{ Diagramm 2}
 \end{aligned}$$



Zusammenfassung:

Betrachten wir $H(t) = H^{(0)}(t) + V(t)$ und den Zustand im Wechselwirkungsbild $|\psi(t)\rangle_I = U_I(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle_I$. Der Entwicklungsoperator erfüllt die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0) \text{ mit } U_I(t_0, t_0) = \mathbf{1}$$

$$V_I(t) = U^{(0)\dagger}(t, t_0) V(t) U^{(0)}(t, t_0)$$

Wir lösen die SCHRÖDINGER-Gleichung iterativ:

$$U_I(t, t_0) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t_0)$$

$H^{(0)}$ sei zeitunabhängig. Die Übergangswahrscheinlichkeit von Zustand a nach Zustand b ist gegeben durch:

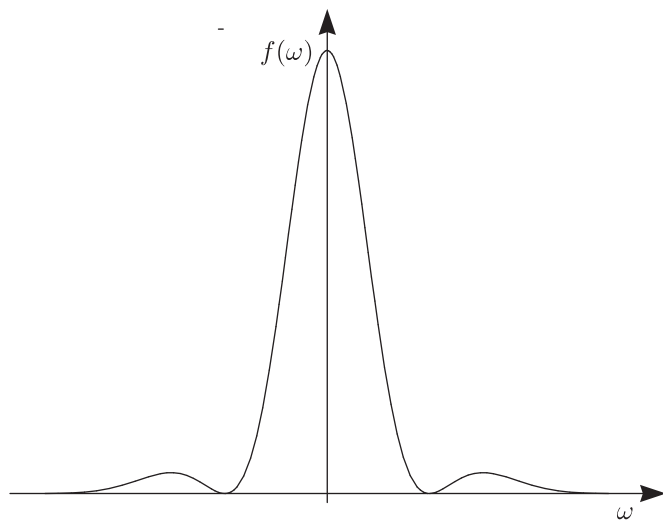
$$W_{a \rightarrow b} = |\langle b | U(t, t_0) | a \rangle|^2 = \left| \sum_n \langle b | U^{(n)}(t, t_0) | a \rangle \right|^2$$

$$W_{a \rightarrow b}^{(1)} = \hbar^2 \left| \int_{t_0}^t \exp(i\omega_{ba}\tau) V_{ba}(\tau) d\tau \right|^2 \text{ mit } \omega_{ab} \equiv \frac{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}{\hbar} \text{ und } V_{ab}(t) = \langle a | V(t) | b \rangle$$

10.2 Fermis Goldene Regel

Es sei $V = \text{const.}$ für $t > 0$ mit $t_0 = 0$:

$$W_{a \rightarrow b} \approx (V_{ba})^2 \frac{f(t, \omega_{ba})}{\hbar^2} \text{ mit } f(t, \omega) \equiv \left| \int_0^t \exp(i\omega\tau) d\tau \right|^2 = \frac{2 - 2 \cos(\omega t)}{\omega^2}$$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t, \omega) d\omega = 2\pi t$$

Betrachten wir Übergänge in eine Gruppe B von Zuständen $|b\rangle$ mit benachbarter Energie $E_b \pm dE$.

Lösung:

Es sei $\langle b|b'\rangle = \frac{\delta(b-b')}{n(b)}$ mit $n(b) \in \mathbb{R} > 0$.

$$P_B = \int_B |b\rangle n(b) db \langle b| = \int_{B(E)} |b\rangle \varrho_b(E) dE \langle b|$$

$\varrho_b(E)$ ist hierbei die Dichte der Niveaus b zur Energie E , also $\varrho_b(E) \equiv n(b) \frac{db}{dE}$. Dann ist die Wahrscheinlichkeit, vom Zustand a zu den Zuständen des Bereichs B zu gelangen, gegeben durch:

$$W_{a \rightarrow B} = \langle a|U^\dagger(t, 0)P_B P_B U(t, 0)|a\rangle = \int_{B(E)} W_{a \rightarrow b} \varrho_b(E) dE \text{ mit } P_B P_B = P_B$$

Es sei $E(b) = [E_1 - \frac{\varepsilon}{2}, E_1 + \frac{\varepsilon}{2}]$, t groß und $\varepsilon \gg \frac{2\pi\hbar}{t}$:

$$W_{a \rightarrow B} \approx \int |V_{ab}|^2 \varrho_b f(t, \omega_{ba}) \frac{dE}{\hbar^2} \underset{\text{Annahme}}{\approx} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ba}(E_a)|^2 \varrho_b(E_a) t$$

- Annahme ①: f ist maximal im Bereich.
- Annahme ②: V_{ba}, ϱ_b ist konstant.

- Annahme ③: $\int dE \mapsto \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega$

Damit erhalten wir FERMIS Goldene Regel:

$$w_{a \rightarrow B} \equiv \frac{dW_{a \rightarrow B}}{dt} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ba}|^2 \varrho_b$$

10.3 Bornscher Wirkungsquerschnitt

Wir betrachten die Streuung eines Teilchens an einem Potential $V(\vec{r})$ mit $H = H^{(0)} + V(\vec{r})$ und $H^{(0)} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$. Ebene Wellen $\exp(i\vec{k}_0 \vec{r})$ sind Eigenfunktionen von $H^{(0)}$, wobei $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ gilt. Es liegen folgende Zustände vor:

$$|\vec{k}\rangle \text{ mit } \langle \vec{k}, \vec{k}' | = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}') \text{ und } \int |\vec{k}\rangle \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \langle \vec{k}| = 1$$

Hieraus ergibt sich $\varrho(E) dE d^2\Omega = \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$. Es falle ein monoenergetischer Strahl mit dem Impuls $\hbar \vec{k}_a$ und der Energie $E_a = \frac{1}{2} m v_a^2$ ein. Gesucht ist der Streuquerschnitt in eine bestimmte Richtung. Dazu berechnen wir die Wahrscheinlichkeit, vom Zustand a nach B zu gelangen:

$$W_{a \rightarrow B} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k}_b | V | \vec{k}_a \rangle \right|^2 \varrho(E) d\Omega$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt berechnet sich nach:

$$d\sigma_{a \rightarrow b} \equiv \frac{w_{a \rightarrow b}}{v_a}$$

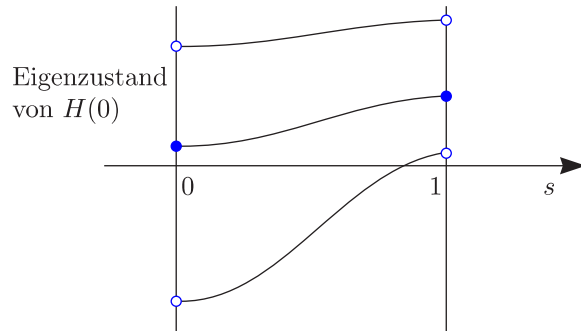
$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} \approx \frac{2\pi}{\hbar v_a} |V_{ab}|^2 \varrho_b(E) \text{ mit } V_{ab} = \int d^3 r \exp \left[i \left(\vec{k}_a - \vec{k}_b \right) \cdot \vec{r} \right] V(\vec{r})$$

10.4 Adiabatensatz

T sei die Zeit, in der sich der HAMILTON-Operator ändert. Durch $T = t_1 - t_0$ und mit dem Parameter $s = \frac{t-t_0}{T}$ läßt sich eine stetige Funktion $H(s)$ mit $H(0) = H_0$ und $H(1) = H_1$ definieren. Aus der Zeittranslationsinvarianz ergibt sich $U(t, t_0) \equiv U_T(s)$. Es gilt:

1.) $T \mapsto 0$: $\lim_{T \rightarrow 0} U_T(1) = 1$

2.) $T \mapsto \infty$: Adiabatensatz



Kapitel 11

Streutheorie II

- 1.) Formalismus für den einfachen Fall der Streuung eines Teilchens am Potential $V(\vec{r})$
- 2.) Allgemeine Eigenschaften, Unitarität, optisches Theorem, Mikroreversibilität

11.1 Streuamplitude

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m und der Energie $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Für dieses Teilchen liege folgender HAMILTON-Operator vor:

$$H = H_0 + V(\vec{r}) \text{ mit } H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

Des weiteren sollte $|\vec{r}|V(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ gewährleistet sein; damit ist das Coulombpotential von vorn herein ausgeschlossen. Im folgenden werden ebene Wellen mit φ und Eigenzustände von H mit ψ bezeichnet:

- 1.) $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$
- 2.) $\psi_{\vec{k}}^{(+)} \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \text{auslaufende Welle}$
- 3.) $\psi_{\vec{k}}^{(-)} \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \text{einlaufende Welle}$

Stationäre Streuzustände genügen der SCHRÖDINGER-Gleichung $H\psi_{\vec{k}}^{(+)} = E\psi_{\vec{k}}^{(+)}$:

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) + f_{\vec{k}}^{(+)}(\Omega) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{r}$$

$f_{\vec{k}}^{(+)}$ ist hierbei die Streuamplitude. Der differentielle Streuquerschnitt ist (nach MESSIAH) definiert nach:

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \left| f_{\vec{k}_a}^{(+)}(\Omega_b) \right|^2$$

$$\psi_{\vec{k}}^{(-)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) + f_{\vec{k}}^{(-)}(\Omega) \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{r}$$

$\psi_{\vec{k}}^{(-)}$ und $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ sind Basisfunktionen des HILBERT-Raums, welcher die Streuzustände beschreibt. Ω stehe für (ϑ, φ) .

Hilfssatz:

ξ und $\hat{\xi}$ seien die stationären Lösungen zu den Potentialen $U(\vec{r})$ und $\hat{U}(\vec{r})$. Konkret bedeutet dies:

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \hat{U}\right) |\hat{\xi}_b^{(-)}\rangle = E |\hat{\xi}_b^{(-)}\rangle \quad \text{und} \quad \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + U\right) |\xi_a^{(+)}\rangle = E |\xi_a^{(+)}\rangle$$

$$\hat{\xi}_b^{(-)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k}_b \cdot \vec{r}) + \hat{f}_b^{(-)}(\Omega) \frac{\exp(-ikr)}{r}$$

$$\xi_a^{(+)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r}) + f_a^{(+)}(\Omega) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

Und analoge Relationen gelten für $\xi_b^{(+)}$, $\xi_a^{(-)}$. Dann gilt:

$$\langle \hat{\xi}_b^{(-)} | (U - \hat{U}) | \xi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(f_a^{(+)}(\Omega_b) - \hat{f}_b^{(-)*}(-\Omega_a) \right), \quad \text{wobei } \Omega_b \text{ die Richtung von } \vec{k}_b \text{ und } -\Omega_a \text{ die Richtung von } -\vec{k}_a \text{ angibt wobei } \Omega_a = (\vartheta_a, \varphi_a) \text{ und } -\Omega_a = (\pi - \vartheta_a, \pi + \varphi_a) \text{ gilt.}$$

Beweis (Skizze, siehe Messiah II, 19.1.1):

$$\langle \xi_a^{(+)} | \frac{\vec{p}^2}{2m} + \hat{U} | \hat{\xi}_b^{(-)} \rangle = E \langle \xi_a^{(+)} | \hat{\xi}_b^{(-)} \rangle \quad (1)$$

$$\langle \hat{\xi}_b^{(-)} | \frac{\vec{p}^2}{2m} + U | \xi_a^{(+)} \rangle = E \langle \hat{\xi}_b^{(-)} | \xi_a^{(+)} \rangle \quad (2)$$

Wir führen naiv eine komplexe Konjugation von Gleichung (1) durch.

$$\langle \hat{\xi}_b^{(-)} | \frac{\vec{p}^2}{2m} + \hat{U} | \xi_a^{(+)} \rangle = E \langle \hat{\xi}_b^{(-)} | \xi_a^{(+)} \rangle$$

Dies führt jedoch zu keinem Ergebnis. Deshalb:

$$\langle \xi_a^{(+)} | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \hat{\xi}_b^{(-)} \rangle = \int d^3\vec{r} \xi_a^{(+)*}(\vec{r}) \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \Delta \hat{\xi}_b^{(-)}(\vec{r}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{|\vec{r}| \leq R} d^3\vec{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \xi_a^{(+)*}(\vec{r}) \Delta \hat{\xi}_b^{(-)}(\vec{r})$$

Wir subtrahieren nun Gleichung (1)* von Gleichung (2):

$$\langle \hat{\xi}_b^{(-)} | U - \hat{U} | \xi_a^{(+)} \rangle = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{|\vec{r}| \leq R} d^3\vec{r} \frac{\hbar^2}{2m} \left[\hat{\xi}_b^{(-)*} \Delta \xi_a^{(+)} - \xi_a^{(+)*} \Delta \hat{\xi}_b^{(-)} \right]$$

Es bleibt ein Oberflächenintegral, das im Limes $R \mapsto \infty$ mit dem asymptotischen Verhalten von ξ , $\hat{\xi}$ ausgewertet werden kann. Man findet:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{|\vec{r}| \leq R} d^3\vec{r} \left[\hat{\xi}_b^{(-)*} \Delta \xi_a^{(+)} - \left(\Delta \hat{\xi}_b^{(-)*} \right) \xi_a^{(+)} \right] = -4\pi \left[f_a^{(+)}(\Omega_b) - \hat{f}_b^{(-)*}(-\Omega_a) \right]$$

Dies war zu zeigen.

Folgerungen für die Streuung am Potential V :

1.) Integraldarstellung der Streuamplitude

$$\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a^{(+)}(\Omega_b)$$

$$\langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_b^{(-)*}(-\Omega_a)$$

2.) $f_a^{(+)}(\Omega_b) = f_b^{(-)*}(-\Omega_a)$

$$\langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$$

Beweis:

- 1.) Wähle im Hilfssatz $\hat{U} = 0$, $U = V$. ξ sind dann ebene Wellen $\hat{\xi}_b^{(-)} = \varphi_b = \exp(i\vec{k}_e \cdot \vec{r})$. Weiterhin gilt $\hat{f}^{(\pm)} = 0$, $\xi^{(+)} \mapsto \psi_a^{(+)}$.

$$\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a^{(+)}(\Omega_b)$$

- 2.) Wähle im Hilfssatz $U = \hat{U} = V$.

$$O = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(f_a^{(+)}(\Omega_b) - f_b^{(-)*}(\Omega_a) \right)$$

11.2 Die T-Matrix

Für den differentiellen Streuquerschnitt gilt nun:

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle \right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar v} \varrho(E) \left| \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle \right|^2 \quad \text{mit } v = \frac{\hbar k}{m} \quad \text{und } \varrho(E) = \frac{mk}{(2\pi)^3\hbar^2}$$

v ist hierbei die Geschwindigkeit der einlaufenden Teilchen. $\varrho(E)$ ist die Zustandsdichte.

11.2.1 Zustandsdichte

Wir beschreiben ebene Welle durch $|\vec{k}\rangle$ mit $\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$.

- 1.) Normierung: $\langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = (2\pi)^3 \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$

- 2.) Vollständigkeit: $\int d^3\vec{k} \frac{1}{(2\pi)^3} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}| = \mathbf{1}$

Wir definieren nun eine Zustandsdichte durch: $\frac{1}{(2\pi)^3} d^3\vec{k} = \varrho(E) dE d\Omega$. Mit $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$ erhalten wir:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} d^3\vec{k} = \frac{1}{(2\pi)^3} dk k^2 d\Omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k} dE k^2 d\Omega$$

Hieraus ergibt sich dann:

$$\varrho(E) = \frac{mk}{(2\pi)^3\hbar^2} \quad \text{mit } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{und } \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

Definiere den Übergangoperator T durch seine Matrixelemente $\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle$:

$$\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle := \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$$

Nach MESSIAH bezeichnet man $T_{a \rightarrow b} := \langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle$ als Übergangsamplitude. Damit läßt sich der Streuquerschnitt schreiben als:

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v_a} |T_{a \rightarrow b}|^2 \varrho(E)$$

11.3 Bornsche Näherung

Betrachten wir die 1.Ordnung im Potential V und ersetzen $\psi_a^{(+)}$ durch φ_n (oder anders):

$$T_{a \rightarrow b}^{\text{BORN}} = \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle = \int d^3\vec{r} \exp(-i\vec{k}_b \cdot \vec{r}) V(\vec{r}) \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r}) = \int d^3\vec{r} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) V(\vec{r}) = V(\vec{q}) \quad \text{wobei } \vec{q} = \vec{k}_b - \vec{k}_a$$

$\vec{q} = \vec{k}_b - \vec{k}_a$ ist der Impulsübertrag. In BORNscher Näherung entspricht die Übergangsamplitude gerade der Fouriertransformierten $V(\vec{q})$ des Potentials.

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |V(\vec{q})|^2$$

φ sei eine ebene Welle und wir schreiben:

$$\psi^\pm = \varphi + \begin{cases} \text{auslaufende Welle} \\ \text{einlaufende Welle} \end{cases}$$

$$H\psi_{\vec{k}_\alpha}^{(+)} = E\psi_{\vec{k}_\alpha}^{(+)} \text{ mit } \psi \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}) + f_{\vec{k}_\alpha}^{(+)}(\Omega) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

$$\langle \varphi_b | \psi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a^{(+)}(\Omega_b)$$

Der Ausdruck auf der linken Seite ist kein Matricelement, da φ_b eine Eigenfunktion des freien HAMILTON-Operators ist und $\psi_a^{(+)}$ eine Eigenfunktion des kompletten HAMILTON-Operators $H_0 + V$! Wir definieren einen Übergangoperator T durch $\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle \equiv \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$, wobei wir $\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle$ als Übergangsamplitude bezeichnen:

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v_a} |T_{a \rightarrow b}|^2 \varrho(E)$$

$$T_{a \rightarrow b}^{(\text{BORN})} = \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle$$

Wir definieren den Impulsübertrag als $\vec{q} \equiv \vec{k}_b - \vec{k}_a$ mit $q = 2k \sin(\frac{\theta}{2})$.

$$T_{a \rightarrow b}^{(\text{BORN})} = \int \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) V(r) d^3r = \tilde{V}(\vec{q})$$

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}^{(\text{BORN})}}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4}$$

11.4 Lippmann-Schwinger-Gleichung

Als erstes suchen wir die GREENSche Funktion F eines Teilchens mit der Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$G(\vec{r}, \vec{r}'$ sei die GREENSche Funktion dieses Operators. Man bezeichnet diese Gleichung auch als HELMHOLTZ-Gleichung (Theorie C). Die GREENSche Funktion G lautet:

$$G^\pm(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Für $k = 0$ erhält man gerade die POISSON-Gleichung und deren GREENSchen Funktion. Machen wir einen Fourieransatz, so erhalten wir:

$$(\Delta + k^2) \int \tilde{G}(q) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) d^3q = \int \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}) d^3q$$

Und daraus wiederum ergibt sich:

$$(-q^2 + k^2)\tilde{G}(q) = 1 \Rightarrow \tilde{G}(q) = \frac{1}{k^2 - q^2}$$

Damit folgt nun wieder mittels Fouriertransformation $G(x)$:

$$G(x) = \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\exp(iqx)}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} = \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ik|x|)}{|x|}$$

Betrachten wir nun wieder unsere ursprüngliche Gleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta + k^2)\psi = V\psi$$

Gesucht ist eine Lösung vom Typ $\psi^{(+)}$. Diese Lösung genügt einer Integralgleichung, nämlich der LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung:

$$\psi_a^{(+)} = \underbrace{\exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r})}_{\text{Homogene Lösung}} - \underbrace{\frac{m^2}{2\pi\hbar^2} \int \frac{\exp(+ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_a^{(+)}(\vec{r}') d^3r'}_{\text{die „partikuläre“ Lösung durch GREENfunktion } G^{(+)}}$$

Diese Gleichung ist exakt für alle Werte r . Was gilt nun asymptotisch, also für $r' \gg r$ (siehe Multipolentwicklung, Theorie C):

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = 2 \left[1 - 2 \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2} \right]^{\frac{1}{2}} \approx r - \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{r}'$$

Mit $\vec{k} = k \frac{\vec{r}}{r}$ ergibt sich:

$$\frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \approx \frac{\exp(ikr)}{r} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}')$$

Schließlich gilt folgende Näherungslösung:

$$\psi_a^{(+)} \approx \text{Ebene Welle} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \underbrace{\frac{\exp(ikr)}{r} \int \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}') V(\vec{r}') \psi^{(+)}(\vec{r}') d^3r'}_{\text{Streuamplitude}}$$

11.4.1 Bornsche Reihe für die stationäre Streuwelle

Man löst die LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung durch Iteration:

* 1.Ordnung:

$$\psi_1 = \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r}') d^3r'$$

* 2.Ordnung:

$$\psi_2 = \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_1(\vec{r}') d^3r'$$

Für die BORNsche Reihe gilt:

$$\begin{aligned} \psi_a^{(+)}(\vec{r}) &= \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r}) + \sum_{n=1}^{\infty} \int K_n(r, r') \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}') \text{ mit } K_1(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}'), K_n(\vec{r}, \vec{r}') = \\ &= \int K_1(\vec{r}, \vec{r}') K_{n-1}(\vec{r}', \vec{r}'') d^3r'' \end{aligned}$$

$B \mapsto a$ bis $n = 2$:

$$\psi = \exp(ikr) + \text{GV} \exp(ikr) + \text{GVGV} \exp(ikr)$$

$T_{a \rightarrow b} \equiv \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$ ist damit eine Entwicklung nach Potenzen von V . Bei der BORNschen Näherung $T_{a \rightarrow b}^{(B)}$ bricht man die Entwicklung ab bei $n \geq 2$. Wir schätzen den Fehler bei hohen Energie ab:

$$|\tilde{\psi}(\vec{r})| \equiv \left| \psi_a^{(+)}(\vec{r}) - \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{r}) \right| \ll 1 \text{ für } \vec{r} \text{ mit } V(\vec{r}) \neq 0$$

Für die Streuphasen im Falle $ka \gg 1$ gilt:

$$\tilde{\psi} \approx \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \exp(ikz) \cdot \left[\frac{2\pi i}{k} \int_{-\infty}^z V(k, y, z') dz' + \left(\frac{1}{k^2} \right) \right]$$

$$|\tilde{\psi}| \approx \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{2\pi}{k} 2a |V_0| \Rightarrow |V_0| \ll \frac{\hbar^2 k}{ma}$$

V_0 gibt eine mittlere Tiefe und a die Reichweite des Potentials an.

Resumé:

Es sei $H = H_0 + V$ und $|\varphi_n\rangle$ eine ebene Welle mit Wellenvektor \vec{k} , wobei $\langle \vec{x} | \varphi_n \rangle = \exp(i\vec{k}_n \cdot \vec{x})$ gilt. Die ein- und auslaufenden stationären Streuzustände bezeichnen wir mit $|\psi_n^{(-)}\rangle, |\psi_n^{(+)}\rangle$. Damit gilt dann:

$$\langle \vec{x} | \psi_a^{(+)} \rangle \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{x}) + f_{\vec{k}_a}^{(+)}(\Omega) \frac{\exp(i|\vec{k}_a||\vec{x}|)}{|\vec{x}|}$$

$$\langle \vec{x} | \psi_a^{(-)} \rangle \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\approx} \exp(i\vec{k}_a \cdot \vec{x}) + f_{\vec{k}_a}^{(-)}(\Omega) \frac{\exp(-i|\vec{k}_a||\vec{x}|)}{|\vec{x}|}$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt berechnet sich dann nach:

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} = \left| f_{\vec{k}_a}^{(+)}(\Omega) \right|^2 \left[\sigma(\Omega) \text{ statt } \frac{d\sigma}{d\Omega} \right]$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ergibt sich durch Integration über den Raumwinkel $d\Omega$:

$$\sigma_a^{tot} = \int \frac{d\sigma_{a \rightarrow b}}{d\Omega} d\Omega_b$$

Mit $\langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$ können wir die Streuamplitude formulieren:

$$f_a^{(+)}(\Omega) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle$$

11.5 Kanäle

Bei der Streuung gibt es folgende Reaktionstypen:

- 1.) Elastische Streuung: $A + X \mapsto A + X$

Der innere Zustand der Teilchen bleibt hierbei unverändert.

- 2.) Inelastische Streuung: $A + X \mapsto A' + X'$

Der innere Zustand (beispielsweise Spin) ändert sich bei dieser Art der Streuung.

- 3.) Umordnung und Teilchenerzeugung: $A + X \mapsto B + Y$

In der relativistischen Quantenmechanik kann es vorkommen, daß weitere Teilchen erzeugt werden: $A + X \mapsto B + Y + Z + \dots$ (beispielsweise Erzeugung von Teilchen und Antiteilchen). Dieser Fall ist formal nicht einfach zu beschreiben.

Jede Möglichkeit der Streuung in verschiedene innere Endzustände heißt ein Kanal.

$$\psi_a^{(+)} = \sum_b \psi_{a,b}^{(+)}(\vec{r}) W_b$$

Die Zustände spannen einen vollständigen Vektorraum auf:

$$\sum_b \frac{1}{(2\pi)^3} \int |\psi_{a,b}^{(+)}\rangle \langle \psi_{a,b}^{(+)}| d^3\vec{k}_a = \mathbf{1}$$

11.6 Greensche Funktion der Schrödinger-Gleichung

Die freie SCHRÖDINGER-Gleichung für H_0 lautet:

$$(E - H_0)|\varphi\rangle = 0 \text{ mit } H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Was uns aber interessiert, ist die SCHRÖDINGER-Gleichung für $H = H_0 + V$:

$$(E - H_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle$$

Formal ergibt sich dann hieraus:

$$|\psi\rangle = (E + H_0)^{-1} V|\psi\rangle + |\varphi\rangle$$

Leider existiert der Ausdruck $(E - H_0)^{-1}$ nicht. $H_0 - E$ ist also nicht invertierbar, da 0 ein Eigenwert von $H_0 - E$ ist! Infolgedessen definieren wir eine Resolvente $G_0(z) := (z - H_0)^{-1}$ mit $z \in \mathbb{C}$; $G_0(z)$ ist definiert, falls z kein Eigenwert von H_0 ist.

$$G_0^{(\pm)}(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} G_0(E \pm i\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E - H_0 \pm i\varepsilon)^{-1}$$

In der Ortsdarstellung können wir schreiben:

$$\langle \vec{x} | G^{(\pm)}(E) | \vec{x}' \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} =: G_0^{(\pm)}(\vec{x}, \vec{x}') \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$G_0^{(\pm)}$ sind GREENSCHE Funktionen des freien SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta + k^2) G_0^{(\pm)}(\vec{x}, \vec{x}') = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

Betrachten wir die LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung:

$$|\psi_a^{(+)}\rangle = |\varphi_a\rangle + G_0^{(+)}(E_0)V|\psi_a^{(+)}\rangle$$

Analog gilt:

$$|\psi_a^{(-)}\rangle = |\varphi_a\rangle + G_0^{(-)}(E_0)V|\psi_a^{(-)}\rangle$$

Die Resolvente des vollen HAMILTON-Operators lautet:

$$G(z) := (z - H)^{-1}$$

$$G^{(\pm)}(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E \pm i\varepsilon - H)^{-1}$$

$$\boxed{|\psi_a^{(+)}\rangle = |\varphi_a\rangle + G^{(+)}(E_a)V|\varphi_a\rangle}$$

Diese Beziehung wollen wir überprüfen, indem wir von links mit $E_a - H$ multiplizieren:

$$(E_a - H)|\psi_a^{(+)}\rangle = \underbrace{(E_a - H_0)|\varphi_a\rangle}_{=0} - V|\varphi_a\rangle + \underbrace{(E_a - H)G^{(+)}(E_a)V|\varphi_a\rangle}_{=1} = 0$$

Dies ist eine wahre Aussage.

$$G^{(+)}(E_a)V|\varphi_a\rangle = G_0^{(+)}(E_a)V|\psi_a^{(+)}\rangle = G_0^{(+)}(E_a)V|\varphi_a\rangle + G_0^{(+)}(E_a)V G^{(+)}(E_a)V|\varphi_a\rangle$$

$$\boxed{G^{(+)}V = G_0^{(+)}V + G_0^{(+)}V G^{(+)}V}$$

11.6.1 Übergangoperator

$$\langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle = \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle + \langle \varphi_b | V G^{(+)} V | \varphi_a \rangle$$

Der Übergangoperator T ist definiert durch:

$$\boxed{T = V + V G^{(+)} V}$$

Damit haben wir folgende iterative Lösung:

$$T = V + V G_0^{(+)} V + V G_0^{(+)} V G^{(+)} V$$

$$T = V + V G_0^{(+)} V + V G_0^{(+)} V G_0^{(+)} V G^{(+)} V + \dots$$

Satz:

$$\boxed{\text{Es gilt } T - T^\dagger + 2\pi i T^\dagger T = 0 \text{ und } T - T^\dagger + 2\pi i T T^\dagger = 0.}$$

Beweis:

$$T = V + VG^{(+)}V \text{ und } T^\dagger = V + V^{(-)}V$$

$$T - T^\dagger = V \left(G^{(+)} - G^{(-)} \right) V = V \left(\frac{1}{E - H + i\varepsilon} - \frac{1}{E - H - i\varepsilon} \right) V = V \left(\frac{E - H - i\varepsilon - E + H - i\varepsilon}{(E - H)^2 + \varepsilon^2} \right) V$$

Wir führen den Grenzübergang $i\varepsilon \mapsto 0$ formal durch:

$$T - T^\dagger = V \cdot (-2\pi i) \cdot \delta(E - H)V$$

Aufgrund der Vollständigkeit der Basis können wir ein Einselement $\mathbf{1}$ einschieben:

$$\mathbf{1} = (2\pi)^3 \sum_n |\psi_n^{(-)}\rangle \langle \psi_n^{(-)}|$$

$$\langle \varphi_b | T - T^\dagger | \varphi_a \rangle = (2\pi)^3 \sum_n \langle \varphi_b | V | \psi_n^{(-)} \rangle \delta(E - E_n) \langle \psi_n^{(-)} | V | \varphi_a \rangle \cdot (-2\pi i)$$

Wir führen einen weiteren Grenzübergang „Summe \mapsto Integral“ durch:

$$(2\pi)^3 \sum_n \mapsto \frac{1}{(2\pi)^3} \int |\psi_a^{(-)}\rangle \langle \psi_n^{(-)}| d^3 \vec{k}_n$$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} d^3 \vec{k} = \varrho(E) dE d\Omega$$

Damit erhalten wir weiter:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b | T - T^\dagger | \varphi_a \rangle &= -2\pi i \int dE_n d\Omega_n \varrho(E_n) \langle \varphi_b | V | \psi_n^{(-)} \rangle \delta(E_a - E_n) \langle \psi_n^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = \\ &= -2\pi i \int d\Omega_n \varrho(E_a) \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(-)} \rangle \langle \psi_n^{(-)} | V | \varphi_a \rangle \text{ wobei } E_n = E_a \end{aligned}$$

$$\langle \varphi_b | V | \psi_n^{(-)} \rangle = \langle \psi_b^{(+)} | V | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_b | T^\dagger | \varphi_n \rangle$$

$$\langle \psi_n^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_n | V | \psi_a^{(+)} \rangle = \langle \varphi_n | T | \varphi_a \rangle$$

Schlußendlich erhalten wir unsere Aussage:

$$\boxed{T - T^\dagger = -2\pi i T^\dagger T}$$

Satz:

$$\boxed{\text{Der } S\text{-Operator } S := \mathbf{1} - 2\pi i T \text{ ist unitär.}}$$

Beweis:

Nach unserem letzten Satz gilt:

$$S^\dagger S = \mathbf{1} + \underbrace{2\pi i T^\dagger - 2\pi i T + 4\pi^2 T^\dagger T}_{=0} = \mathbf{1}$$

Für die S -Matrix gilt $\langle \varphi_b | S | \varphi_a \rangle = \langle \psi_b^{(-)} | \psi_a^{(+)} \rangle$.

11.7 Optisches Theorem

Der totale Wirkungsquerschnitt σ_a^{tot} hängt mit der Streuamplitude $f_a(0)$ in Vorwärtsrichtung folgendermaßen zusammen:

$$\boxed{\sigma_a^{tot} = \frac{4\pi}{k_a} \text{Im} f_a(0)}$$

Beweis:

Betrachten wir nochmals den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{d\sigma_{a \rightarrow v}}{d\Omega} = \left(\frac{2\pi}{\hbar v} \right) \varrho(E) |\langle b|T|a \rangle|^2 \quad \text{mit } \varphi_b := b \text{ und } \varphi_a := a$$

Hieraus folgt der totale Wirkungsquerschnitt durch Integration über den Raumwinkel Ω :

$$\sigma_a^{tot} = \int \left(\frac{d\sigma_{a \rightarrow v}}{d\Omega} \right) d\Omega_b = \frac{2\pi}{\hbar v} \int \varrho(E_b) \langle a|T^\dagger \underbrace{|b\rangle\langle b|}_{=1} T|a \rangle d\Omega_b = \frac{2\pi}{\hbar v} \langle a|T^\dagger T|a \rangle$$

Mit unserem vorherigen Sätzen ergibt sich dann weiter:

$$\frac{2\pi}{\hbar v} \langle a|T^\dagger T|a \rangle = \frac{2\pi}{\hbar v} \cdot \left(-\frac{1}{2\pi i} \right) \langle a|(T - T^\dagger)|a \rangle = \frac{2\pi}{\hbar v} \cdot \left(-\frac{1}{2\pi i} \right) \cdot 2\pi \text{Im}(\langle a|T|a \rangle) = -\frac{2}{\hbar v} \text{Im}(\langle a|T|a \rangle) = \frac{4\pi}{k_a} \text{Im}f_a(0)$$

Kapitel 12

CPT-Symmetrie

12.1 Experimentelle Entdeckungen

1.) Paritätsverletzung:

Wir betrachten einen massiven Einteilchenzustand $\psi_{\vec{k},\sigma}$. Hierbei gilt für den Paritätsoperator $P\psi_{\vec{k},\sigma} = \eta\psi_{-\vec{k},\sigma}$, wobei man η als intrinsische Parität bezeichnet. Die starke Wechselwirkung ist paritätserhaltend; also kommutiert $H = H_0 + H_I^{stark}$ mit P : $[P, H_I^{stark}] = 0$. Für die Teilchen π^\pm, π^0 gilt $\eta = -1$; man bezeichnet diese als pseudo-skalare Teilchen.

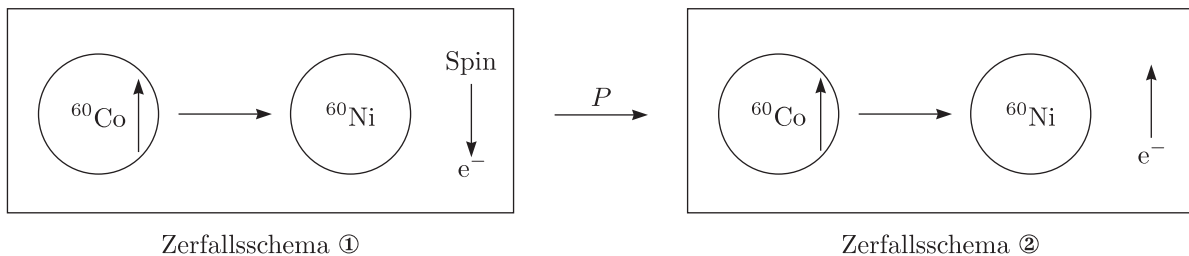
2.) Man hat zwei seltsame Spin-Null-Teilchen gefunden, welche man als τ^\pm und θ^\pm bezeichnet hat.

Zerfallskanal	Masse [m_e]	Zerfallszeit t [s]
$\theta^+ \mapsto \pi^+\pi^0$	$966,7 \pm 2,0$	$1,21 \pm 0,002 \cdot 10^{-8}$
$\tau^+ \mapsto \pi^+\pi^+\pi^-$	$966,3 \pm 2,0$	$1,19 \pm 0,05 \cdot 10^{-8}$

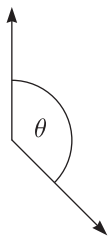
Die Unterschiede zwischen diesen Teilchen sind sehr klein. Aus dem Zerfall $\tau = \pi\pi\pi$ erhält man eine intrinsische Parität $\eta(\tau) = -1$ und aus $\theta \mapsto \pi\pi$ folgt $\eta(\theta) = +1$. Einerseits sind die Teilchen τ und θ in ihren physikalischen Eigenschaften fast gleich, andererseits unterscheiden sie sich aber in der intrinsischen Parität. LEE und YANG fanden im Jahre 1956 eine Lösung für dieses Problem. In bezug auf die schwache Wechselwirkung ist die Parität nicht erhalten; es gilt also $[H_I^{schwach}, P] \neq 0$ und $\theta^\pm = \tau^\pm$.

3.) Experiment von WU et al. im Dezember 1956

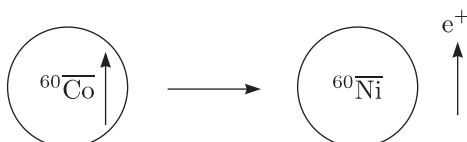
In diesem Experiment wurde der Zerfall $^{60}\text{Co} \xrightarrow{\beta} ^{60}\text{Ni} + e^- + \bar{\nu}_e$ untersucht. Hierbei gilt $\vec{p} \xrightarrow{P} \vec{p}$ und $\vec{s} \xrightarrow{P} -\vec{s}$.



Das erste Schema wurde tatsächlich von WU et al. beobachtet, aber das zweite nicht. Bei der schwachen Wechselwirkung kann also die Parität verletzt werden.



Wenn man nun eine CP-Transformation durchführt, könnte man folgenden Zerfall beobachten:



Im Jahre 1964 wurde aber herausgefunden, daß CP im $K^0\bar{K}^0$ -System verletzt ist. Es liegt aber immer noch CPT-Erhaltung vor!

$$\frac{M_{K^0} - M_{\bar{K}^0}}{m_{K^0} + m_{\bar{K}^0}} \lesssim 2 \cdot 10^{-18}$$

12.2 Zeitumkehrinvarianz

Wir wenden den Zeitumkehroperator T an:

$$T [\langle \psi^{aus}(t_f) | \phi^{ein}(t_i) \rangle] = \langle \phi^{ein}(t_f) | \psi^{ein}(t_i) \rangle$$

Für $|\psi^{ein}(t_i)\rangle = |K_0^{ein}(t_i)\rangle$ und $\langle \phi^{aus}(t_f)| = \langle \bar{K}_0^{aus}(t_f)|$ gilt:

$$\left| \langle \bar{K}_0^{aus}(t_f) | K_0^{ein}(t_i) \rangle \right|^2 = \left| \langle K_0^{aus}(t_f) | \bar{K}_0(t_i) \rangle \right|^2$$

Das Ziel ist es, die Raten für $K_0 \mapsto \bar{K}_0$ und $\bar{K}_0 \mapsto K_0$ zu bestimmen:

$$A_T \equiv \frac{P(\bar{K}_0 \mapsto K_0) - P(K_0 \mapsto \bar{K}_0)}{P(\bar{K}_0 \mapsto K_0) + P(K_0 \mapsto \bar{K}_0)}$$

$$A_T^{exp}(\tau) \equiv \frac{R[\bar{K}_0(t=0) \mapsto e^+ \pi^- \nu(t=\tau)] - R[K^0(t=0) \mapsto e^-(t=0) \mapsto e^- \pi^+ \bar{\nu}(t=\tau)]}{R[\bar{K}_0(t=0) \mapsto e^+ \pi^- \nu(t=\tau)] + R[K^0(t=0) \mapsto e^-(t=0) \mapsto e^- \pi^+ \bar{\nu}(t=\tau)]} =$$

$$= \text{const. für } \tau \in [\tau_s, 20\tau_s] = (6, 6 \pm 1, 3_{stat} \pm 1, 0_{syst}) \cdot 10^{-3}$$

Dies führt zur T-Erhaltung bei 4σ .

$$p\bar{p} \mapsto K^- \pi^+ K^0$$

$$p\bar{p} \mapsto K^+ \pi^- \bar{K}^0$$

$$\begin{array}{|c|} \hline 50 K^0 \\ \hline 50 \bar{K}^0 \\ \hline \end{array} \mapsto \begin{array}{|c|} \hline 40 K^0 + 10 \bar{K}^0 \\ \hline 30 \bar{K}^0 + 20 K^0 \\ \hline \end{array} = [\dots] \mapsto \begin{array}{|c|} \hline 60 e^+ \\ \hline 40 e^- \\ \hline \end{array}$$