

MITSCHRIEB ZUR VORLESUNG: THEORETISCHE PHYSIK E: QUANTENMECHANIK II

Prof. Dr. Dieter Zeppenfeld

Vorlesung Wintersemester 2004/2005

Letzte Aktualisierung und Verbesserung: 20. Februar 2005

Mitschrieb der Vorlesung THEORETISCHE PHYSIK E: QUANTENMECHANIK II
von Herrn Prof. Dr. DIETER ZEPPENFELD im Wintersemester 2004/2005
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	Einführung	5
1.1	Notation	5
1.2	Messprozess	5
1.3	Basiswechsel	5
1.4	Zeitentwicklung	6
1.4.1	Zeitabhängige Potentiale	6
1.4.2	Beispiel: 2-Niveau-System mit harmonischem Potential	8
1.4.3	Beispiel: Spin-1/2-Elektron im externen B -Feld	9
1.4.4	Beispiel: Konstante Störung	11
1.4.5	Beliebige zeitabhängige Potentiale	13
1.5	Wechselwirkung mit klassischem Strahlungsfeld	14
1.5.1	Elektrische Dipol-Approximation	15
1.5.2	Summenregel	16
1.6	Strahlung mit Materie	17
1.6.1	Photoelektrischer Effekt	18
1.6.2	Totaler Absorptions-Wirkungsquerschnitt	18
1.6.3	Adiabatisches Einschalten	20
2	Rotationssymmetrische Systeme	23
2.1	Drehungen	23
2.2	Darstellungen von Gruppen und LIE-Algebren	24
2.2.1	Transformation von Zuständen unter Drehungen	26
2.3	Alternative Parametrisierung von Drehungen über EULER-Winkel	26
2.4	Addition von Drehimpulsen	26
2.5	Gruppentheorie	27
2.5.1	Unterschiede: Lie-Algebra – Lie-Gruppe	28
2.6	Rotationssymmetrische Systeme	29
2.6.1	Eigenzustände der Drehimpulsoperatoren	29
2.7	Anwendung: 2-Nukleon-System mit Spin 1/2	32
2.7.1	Fermionen mit Bahndrehimpuls l	33
2.8	Produkte von Darstellungsmatrizen $\mathcal{D}_{m,m'}^{(j)}(\vec{\omega})$	34
2.9	Vektor/Tensor-Operatoren	34
2.10	Matrixelemente von Tensoroperatoren	36
2.11	Wigner-Eckart-Theorem	36
2.11.1	Projektionstheorem	37
2.12	Projektionstheorem: Matrixelement eines Vektoroperators	37
3	Streuprozesse	39
3.1	Einführung	39
3.2	Formale Streutheorie	41
3.2.1	Lokales Potential	45
3.2.2	Wirkungsquerschnitt	46
3.3	BORNsche Näherung	46

3.3.1	Beispiel: YUKAWA-Potential	47
3.3.2	COULOMB-Fall	48
3.4	Übergangoperator (Transitionsoperator) T	48
3.5	Optisches Theorem	49
3.6	Streuung und Rotationssymmetrie	50
3.6.1	Unitarität	52
3.7	Bestimmung von Streuphasen	55
3.7.1	Sphärische BESSEL- und NEUMANN-Funktionen	55
3.7.2	Streuung an harter Kugel	56
3.7.3	Resonanzstreuung	58
3.8	Pfadintegrale	59
3.8.1	Beispiel: Freies Teilchen	61
4	Relativistische Quantenmechanik	63
4.1	Notation: Vierervektoren	63
4.1.1	Rapidity	64
4.1.2	Inneres Produkt zweier Vierervektoren	64
4.1.3	Definition der Viererableitungen	65
4.2	Verallgemeinerung der SCHRÖDINGER-Gleichung	65
4.2.1	Wahrscheinlichkeitsinterpretation der KLEIN-GORDON-Gleichung	66
4.2.2	Lösung der KLEIN-GORDON-Gleichung	66
4.3	Die DIRAC-Gleichung	67
4.4	Elektromagnetische Wechselwirkung und DIRAC-Gleichung	70
4.5	Nichtrelativistischer Limes	70
4.5.1	Relativistische Korrekturen	72
4.6	DIRAC-Gleichung und LORENTZ-Transformation	74
4.6.1	Beispiel: Ebene Wellen	75
4.7	DIRAC-Gleichung und LORENTZ-Transformation	76
4.7.1	LORENTZ-Transformationsmatrizen für Spinoren	77
4.7.2	Transformation des Wahrscheinlichkeitsstroms	77
4.8	Allgemeiner Fall	77
4.8.1	Eigenschaften von γ_5	78
4.8.2	Parität als LORENTZtransformation	78
4.8.3	Anwendung: β -Zerfall	79
4.9	Drehungen von Spinoren	80
4.10	Ebene-Wellen-Lösungen	80
4.11	Löcher-Theorie, DIRAC-See	82
4.11.1	Freie (Anti-)Fermionen	83
4.11.2	u- und v-Spinoren	83
4.11.3	Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte	84
4.11.4	Ladungskonjugation	84
4.12	Drehimpuls und DIRACgleichung	85
4.12.1	Beispiel: Konstantes \vec{B} -Feld	86
4.13	Quantisierung des elektromagnetischen Feldes	87
4.13.1	Freies Strahlungsfeld	88
4.14	HILBERT-Raum für Strahlungsfeld	90
4.14.1	Teilchenzahloperator	92
4.14.2	Operator \Leftrightarrow Parameter	92
4.15	Grenzübergang zum unendlichen Volumen	92
4.15.1	Wechselwirkung von Strahlung mit Materie	93
4.16	Störungstheorie	95
4.17	Lebensdauer eines angeregten atomaren Zustands	96
4.17.1	Beispiel: Atomarer Wasserstoff	97
4.18	PLANCKSche Strahlungsformel	98

Kapitel 1

Einführung

1.1 Notation

Zustände wollen wir im folgenden mit $|c\rangle$, $|n\rangle$, ... bezeichnen; es handelt sich dabei um Vektoren im HILBERTRaum \mathcal{H} . Das innere Produkt dieses Raumes besitzt die Eigenschaft $\langle a|b\rangle = \langle a||b\rangle = \langle b|a\rangle^*$. Ist ein Operator A hermitesch, so handelt es sich um eine Observable, andererseits muss eine Observable hermitesch sein. Normierte Eigenzustände $|a_n\rangle$ von A bilden eine Orthonormalbasis von \mathcal{H} . Es gilt also:

1.) Normierung: $\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm}$

2.) Vollständigkeit: $\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = \mathbf{1}$

$$|c\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle = \sum_n \underbrace{|a_n\rangle\langle a_n|}_{\mathbf{1}} |c\rangle \text{ mit } c_n = \langle a_n|c\rangle$$

Beispiel:

X sei der Ortsoperator und $|x\rangle$ ein Eigenzustand dieses Operators: $X|x\rangle = x|x\rangle$.

1.) Orthogonalität: $\langle x_1|x_2\rangle = \delta(x_1 - x_2)$

2.) Vollständigkeit: $\int dx |x\rangle\langle x| = \mathbf{1}$

Die **Wellenfunktion** für den Zustand $|c\rangle$ lautet:

$$|c\rangle = \int dx |x\rangle\langle x|c\rangle \text{ mit } \langle x|c\rangle = \psi(x)$$

1.2 Messprozess

Ein System befinde sich in einem Zustand $|c\rangle$. Die Messung von A ergibt einen der Eigenwerte a_n von A mit der Wahrscheinlichkeit $P_n = |\langle a_n|c\rangle|^2$. Nach der Messung ist das System im Zustand $|a_n\rangle$. Betrachten wir folgendes Beispiel: $|\psi(x)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ zu finden.

1.3 Basiswechsel

$\{|a_n\rangle\}$ und $\{|b_n\rangle\}$ seien Basen:

$$|a_n\rangle = \sum_m |b_m\rangle\langle b_m|a_n\rangle \text{ mit } U_{mn} = \langle b_m|a_n\rangle$$

$$\sum_k U_{mk} \underbrace{(U^\dagger)_{kn}}_{U_{nk}^*} = \sum_k \langle b_m | a_k \rangle \underbrace{\langle b_n | a_k \rangle^*}_{\langle a_k | b_n \rangle} = \left\langle b_m \left| \sum_k |a_k\rangle \langle a_k| b_n \right. \right\rangle = \delta_{mn}$$

(U_{mn}) ist eine **unitäre Matrix**.

$$U = \sum_{n,m} |a_m\rangle \underbrace{U_{mn}}_{\langle b_m | a_n \rangle} \langle a_n| = \sum_m |a_m\rangle \langle b_m| \underbrace{\sum_n |a_n\rangle \langle a_n|}_1 = \sum_m |a_m\rangle \langle b_m|$$

Eine unitäre Transformation vollzieht einen Übergang von der einen in die andere Basis.

1.4 Zeitentwicklung

Die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems ist gegeben durch den HAMILTON-Operator H im SCHRÖDINGER-Bild:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |c, t\rangle = H |c, t\rangle$$

Falls H zeitunabhängig ist kann man die Zeitentwicklung durch einen unitären Operator beschreiben. Der Operator muss unitär sein, damit Wahrscheinlichkeiten, das System in irgendeinem Zustand zu finden, erhalten bleiben.

$$|c, t\rangle = \underbrace{\exp\left(-i \frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)}_{U(t,t_0)} |c, t_0\rangle$$

Allgemein wird die Zeitentwicklung beschrieben durch einen unitären Operator $U(t, t_0)$ so, dass $|c, t\rangle = U(t, t_0) |c, t_0\rangle$.

1.4.1 Zeitabhängige Potentiale

Der HAMILTON-Operator H lasse sich beschreiben als Summe aus einem HAMILTON-Operator H_0 , dessen Eigenwerte und Eigenzustände bekannt seien (das Eigenwertproblem $H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$ sei also gelöst) und eines zusätzlichen zeitabhängigen Potentials $V(t)$, also als $H = H_0 + V(t)$. Gesucht sind nun Übergangswahrscheinlichkeiten von Eigenzuständen $|n\rangle$ nach Zuständen $|m\rangle$. Wir setzen an dieser Stelle der Einfachheit halber $t_0 = 0$, lässt sich ein Zustand $|\alpha\rangle$ folgendermaßen entwickeln:

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(0) |n\rangle$$

Zu einem späteren Zeitpunkt $t > 0$ sieht diese Entwicklung folgendermaßen aus:

$$|\alpha, t\rangle = \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle$$

Die Zeitabhängigkeit von $c_n(t)$ kommt also nur von der Störung $V(t)$. Die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t den Eigenzustand $|n\rangle$ zu finden, ergibt sich aus $|c_n(t)|^2$. Wir wollen die Zustände im Wechselwirkungsbild beschreiben.

1.) SCHRÖDINGER-Bild:

Der Zustand zur Zeit $t = 0$ sei $|\alpha\rangle$ und der Ket im SCHRÖDINGER-Bild sei $|\alpha, t\rangle_S$. In diesem Bild sind Zustände zeitabhängig und Observable A zeitunabhängig.

2.) HEISENBERG-Bild:

Zustände und Operatoren unterliegen einer unitären Transformation durch den Zeitentwicklungsoperator:

$$|\alpha, t\rangle_H = U^{-1}(t, t_0)|\alpha, t\rangle_S = |\alpha, t_0 = 0\rangle_S$$

Zustände sind also komplett zeitunabhängig. Observable werden folgendermaßen transformiert:

$$A_H = U^{-1}(t, t_0)A_S U(t, t_0)$$

Damit ergibt sich die sogenannte HEISENBERG-Gleichung:

$$\boxed{\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H] \underbrace{\left(+U^{-1} \frac{\partial A_S}{\partial t} U \right)}_{\frac{\partial A_H}{\partial t}}}$$

Der letzte Term fällt nur dann nicht weg, wenn eine explizite Zeitabhängigkeit von A_H vorliegt.

3.) Wechselwirkungsbild:

Hier sind sowohl Zustände als auch Observablen zeitabhängig:

$$|\alpha, t\rangle_I = \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) |\alpha, t\rangle_S$$

$$A_I = \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) A_S \exp\left(-\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)$$

Schauen wir uns die Zeitabhängigkeit von Zuständen im Wechselwirkungsbild an:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) |\alpha, t\rangle_S \right] = -H_0 \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) |\alpha, t\rangle_S + \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) \cdot \underbrace{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_S}_{(H_0 + V_S(t))|\alpha, t\rangle_S} = \\ &= \underbrace{\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) V_S(t) \exp\left(-\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)}_{V_I(t)} \cdot \underbrace{\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) |\alpha, t\rangle_S}_{|\alpha, t\rangle_I} \end{aligned}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I = V_I(t) |\alpha, t\rangle_I}$$

Die zeitliche Entwicklung von Observablen ist gegeben durch:

$$\boxed{\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_I, H_0]}$$

Wir vergleichen nun die zeitliche Entwicklung im HEISENBERG-Bild, Wechselwirkungsbild und SCHRÖDINGER-Bild:

	HEISENBERG-Bild	Wechselwirkungsbild	SCHRÖDINGER-Bild
Zustände (Kets)	Konstant	Zeitliche Entwicklung durch $V(t)$	Zeitliche Entwicklung durch H_0
Operator	Zeitliche Entwicklung durch $H = H_0 + V$	Zeitliche Entwicklung durch H_0	Konstant

Die Zeitentwicklung eines Zustandes im SCHRÖDINGER-Bild sieht dann folgendermaßen aus:

$$|\alpha, t\rangle_S = \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle$$

Gehen wir nun ins Wechselwirkungsbild:

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle_I &= \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) |n\rangle = \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle = \\ &= \sum_n c_n(t) |n\rangle \text{ mit } c_n(t) = \langle n | \alpha, t \rangle_I \end{aligned}$$

Schreiben wir die SCHRÖDINGER-Gleichung unter Ausnutzung der Vollständigkeit der Basis $\{|m\rangle\}$ auf:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\langle n | \alpha, t \rangle_I}_{c_n(t)} &= \sum_m \langle n | V_I(t) | m \rangle \langle m | \alpha, t \rangle_I = \sum_m \left\langle n \left| \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) V(t) \exp\left(-\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) \right| m \right\rangle c_m(t) = \\ &= \sum_m \left\langle n \left| \exp\left(\frac{iE_n t}{\hbar}\right) V(t) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \right| m \right\rangle c_m(t) = \sum_m \exp\left[\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}\right] \langle n | V(t) | m \rangle c_m(t) \end{aligned}$$

Unter Verwendung der Abkürzungen

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} = -\omega_{nm}, \quad V_{nm} = \langle n | V(t) | m \rangle$$

erhalten wir schließlich:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = \sum_m \exp(i\omega_{nm} t) V_{nm} c_m(t)}$$

Diese Gleichung kann nur bei einigen speziellen Problemen analytisch gelöst werden.

1.4.2 Beispiel: 2-Niveau-System mit harmonischem Potential

Betrachten wir den HAMILTON-Operator H_0 in der Matrixdarstellung; in der Energiebasis ist diese Matrix dann diagonal:

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \text{ für } E_1 < E_2$$

$V(t)$ soll ein hermitescher Operator sein; wir schreiben deshalb:

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \hbar\gamma \exp(i\omega t) \\ \hbar\gamma \exp(-i\omega t) & 0 \end{pmatrix}$$

Gesucht ist genau:

$$|\alpha, t\rangle_I = \sum_{n=1}^2 c_n(t) |n\rangle$$

Werten wir explizit unsere Differentialgleichung für dieses Problem aus, wobei wir nur $V_{12} = \hbar\gamma \exp(i\omega t)$ berücksichtigen müssen:

$$\boxed{i\hbar \dot{c}_1(t) = \hbar\gamma \exp(i\omega t) \exp(i\omega_{12} t) c_2(t)}$$

Die andere Gleichung lautet analog:

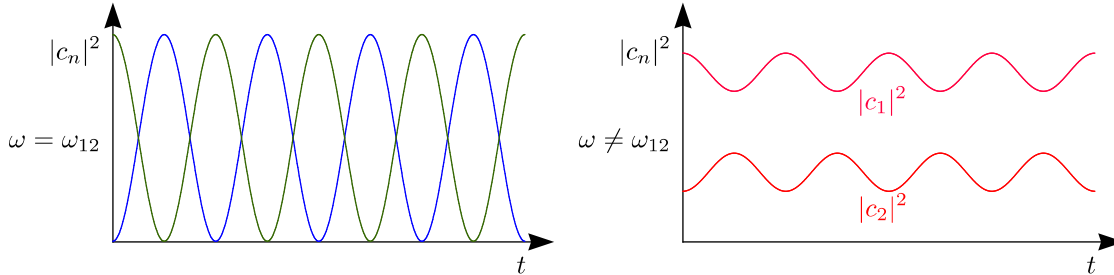
$$\boxed{i\hbar \dot{c}_2(t) = \hbar\gamma \exp(-i\omega t) \exp(-i\omega_{12} t) c_1(t)}$$

Zur Lösung dieses Differentialgleichungssystem machen wir den Ansatz $c_n(t) = \exp(i\lambda_n t) c_n(0)$. Mit den Anfangsbedingungen $c_1(0) = 1$ und $c_2(0) = 0$ erhalten wir folgende Lösungen:

$$\boxed{c_2(t) = -\frac{i\gamma}{\Omega} \cdot \sin(\Omega t) \cdot \exp(-i(\omega - \omega_{21})t) \text{ mit } \Omega = \sqrt{\gamma^2 + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$$

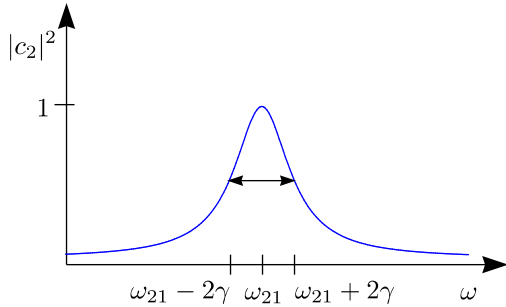
Was ist nun die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand $|n = 2\rangle$ zu finden? Dazu müssen wir den Zustand $|2\rangle$ auf $|\alpha, t\rangle_I$ projizieren und das Betragsquadrat bilden:

$$|\langle 2|\alpha, t\rangle_I|^2 = |c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} \sin^2(\Omega t), \quad |c_1|^2 = 1 - |c_2|^2 \text{ mit } \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} > 0$$



Was ist die maximale Wahrscheinlichkeit, $|2\rangle$ zu finden?

$$|c_2|_{max}^2 = \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$$



Dies ist eine typische Resonanz; das Maximum liegt bei $\omega = \omega_{21}$. Außerdem gilt $|c_2|_{max}^2 = \frac{1}{2}$ für $|\omega - \omega_{21}| = 2\gamma$. Damit ergibt sich eine Halbwertsbreite von 4γ .

1.4.3 Beispiel: Spin-1/2-Elektron im externen B-Feld

Angenommen, wir haben das Magnetfeld $\vec{B} = B_0\hat{z} + B_1(\hat{x}\cos(\omega t) + \hat{y}\sin(\omega t))$. Der HAMILTON-Operator des Systems lautet $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ mit $\vec{\mu} = \frac{e}{m_e}\vec{S}$ oder anders (mit den PAULI-Matrizen) geschrieben: $\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e}\vec{\sigma}$.

$$H = -\frac{e\hbar}{2m_e} \cdot B_0 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{e\hbar}{2m_e} \cdot B_1 \cdot \left[\cos(\omega t) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin(\omega t) \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] =$$

$$= \begin{pmatrix} E_2 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} + \hbar\gamma \cdot \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\omega t) \\ \exp(i\omega t) & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } \omega_{21} = \frac{|e|}{m_e}B_0, \quad \gamma = \frac{|e|B_1}{2m_e} \text{ und } \cos(\omega t) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \sin(\omega t) \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\omega t) \\ \exp(i\omega t) & 0 \end{pmatrix}$$

Unser Ziel ist nun, den Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)_I$ für $[V(t), V(t')] \neq 0$ herzuleiten.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I = V_I(t) |\alpha, t\rangle_I, \quad |\alpha, t\rangle_I = U(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I$$

Die „Lösung“ ist eine Integralgleichung für $U(t, t_0)$ mit der Randbedingung $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$:

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

Überprüfen wir dies durch Einsetzen in die obere Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0)_I = i\hbar \cdot \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \cdot V_I(t) \cdot U(t, t_0)_I = V_I(t) \cdot U(t, t_0)_I$$

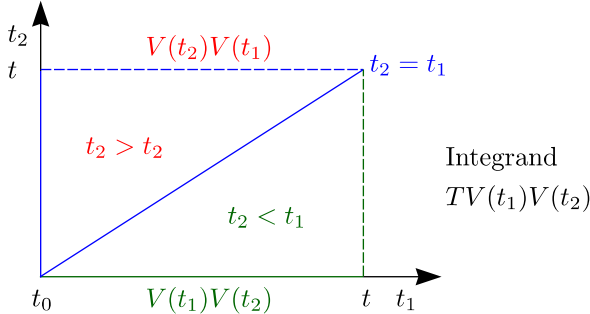
Diese Integralgleichung lässt sich nun schön iterativ lösen:

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \cdot \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1) \left[\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \cdot \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_2) U(t_2, t_0) \right] = \\ &= \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \cdot \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1) + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \cdot \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_1) V_I(t_2) + \dots + \\ &+ \dots + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \cdot \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1) V_I(t_2) \dots V_I(t_n) + \dots \end{aligned}$$

Man setzt also für $U(t', t_0)$ immer wieder die Integralgleichung selbst ein. Die früheste Zeit steht ganz rechts und die späteste ganz links. Zur besseren Schreibweise führen wir einen Zeitordnungsoperator T ein:

$$TV(t_1)V(t_2)V(t_3) = \begin{cases} V(t_1)V(t_2)V(t_3) & \text{für } t_1 > t_2 > t_3 \\ V(t_2)V(t_3)V(t_1) & \text{für } t_2 > t_3 > t_1 \\ \vdots \end{cases}$$

Da in der iterativen Lösung die Produkte schon zeitgeordnet sind, kann man auch den Zeitordnungsoperator einfügen.



Betrachten wir zuerst den Fall $n = 2$:

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 TV(t_1) V(t_2) = \frac{T}{2} \left[\int_{t_0}^t dt' V(t') \right]^2$$

Für beliebige n gilt:

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n TV(t_1) \dots V(t_n) = T \left[\int_{t_0}^t dt' V(t') \right]^n \cdot \frac{1}{n!}$$

$n!$ bezeichnet die Zahl der Permutationen von t_1, t_2, \dots, t_n . Damit ergibt sich dann schließlich eine Formel, die man sich leicht merken kann:

$$\begin{aligned} U(t, t_0)_I &= \mathbf{1} + \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \cdot \int_{t_0}^t dt' V_I(t') + \dots + \frac{1}{n!} \cdot \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \cdot T \left[\int_{t_0}^t dt' V_I(t') \right]^n + \dots = \\ &= \boxed{T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \int_{t_0}^t V_I(t') dt \right] \text{ mit } V_I(t) = \exp \left(\frac{iH_0 t}{\hbar} \right) V(t) \exp \left(-\frac{iH_0 t}{\hbar} \right)} \end{aligned}$$

Ausgeschrieben lautet dies nochmal:

$$U(t, t_0)_I = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \cdot \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_1) V_I(t_2) + \dots$$

Damit ergeben sich die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen Energie-Eigenzuständen von H_0 . Am Anfang befinde sich unser quantenmechanisches System im Zustand $|i\rangle$. Wir erhalten dann den Zustand im SCHRÖDINGER- und Wechselwirkungsbild mit:

$$|i, t_0\rangle_S = \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) |i\rangle \Rightarrow |i, t_0\rangle_I = \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) |i, t_0\rangle_S = |i\rangle$$

$$|i, t\rangle = U(t, t_0)_I |i, t_0\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

Wir hatten schon früher gesehen, wie man die Zeitentwicklungskoeffizienten $c_n(t)$ erhält:

$$c_n(t) = \langle n | i, t \rangle_I = \langle n | U(t, t_0)_I | i \rangle = \underbrace{\delta_{ni}}_{c_n^{(0)}(t)} - \frac{i}{\hbar} \cdot \underbrace{\int_{t_0}^t dt_1 \langle n | V_I(t_1) | i \rangle}_{c_n^{(1)}(t)} + \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \cdot \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \langle n | V_I(t_1) V_I(t_2) | i \rangle}_{c_n^{(3)}(t)} + \dots$$

Damit ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit für einen Übergang vom Zustand $|i\rangle$ zum Zustand $|n\rangle$:

$$P(i \mapsto n) = |c_n(t)|^2 \stackrel{i \neq n}{=} |c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots|^2$$

1.4.4 Beispiel: Konstante Störung

Wir betrachten eine Störung der folgenden Form:

$$V(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 = t_0 \\ V & \text{für } t > 0 \end{cases}$$

Hierbei gilt nun für die Zeitentwicklungskoeffizienten der verschiedenen Ordnungen:

☞ Nullte Ordnung: $c_n^{(0)} = \delta_{ni}$

☞ Erste Ordnung:

$$\begin{aligned} c_n^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t dt_1 \left\langle n \left| \exp\left(\frac{iH_0 t_1}{\hbar}\right) V \exp\left(-\frac{iH_0 t_1}{\hbar}\right) \right| i \right\rangle = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \left[\int_0^t dt_1 \exp(i\omega_{ni} t_1) \right] \cdot V_{ni} \text{ mit } \omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar}, \langle n | V | i \rangle = V_{ni} \end{aligned}$$

Kommen wir nun zur Berechnung des Integrals, wobei wir das Ergebnis mittels der Sinusfunktion ausdrücken wollen:

$$\begin{aligned} c_n^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\exp(i\omega_{ni} t_1)}{i\omega_{ni}} \Big|_0^t \cdot V_{ni} = -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\exp(i\omega_{ni} t) - 1}{i\omega_{ni}} \cdot V_{ni} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V_{ni} \cdot \exp\left(\frac{i\omega_{ni} t}{2}\right)}{\omega_{ni}} \cdot 2 \cdot \frac{\exp\left(\frac{i\omega_{ni} t}{2}\right) - \exp\left(-\frac{i\omega_{ni} t}{2}\right)}{2i} \end{aligned}$$

Also folgt die Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P(i \mapsto n) \approx |c_n^{(1)}(t)|^2 = \left| \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{2 \cdot V_{ni}}{\omega_{ni}} \cdot \sin\left(\frac{\omega_{ni} \cdot t}{2}\right) \right|^2 = \boxed{4 \cdot |V_{ni}|^2 \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{(E_n - E_i) \cdot t}{2\hbar}\right)}{(E_n - E_i)^2} \approx P(i \mapsto n)}$$

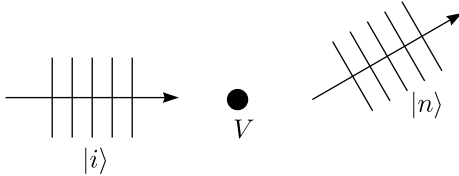
Zeichnen wir die Funktion in Abhängigkeit von ω auf:

$$f(\omega, t) = 4 \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\omega^2} \text{ mit } \omega = \frac{E_n - E_i}{\hbar}$$

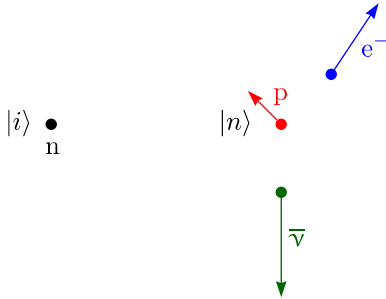
$$f(\omega, t) \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} 4 \cdot \frac{\left(\frac{\omega t}{2}\right)^2}{\omega^2} = t^2, f(\omega, t) \xrightarrow{\text{große } t} c \cdot \delta(\omega)$$

Wenn man also relativ lange wartet, so finden nur „Übergänge“ von einem Zustand $|i\rangle$ zum selben Zustand $|i\rangle$ statt (Energieerhaltung!). Betrachten wir folgende typische Fälle:

☞ Streuung:



☞ β -Zerfall:



Die Summe läuft über alle Zustände mit $E_n \approx E_i$. Die Zahl der Zustände im Intervall $[E, E + dE]$ ergibt sich durch das Produkt $\varrho(E) dE$, wobei $\varrho(E)$ die Dichte der Endzustände ist.

$$P \approx \sum_{\substack{n \neq i \\ E_n \approx E_i}} |c_n^{(1)}(t)|^2 = \int \varrho(E) dE |c_n^{(1)}(t)|^2 = 4 \cdot \int dE_n |V_{ni}|^2 \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{E_n - E_i}{2\hbar} \cdot t\right)}{(E_n - E_i)^2} \cdot \varrho(E_n)$$

Für große t geht das Argument – wie zuvor schon erwähnt – gegen eine δ -Funktion:

$$\frac{1}{E^2} \cdot \sin^2\left(\frac{E \cdot t}{2\hbar}\right) = c \cdot \delta(E)$$

Wie bestimmt man nun die Konstante c ?

$$c = \int_{-\infty}^{\infty} dE c \cdot \delta(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{E^2} \cdot \sin^2\left(\frac{E \cdot t}{2\hbar}\right) dE \stackrel{\frac{E \cdot t}{2\hbar} = x}{=} \frac{t}{2\hbar} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(x)}{x^2} dx = \frac{\pi \cdot t}{2\hbar}$$

Damit ergibt sich weiter für die Übergangswahrscheinlichkeit für große t :

$$P \approx 4 \cdot \int dE_n |V_{ni}|^2 \cdot \frac{\pi \cdot t}{2\hbar} \cdot \delta(E_n - E_i) \cdot \varrho(E_n) = \frac{2\pi t}{\hbar} \cdot |V_{ni}|^2 \cdot \varrho(E_n) \Big|_{E_n = E_i}$$

Der Ausdruck $|\overline{|V_{ni}|^2}|$ bedeutet, dass $|V_{ni}|^2$ über alle Zustände $|n\rangle \neq |i\rangle$ mit $E_n = E_i$ summiert wird. Wir definieren nun noch die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit:

$$W_{i \rightarrow [n]} = \frac{P(i \mapsto [n])}{t} = \boxed{\frac{2\pi}{\hbar} \cdot \overline{|V_{ni}|^2} \cdot \varrho(E_n)}_{E_n = E_i} = W_{i \rightarrow [n]}$$

Dies ist gerade die bekannte FERMI's Goldene Regel.

☞ Höhere Ordnungen:

$$\begin{aligned} c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \cdot \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \sum_m \langle n | V_I(t_1) | m \rangle \langle m | V_I(t_2) | i \rangle = \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \cdot \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \exp(i\omega_{nm}t_1) \cdot \exp(i\omega_{mi}t_2) \cdot V_{nm} \cdot V_{mi} = \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \cdot \sum_m V_{nm} \cdot V_{mi} \cdot \int_0^t dt_1 \exp(i\omega_{nm}t_1) \cdot \frac{\exp(i\omega_{mi}t_1) - 1}{i\omega_{mi}} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \sum_m \frac{V_{nm} \cdot V_{mi}}{E_i - E_m} \cdot \int_0^t dt_1 [\exp(i\omega_{ni}t_1) - \exp(i\omega_{nm}t_1)] \end{aligned}$$

Für $E_n \approx E_i$ gilt:

☞ $E_m \neq E_i \approx E_n$: $\exp(i\omega_{nm}t)$ ist stark oszillierend und somit $\int \exp(i\omega_{nm}t_1) dt_1 \approx 0$

☞ $E_m \approx E_1 \approx E_n$: Der Integrand ist gleich 0.

$$c_n^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \cdot \sum_{\substack{m \\ E_m \neq E_i}} \frac{V_{nm} \cdot V_{mi}}{E_i - E_m} \cdot \int_0^t dt_1 \exp(i\omega_{ni}t_1)$$

$$\boxed{c_n(t) = c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots = -\frac{i}{\hbar} \cdot \left(V_{ni} + \sum_{\substack{m \\ E_m = E_i}} \frac{V_{nm} \cdot V_{mi}}{E_i - E_m} + \dots \right) \cdot \int_0^t dt_1 \exp(i\omega_{ni}t_1)}$$

Zustände $|m\rangle$ mit $E_m \neq E_i$ bezeichnet man als „virtuelle Zustände“. In höheren Ordnungen gilt also:

$$\boxed{W_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \left| V_{ni} + \sum_{\substack{m \\ E_m \neq E_i}} \frac{V_{nm} \cdot V_{mi}}{E_i - E_m} + \dots \right|^2 \cdot \varrho(E_n)}$$

1.4.5 Beliebige zeitabhängige Potentiale

Ein beliebiges zeitabhängiges Potential lässt sich FOURIER-zerlegen:

$$V(t) = \int d\omega \left[\tilde{V}(\omega) \cdot \exp(i\omega t) + \tilde{V}^\dagger(\omega) \exp(-i\omega t) \right]$$

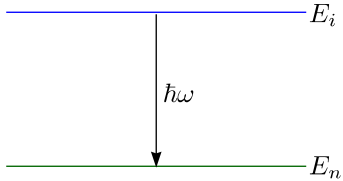
Damit haben wir eine harmonische Zeitabhängigkeit $V \sim \exp(i\omega t)$. Wir betrachten nun $V(t) = V \cdot \exp(i\omega t) + V^\dagger \exp(-i\omega t)$. Wir interessieren uns für die Übergangsamplitude $i \mapsto n$:

☞ 0.Ordnung: $c_n(0) = \delta_{ni}$

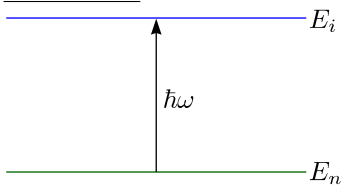
☞ 1.Ordnung:

$$\begin{aligned}
 c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \int_0^t dt' V_{ni}(t') \exp(i\omega_{ni}t') = \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \left[\underbrace{V_{ni} \cdot \int_0^t dt' \exp[i(\omega + \omega_{ni})t']}_{\delta(\frac{E_n - E_i}{\hbar} + \omega)} + \underbrace{V_{ni}^\dagger \cdot \int_0^t dt' \exp[i(-\omega + \omega_{ni})t']}_{\delta(\frac{E_n - E_i}{\hbar} - \omega)} \right]
 \end{aligned}$$

☞ Emission:



☞ Absorption:



Der erste Term beschreibt die Emission, der zweite die Absorption. Betrachten wir FERMIS Goldene Regel für große t :

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \begin{cases} |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i + \hbar\omega) & \text{Emission} \\ |V_{ni}^\dagger|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) & \text{Absorption} \end{cases}$$

1.5 Wechselwirkung mit klassischem Strahlungsfeld

Das Elektron besitzt die Masse m und die Ladung $e = -|e|$. (Wir folgen der Konvention von SAKURAI, dass nämlich e als negativ vorausgesetzt wird.) Für $\vec{E} = 0$ und $\vec{B} = 0$ lautet der HAMILTON-Operator $H = \frac{\vec{p}^2}{2m}$. Ist $\vec{E}, \vec{B} \neq 0$, so ersetzt man \vec{p} durch $\vec{p} - q\vec{A}$, woraus sich ergibt:

$$\boxed{H = \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} + e\phi(\vec{r})} = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{H_0} + e\phi - \underbrace{\frac{e}{m}\vec{A} \cdot \vec{p}}_V + \underbrace{\frac{e^2}{2m}\vec{A}^2}_{\text{Ordnung } e^2: \text{ klein}}$$

Allgemein gilt:

$$\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} = 2\vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})$$

Wir verwenden die COULOMB-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, womit der zweite Summand wegfällt und wir den HAMILTON-Operator so schreiben können wie oben. ϕ kommt nur durch äußere Ladungen zustande. $\vec{A}(x, t)$ sei eine ebene Welle:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = 2A_0 \hat{\xi} \cos\left(\frac{\omega}{c} \hat{n} \cdot \vec{x} - \omega t\right) = A_0 \hat{\varepsilon} \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega t) + \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x} + i\omega t) \right] \quad \text{mit } \frac{\omega}{c} \hat{n} = \vec{k}$$

$$A_0 \hat{\varepsilon} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) = V^\dagger, \quad A_0 \hat{\varepsilon} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) = V$$

Das Störpotential lautet also:

$$V(t) = \underbrace{-\frac{e}{m} A_0 \cdot \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \hat{\varepsilon} \cdot \vec{p}}_V \cdot \exp(i\omega t) - \underbrace{\frac{e}{m} A_0 \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \hat{\varepsilon} \cdot \vec{p}}_{V^\dagger} \cdot \exp(-i\omega t)$$

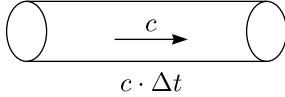
Dann ergibt sich die Absorptionsrate – beschrieben durch den $\exp(-i\omega t)$ -Term – durch:

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{m^2} \cdot A_0^2 \cdot \left| \langle n | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \hat{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

Der Wirkungsquerschnitt der Absorption ist definiert durch:

$$\begin{aligned} \sigma_{abs} &= \frac{\text{Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit}}{\text{Photon-Fluss = Anzahl der Photonen pro Fläche und Zeit}} = \\ &= \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega} \cdot \frac{\text{Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit}}{\text{Photon-Fluss = Anzahl der Photonen pro Fläche und Zeit}} = \\ &= \frac{(\text{Energie pro Zeit})_{\text{absorbiert in } i \rightarrow n}}{\text{Energiefluss}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Energiefluss} &= \frac{\text{Energie}}{\text{Fläche} \cdot \text{Zeit}} = \text{Energiedichte} \cdot \frac{c \cdot \Delta t \cdot \text{Fläche}}{\text{Fläche} \cdot \Delta t} = \\ &= u \cdot c = c \cdot \left\langle \frac{1}{2} \varepsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{2} \cdot \frac{\vec{B}^2}{\mu_0} \right\rangle = c \cdot \varepsilon_0 \langle \vec{E}^2 \rangle \end{aligned}$$



Das \vec{E} -Feld ergibt sich aus dem Vektorpotential \vec{A} durch Ableiten nach der Zeit t :

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -2A_0 \cdot \hat{\varepsilon} \cdot \omega \cdot \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$$

Damit kommen wir zum Energiefluss

$$c \cdot u = c \cdot \varepsilon_0 \cdot 4A_0^2 \cdot \omega^2 \cdot \langle \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) \rangle = 2c \cdot \varepsilon_0 \cdot A_0^2 \cdot \omega^2$$

und somit zum Wirkungsquerschnitt:

$$\begin{aligned} \sigma_{abs} &= \frac{\hbar\omega \cdot W_{i \rightarrow n}}{2c \cdot \varepsilon_0 \cdot A_0^2 \cdot \omega^2} = \frac{\hbar\omega \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{e^2 \cdot A_0^2}{m^2} \cdot \left| \langle n | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \hat{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)}{2c \cdot \varepsilon_0 \cdot A_0^2 \cdot \omega^2} = \\ &= \frac{2\pi\hbar}{m^2 \cdot \omega} \cdot \frac{e^2}{2c \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar \cdot 2\pi} \cdot 2\pi \cdot \left| \langle n | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \hat{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) = \\ &= \frac{4\pi^2 \cdot \hbar}{m^2 \cdot \omega} \cdot \alpha \cdot \left| \langle n | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \hat{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad \text{mit } \alpha = \frac{e^2}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \hbar c} \end{aligned}$$

1.5.1 Elektrische Dipol-Approximation

Es sei $\lambda \gg R_{Atom}$:

$$\hbar\omega \sim \frac{Z^2 \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot a_0} = \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot R_{Atom}}$$

$$\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{c}{\omega} = \frac{\hbar c}{\hbar\omega} \sim \frac{R_{Atom}}{Z \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot \hbar c}} = \frac{R_{Atom}}{Z \cdot \alpha}$$

Damit ist:

$$\vec{k} \cdot \vec{x} \sim |\vec{k}| \cdot |\vec{x}| \sim \frac{\omega}{c} \cdot R_{Atom} = Z \cdot \alpha \ll 1$$

Man kann also den Term $\vec{k} \cdot \vec{x}$ (oft) als sehr klein voraussetzen.

$$V_{ni}^\dagger = \langle n | \exp(\vec{k} \cdot \vec{x}) \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle \stackrel{\exp(\vec{k} \cdot \vec{x}) \approx 1 + \vec{k} \cdot \vec{x} + \dots}{\approx} \langle n | \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle$$

Dieses Verfahren bezeichnet man als Dipol-Approximation.

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + e\phi(\vec{r}) \Rightarrow [x_i, H_0] = \left[x_i, \frac{p_j \cdot p_j}{2m} \right] = \frac{2}{2m} \cdot [x_i, p_j] p_j = \frac{2}{2m} \cdot i\hbar \delta_{ij} \cdot p_j = \frac{i\hbar}{m} p_i, \text{ da } [x, \phi] = 0$$

Damit ist es möglich, in V_{ni}^\dagger den Impuls \vec{p} durch den Ort \vec{x} zu ersetzen:

$$\begin{aligned} V_{ni}^\dagger &\approx \epsilon_i \langle n | p_i | i \rangle = \epsilon_i \cdot \frac{m}{i\hbar} \cdot \langle n | [x_i, H_0] | i \rangle = \epsilon_i \cdot \frac{m}{i\hbar} \cdot \langle n | (x_i H_0 - H_0 x_i) | i \rangle = \epsilon_i \cdot \frac{m}{i\hbar} \cdot \langle n | x_i E_i - E_n x_i | i \rangle = \\ &= \epsilon_i \cdot \frac{m}{i} \cdot \langle n | x_i | i \rangle \cdot \frac{E_i - E_n}{\hbar} = im\omega_{ni} \cdot \langle n | \vec{x} | i \rangle \cdot \vec{\epsilon} \end{aligned}$$

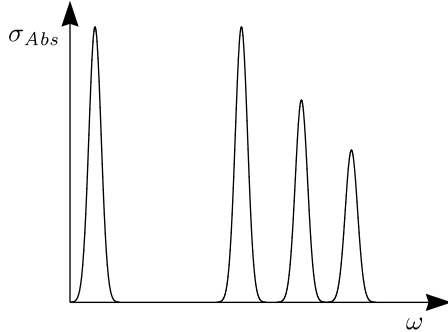
In Dipol-Approximation gilt:

$$\sigma_{Abs} = \frac{4\pi^2 \cdot \hbar}{m^2 \cdot \omega} \cdot \alpha \cdot m^2 \cdot \omega^2 \cdot |\langle n | \vec{x} | i \rangle \cdot \hat{\epsilon}|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

Mit $\delta(E_n - E_i - \hbar\omega) = \delta[\hbar(\omega_{ni} - \omega)] = \frac{1}{\hbar} \cdot \delta(\omega_{ni} - \omega)$ ergibt sich schlussendlich:

$$\boxed{\sigma_{Abs} = 4\pi^2 \cdot \alpha \cdot \omega \cdot |\hat{\epsilon} \cdot \langle n | \vec{x} | i \rangle|^2 \cdot \delta(\omega - \omega_{ni})}$$

$\delta(\omega - \omega_{ni})$ bezeichnet man auch als Resonanzfunktion.



1.5.2 Summenregel

$$\int d\omega \sum_n \sigma_{Abs}(\omega) = \sum_n 4\pi^2 \cdot \alpha \cdot \omega_{ni} \cdot |\langle n | \vec{x} | i \rangle \cdot \hat{\epsilon}|^2 = \sum_n 4\pi^2 \cdot \alpha \cdot \omega_{ni} \cdot |\langle n | x | i \rangle|^2 \text{ für } \hat{\epsilon} = \hat{x}$$

Wir definieren an dieser Stelle die Oszillatorstärke:

$$\boxed{f_{ni} = \frac{2m\omega_{ni}}{\hbar} \cdot |\langle n | x | i \rangle|^2}$$

Wir betrachten außerdem:

$$\langle i | [x, [H_0, x]] | i \rangle = -\frac{i\hbar}{m} \cdot i\hbar \cdot \langle i | i \rangle = \frac{\hbar^2}{m}$$

Mit $[x, [H_0, x]] = x(H_0x - xH_0) - (H_0x - xH_0)x = 2x \cdot H_0 \cdot x - x^2 \cdot H_0 - H_0 \cdot x^2$ lässt sich dies auch schreiben als:

$$\begin{aligned} A &= \langle i | 2x \cdot H_0 \cdot x - 2E_i \cdot x^2 | i \rangle = \sum_n [\langle i | 2x | n \rangle \langle n | H_0 \cdot x | i \rangle - 2E_i \cdot \langle i | x | n \rangle \langle n | x | i \rangle] = \\ &= \sum_n 2(E_n - E_i) \cdot |\langle n | x | i \rangle|^2 = \sum_n 2\hbar\omega_{ni} \cdot |\langle n | x | i \rangle|^2 = \boxed{\sum_n \frac{\hbar^2}{m} f_{ni}} \end{aligned}$$

Als Ergebnis erhalten wir also:

$$\sum_n f_{ni} = 1$$

$$\int d\omega \sigma_{Abs}(\omega) = 4\pi^2 \cdot \alpha \cdot \sum_n f_{ni} \cdot \frac{\hbar}{2m} = \boxed{\frac{4\pi^2 \cdot \alpha \cdot \hbar}{2m}}$$

Dies gilt unabhängig vom Atom!

1.6 Strahlung mit Materie

Die Störung eines quantenmechanischen Systems werde durch äußere Felder verursacht:

$$V(t) = -\frac{e}{m} \vec{A}(t) \cdot \vec{p} \text{ für } \vec{A}(t) \sim \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$$

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs:

$$W_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |V_{ni}^\dagger|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

Der Wirkungsquerschnitt für Absorption lautet:

$$\sigma_{abs} = \frac{4\pi^2 \cdot \hbar}{m_e \cdot \omega} \cdot \alpha \cdot \left| \langle n | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \vec{\varepsilon} \vec{p} | i \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

$|i\rangle$ und $|n\rangle$ seien Bindungszustände, wobei $|\vec{x}| \sim R_{Atom} \ll \lambda$ gelten soll und damit $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \approx 1$. In Dipolapproximation gilt dann:

$$\sigma_{abs} = 4\pi^2 \cdot \alpha \cdot \omega_{ni} \cdot |\vec{\varepsilon} \langle n | \vec{r} | i \rangle|^2 \cdot \delta(\omega_{ni} - \omega)$$

Betrachten wir dazu den Ortsoperator \vec{r}

$$\vec{r} = r \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

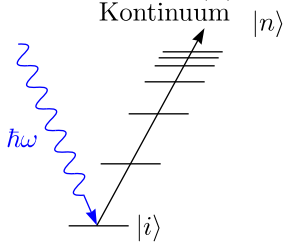
welcher ein irreduzibler Tensoroperator ist. Wir vergleichen mit den Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{10} \sim P_1(\cos \theta) = \cos \theta, Y_{1,\pm 1} \sim \sin \theta \exp(\pm i\phi)$$

Für \vec{r} beträgt der Drehimpuls $l = 1$; $|i\rangle$ sei Zustand mit Drehimpuls l und damit tragen nur Zustände $|n\rangle$ mit $l' = l \pm 1$ bei.

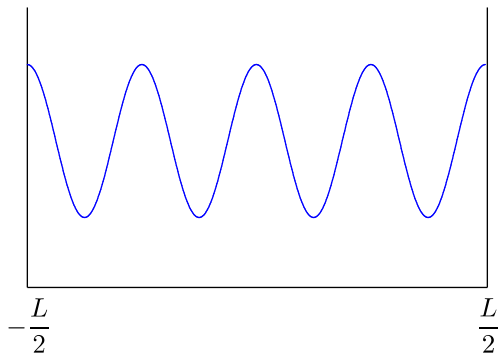
1.6.1 Photoelektrischer Effekt

Der Endzustand $|n\rangle$ befindet sich „hoch“ im Kontinuum, E_n liegt damit weit oberhalb der Ionisationsgrenze.



$|n\rangle$ sei in Näherung eine Ebene Welle:

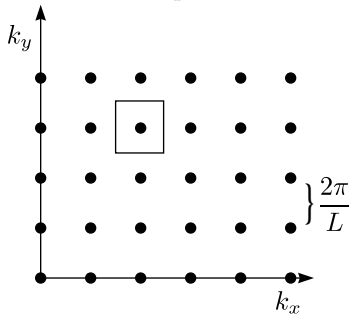
$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) = \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})}{L^{\frac{3}{2}}} = \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})}{L^{\frac{3}{2}}}.$$



Zur Normierung betrachten wir einen Würfel der Kantenlänge L mit periodischen Randbedingungen, also gilt $\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \langle \vec{x} + \hat{e}_i \cdot L | \vec{k} \rangle$, wobei \hat{e}_1, \hat{e}_2 und \hat{e}_3 Einheitsvektoren in x, y und z -Richtung seien. Damit diese Bedingung gewährleistet ist, kann \vec{k} folgende Werte annehmen:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \cdot (n_x, n_y, n_z) \text{ mit } n_i \in \mathbb{Z}$$

Wir wollen außerdem die Dichte der Zustände im Phasenraum, also der k_x - k_y -Ebene berechnen. Ein einziger Zustand beansprucht für sich ein Volumen von $(\frac{2\pi}{L})^3$. Die Zustandsdichte in \vec{k} ist damit $(\frac{L}{2\pi})^3$.



1.6.2 Totaler Absorptions-Wirkungsquerschnitt

Die Summe über alle $|n\rangle$ lässt sich im Grenzübergang $L \mapsto \infty$ als Volumenintegral über den \vec{k} -Raum schreiben, womit sich mittels der Zustandsdichte und der Isotropie der Zustände im \vec{k} -Raum ergibt:

$$\sigma = \int \sigma_{abs} \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3\vec{k} = \int \sigma_{abs} \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot k^2 dk d\Omega = \underbrace{\int \sigma_{abs} \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot k^2 \cdot \frac{dk}{dE} dE d\Omega}_{\text{Differentieller Wirkungsquerschnitt } \frac{d\sigma}{d\Omega}}$$

Wir drücken k durch die Energie E aus:

$$E_n = E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \Rightarrow k = |\vec{k}| = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2mE}$$

$$\frac{dk}{dE} = \frac{1}{\hbar} \cdot (2mE)^{-\frac{1}{2}} \cdot m \Rightarrow k^2 \cdot \frac{dk}{dE} = \frac{m \cdot k}{\hbar^2} = m \cdot \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^3} = \varrho(E)$$

Hiermit ergibt sich weiter für den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \int dE \sigma_{abs} \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{m \cdot k}{\hbar^2} = \\ &= \int dE \frac{4\pi^2 \cdot \hbar}{m^2 \cdot \omega} \cdot \alpha \cdot \left| \langle \vec{k}_f | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \cdot \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \cdot \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{m \cdot k_f}{\hbar^2} \text{ mit } i\vec{k} \cdot \vec{x} = \frac{\omega}{i} \hat{n} \cdot \vec{x} \end{aligned}$$

$|k_f\rangle$ sei der Endzustand und \vec{k} der Wellenvektor des einfallenden Photons. Wir berechnen das Matrixelement für ein Elektron e^- in der K-Schale eines Wasserstoffatoms:

$$\psi_i(\vec{x}) = Y_{00}(\theta, \phi) \cdot R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot 2 \cdot \exp\left(-\frac{Z \cdot r}{a_0}\right)$$

$|i\rangle$ befinde sich in der Ortsdarstellung. Damit ergibt sich:

$$\langle \vec{k}_f | \exp\left(i \cdot \frac{\omega}{c} \cdot \hat{n} \cdot \vec{x}\right) \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p} | i \rangle = \int d^3\vec{x} \cdot \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x})}{L^{\frac{3}{2}}} \cdot \exp\left(i \cdot \frac{\omega}{c} \cdot \hat{n} \cdot \vec{x}\right) \cdot \vec{\varepsilon} \cdot \frac{\hbar}{i} \cdot \vec{\nabla} \psi_i(\vec{x})$$

Mit partieller Integration ergibt sich weiter, wobei Oberflächenterme für $x \mapsto \infty$ aufgrund der abfallenden Exponentialfunktion von ψ_i wegfallen.

$$\frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \cdot \int d^3\vec{x} \vec{\varepsilon} \cdot \left(-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}\right) \cdot \left[\exp\left(-i \left(k_f - \frac{\omega}{c} \hat{n}\right) \cdot \vec{x}\right)\right] \cdot \psi_i(x) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \cdot \int d^3\vec{x} \hbar \vec{q} \cdot \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{x}) \cdot \psi_i(x) \text{ mit } \vec{q} = \vec{k}_f - \frac{\omega}{c} \hat{n}$$

Der Integralausdruck ist bis auf einem Vorfaktor $(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}$ die FOURIER-Transformierte von ψ_i :

$$\boxed{\frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \cdot \vec{\varepsilon} \cdot \vec{k}_f \cdot \int d^3\vec{x} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{x}) \cdot \psi_i(\vec{x}) \text{ mit } \int d^3\vec{x} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{x}) \cdot \psi_i(\vec{x}) = \tilde{\phi}_i(\vec{q}) = (2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}} \cdot \phi_i(\hbar\vec{q})}$$

Steht \hat{n} , also der Vektor der Ausbreitungsrichtung, senkrecht auf dem Polarisationsvektor $\vec{\varepsilon}$, so gilt $\vec{\varepsilon} \cdot \vec{q} = \vec{\varepsilon} \cdot \vec{k}_f$.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi^2 \hbar^2 \cdot \alpha}{m^2 \cdot \omega} \cdot \frac{1}{L^3} \cdot |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{k}_f|^2 \cdot |\tilde{\phi}_i(\vec{q})|^2 \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} \cdot \frac{m \cdot k_f}{\hbar^2}$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist von der Größe L^3 des Kastens unabhängig. Mit

$$k_f = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m \cdot (E_i + \hbar\omega)}}{\hbar}$$

ergibt sich weiter:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{2\pi} \cdot \frac{\hbar \cdot k_f}{m \cdot \omega} \cdot |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{k}_f|^2 \cdot |\tilde{\phi}_i(\vec{q})|^2}$$

Die Näherung ist für kleine q jedoch ungültig! Damit ist eine direkte Messung der Wellenfunktion im Impulsraum möglich.

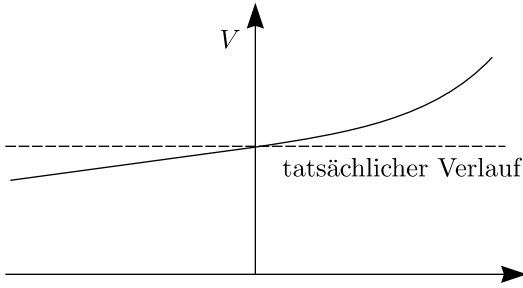
$$\vec{\varepsilon} \cdot \vec{q} = \vec{\varepsilon} \cdot \left(\vec{k}_f - \frac{\omega}{c} \hat{n}\right) = \vec{\varepsilon} \cdot \vec{k}_f \text{ weil } \hat{\varepsilon} \perp \hat{n}$$

$\vec{\varepsilon}$ sei die Richtung des Vektorpotentials. In zweiter Ordnung Störungstheorie gilt für $c_n(t)$ für $V(t) = V = \text{const.}$

$$c_n^{(2)} = \frac{i}{\hbar} \cdot \sum_m \frac{V_{nm} \cdot V_{mi}}{E_m - E_i} \cdot \int_{t_0}^t dt' [\exp(i\omega_{ni}t') - \exp(i\omega_{nm}t')]$$

Folgende Fallunterscheidung muss hierbei für das Integral I durchgeführt werden:

$$I = \begin{cases} \int \exp(i\omega_{mn}t') & \text{für } E_m \neq E_n, E_n \approx E_i \\ \int [\exp(i\omega_{ni}t') - \exp(i\omega_{nm}t')] dt' = 0 & \text{für } E_m = E_i \end{cases}$$



Diese Fallunterscheidung kann man durch Einführung einer adiabatischen Zeitabhängigkeit vermeiden: $V(t) = \exp(\eta \cdot t) \cdot V$, wobei $\eta > 0$ beliebig klein sein soll. Für $n \neq i$ gilt dann:

☞ Nullte Ordnung: $c_n^{(0)}(t) = 0$

☞ Erste Ordnung:

$$\begin{aligned} c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t \exp(\eta \cdot t') \cdot \exp(i\omega_{ni} \cdot t') \cdot V_{ni} dt' = -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\exp(\eta \cdot t + i\omega_{ni} \cdot t)}{\eta + i\omega_{ni}} \Big|_{-\infty}^t = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\exp(\eta \cdot t + i\omega_{ni} \cdot t)}{\eta + i\omega_{ni}} \end{aligned}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit ergibt sich dann für $\eta \mapsto 0$:

1.6.3 Adiabatisches Einschalten

Es sei $V(t) = \exp(\eta \cdot t) \cdot V$ mit konstantem V und infinitesimalem $\eta > 0$.

$$c_n(t) = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{\exp(\eta \cdot t + i\omega_{ni} \cdot t)}{\eta + i\omega_{ni}} - \frac{i}{\hbar} \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m + i\eta\hbar} \cdot \frac{\exp(2\eta \cdot t + i\omega_{ni} \cdot t)}{2\eta + i\omega_{ni}} + \dots$$

Kommen wir zum Zerfall des Zustands $|i\rangle$:

$$c_i(t) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} V_{ii} \cdot \frac{\exp(\eta \cdot t)}{\eta} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \cdot V_{ii}^2 \cdot \frac{\exp(2\eta \cdot t)}{2 \cdot \eta^2} - \frac{i}{\hbar} \cdot \sum_{m \neq i} \frac{V_{im} V_{mi}}{E_i - E_m + i\eta\hbar} \cdot \frac{\exp(2\eta \cdot t)}{2\eta} + \dots$$

Außerdem kann man $V_{im} V_{mi} = \langle i|V^\dagger|m\rangle V_{mi} = \langle m|V|i\rangle^* V_{mi} = |V_{mi}|^2$ setzen.

$$\dot{c}_i(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{ii} \cdot \exp(\eta \cdot t) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \cdot V_{ii}^2 \cdot \frac{\exp(2\eta \cdot t)}{\eta} - \frac{i}{\hbar} \cdot \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\eta\hbar} \cdot \exp(2\eta \cdot t) + \dots$$

$$\begin{aligned}\dot{c}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} V_{ii} \cdot \exp(\eta \cdot t) \cdot \left[1 - \frac{i}{\hbar} V_{ii} \cdot \frac{\exp(\eta \cdot t)}{\eta} + \dots \right] - \frac{i}{\hbar} \cdot \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 \cdot \exp(2\eta \cdot t)}{E_i - E_m + i\eta\hbar} \cdot \underbrace{(1 + \dots)}_{c_i(t)} = \\ &= c_i(t) \cdot \left[-\frac{i}{\hbar} V_{ii} - \frac{i}{\hbar} \cdot \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\eta\hbar} + \dots \right] = c_1 \left[-\frac{i}{\hbar} \Delta_i \right]\end{aligned}$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist, wie wir wissen:

$$c_i(t)_I = c_i(0) \cdot \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \Delta_i \cdot t \right] \text{ mit } \Delta_i = V_{ii} - \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\eta\hbar} + \dots$$

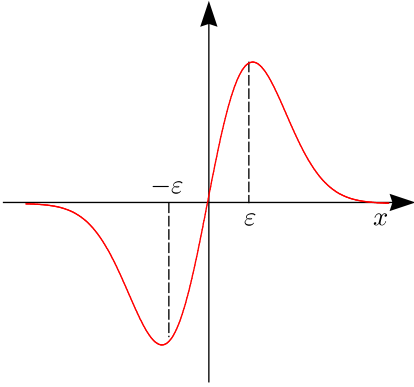
Im SCHRÖDINGER-Bild wäre das Ergebnis:

$$c_i(t)_S = c_i(t)_I \cdot \exp \left(-\frac{iE_i t}{\hbar} \right) = c_i(0) \cdot \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot (E_i + \Delta_i) \cdot t \right]$$

Δ_i stellt die **Energiekorrektur** dar.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} - i \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \right) = P \frac{1}{x} - i \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = P \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

$$P \int_{-L_1}^{L_2} \frac{1}{x} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\int_{-L_1}^{-\varepsilon} \frac{1}{x} dx + \int_{\varepsilon}^{L_2} \frac{1}{x} dx \right]$$



$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Delta_i = V_{ii} + P \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m} - i\pi \cdot \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \cdot \delta(E_i - E_m)$$

Mit $W_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |V_{mi}|^2 \cdot \delta(E_i - E_m)$ können wir dies schreiben als:

$$\text{Re}(\Delta_i) - i \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \sum_{m \neq i} W_{i \rightarrow m} = \text{Re}(\Delta_i) - \frac{i}{2} \Gamma_i \text{ mit } \Gamma_i = \hbar \cdot \sum_{m \neq i} W_{i \rightarrow m} = 2\pi \cdot \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \cdot \delta(E_i - E_m)$$

Γ_i beschreibt einen exponentiellen Zerfall:

$$\begin{aligned}|c_i(t)|^2 &= |c_i(0)|^2 \cdot \left| \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \cdot (E_i + \text{Re}(\Delta_i)) \cdot \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \left(-\frac{i}{2} \cdot \Gamma_i \right) \cdot t \right) \right|^2 = |c_i(0)|^2 \cdot \exp \left(-\frac{\Gamma_i \cdot t}{\hbar} \right) = \\ &= \boxed{|c_i(0)|^2 \cdot \exp \left(-\frac{t}{\tau_i} \right) \text{ mit } \tau_i = \frac{\hbar}{\Gamma_i}}\end{aligned}$$

Man bezeichnet τ_i auch als **Lebensdauer** des Zustandes. Betrachten wir die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit für $c_1(0) = 1$:

$$|c_i|^2 + \sum_{m \neq i} |c_m|^2 = 1 - \underbrace{\hbar \cdot \sum_{m \geq i} W_{i \rightarrow m} \cdot \frac{t}{\hbar}}_{\Gamma_i \cdot \frac{t}{\hbar}} + \dots + \sum_{m \neq i} W_{i \rightarrow m} \cdot t + \dots = 1 + O(v^3)$$

Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit bezeichnet man im Fachjargon auch als **Unitarität**. Wir haben hier die Unitarität der Zeitentwicklung gezeigt.

Kapitel 2

Rotationssymmetrische Systeme

2.1 Drehungen

1.) Klassisch:

Wir haben einen Ortsvektor \vec{r} , der sich mittels einer 3×3 -Drehmatrix $R(\vec{\omega})$ unter Drehungen transformiert, also $\vec{r}' = R(\vec{\omega})\vec{r}$. Drehmatrizen sind orthogonale Matrizen im dreidimensionalen Raum; es gilt $R(\vec{\omega}) \cdot R^T(\vec{\omega}) = \mathbf{1}$. Außerdem gilt für gewöhnliche Drehungen $\det(R) = +1$. Die Gruppenstruktur äußert sich in der Verknüpfung zweier Drehungen, für die $R(\vec{\omega}_1)R(\vec{\omega}_2) = R(\vec{\omega}_3)$ ist. Man bezeichnet folgende Gruppe als **Drehgruppe**:

$$SO(3) = \{R(\vec{\omega}) | RR^T = 1, \det R = 1\}$$

Dies ist außerdem eine sogenannte LIE-Gruppe.

2.) Quantenmechanisches System $|\alpha\rangle$:

Ein Zustandsvektor $|\alpha\rangle$ transformiert sich unter Drehungen mittels einer unitären Transformation $U(\vec{\omega})$, also $|\alpha'\rangle = U(\vec{\omega})|\alpha\rangle$. Man setzt:

$$U(\vec{\omega}) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{j}\right]$$

Auch hier haben wir für die Verknüpfung zweier unitärer Transformationen folgende Relation:

$$U(\vec{\omega}_1)U(\vec{\omega}_2) = U(\vec{\omega}_3)$$

Explizit gilt für die generelle Form einer Rotation:

$$R(\vec{\omega})\vec{r} = \hat{\omega}\hat{\omega} \cdot \vec{r} + \cos\omega [\vec{r} - \hat{\omega}\hat{\omega} \cdot \vec{r}] - \sin\omega \cdot \vec{r} \times \vec{\omega}$$

Diese Beschreibung von Drehungen ist jedoch für unsere Zwecke nicht geeignet; wir wollen Drehungen mittels der **Generatoren** der Gruppe $SO(3)$ beschreiben:

$$R(\vec{\omega}) = \exp\left(-i\vec{l} \cdot \vec{\omega}\right) \text{ mit } l_k = i \frac{\partial}{\partial \omega_k} R(\vec{\omega}) \Big|_{\vec{\omega}=\vec{0}}$$

l_k sind nun die erwähnten Generatoren. Speziell für l_x , l_y und l_z gilt:

$$l_x = i \frac{\partial}{\partial \omega} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega) & -\sin(\omega) \\ 0 & \sin(\omega) & \cos(\omega) \end{pmatrix} \Big|_{\omega=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$l_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, l_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es gilt die Kommutatorrelation $[l_x, l_y] = il_z$ und zyklisch

$$[l_i, l_j] = i\varepsilon_{ijk}l_k \equiv i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk}l_k$$

Generatoren beschreiben den ersten Term in der TAYLOR-Reihe. Für kleine ω gilt nämlich:

$$R(\vec{\omega}) = 1 - i\vec{e} \cdot \vec{\omega}$$

$$\vec{\Omega} = \frac{\vec{\Omega}}{N} \cdot N, R(\vec{\Omega}) = \left[R\left(\frac{\vec{\Omega}}{N}\right) \right]^N = \left(1 - i\frac{\vec{e} \cdot \vec{\Omega}}{N} \right)^N \xrightarrow{\lim N \rightarrow \infty} \exp\left(i\vec{e} \cdot \vec{\Omega}\right)$$

Was ist der Zusammenhang von R und U ?

$$R(\vec{\omega}_1)R(\vec{\omega}_2) = R(\vec{\omega}_3) \Leftrightarrow U(\vec{\omega}_1)U(\vec{\omega}_2) = U(\vec{\omega}_3)$$

R	U
$A = -i\vec{\omega}_1 \cdot \vec{l}$	$-i\vec{\omega}_1 \cdot \vec{j}$
$B = -i\vec{\omega}_2 \cdot \vec{l}$	$-i\vec{\omega}_2 \cdot \vec{j}$

Nach dem BAKER-CAMPBELL-HAUSDORFF-Theorem gilt:

$$\exp(A)\exp(B) = \exp(C) = \exp\left(A + B + \frac{1}{2}[A, B] + [A, [A, B]] + \dots\right)$$

$$\exp(-i\vec{\omega}_3 \vec{l}) = \exp\left(-i\left(\vec{\omega}_1 + \vec{\omega}_2 + \frac{1}{2}\vec{\omega}_1 \times \vec{\omega}_2\right) \cdot \vec{l}\right)$$

Das bekommt man nur, wenn die Kommutatoren von \vec{j} den Kommutatoren von \vec{l} entsprechen.

$$[j_i, j_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}j_k$$

2.2 Darstellungen von Gruppen und Lie-Algebren

Wir betrachten die Gruppe $\mathcal{G} = \{g_i | i = 1, \dots\}$. Eigenschaften einer Gruppe sind:

☞ Multipliziert man Elemente g_1 und g_2 der Gruppe miteinander, so erhält man wieder ein Element aus der Gruppe, nämlich g_3 :

$$\begin{array}{ccc} G & \times & G \\ g_1 & & g_2 \end{array} \mapsto \begin{array}{c} G \\ g_3 \end{array}$$

☞ Es gibt eine Einheit e , so dass $ge = g = eg$ gilt.

☞ Es existiert ein Inverses g^{-1} für alle $g \in \mathcal{G}$, so dass $gg^{-1} = e$ gilt.

Definition:

Eine Darstellung von \mathcal{G} ist eine Abbildung $r: \mathcal{G} \mapsto \mathbb{C}^{(n,n)}$: $r(g_i) = M_i$, so dass für alle $g_1g_2 = g_3$ gilt $r(g_1, g_2) = r(g_1)r(g_2)$ und $r(g^{-1}) = r(g)^{-1}$. M_i sei eine $n \times n$ -Matrix. Matrizen M_i haben gleiche multiplikative Eigenschaften wie die g . Die Konsequenz daraus ist $r(gg^{-1}) = r(g)r(g^{-1}) = r(g)r(g)^{-1} = \mathbf{1}_n$.

Definition:

Eine reduzible Darstellung $M_i = r(g_i)$ ist eine Darstellung, so dass alle M_i gleichzeitig durch eine einzige unitäre Transformation auf dieselbe Blockdiagonalform gebracht werden können.

$$U^\dagger M_i U = \begin{pmatrix} M_i^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M_i^{(2)} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & M_i^{(n)} \end{pmatrix} \quad \forall i$$

$M_i^{(k)}$ ist dabei eine $n_k \times n_k$ -Matrix für alle i . Das Gegenteil davon ist eine irreduzible Darstellung.

Beispiel: Drehmatrizen

In der $|j, m\rangle$ -Basis ist $\mathcal{D}(R) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \vec{J}\right)$ blockdiagonal, denn J_x, J_y und J_z sind blockdiagonal mit $(2j+1) \cdot (2j+1)$ -dimensionalen Blöcken.

$$J_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_i}{2} & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & J_i^{(1)} & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & 0 & J_i^{(\frac{3}{2})} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix}$$

Damit hat auch $(\vec{\omega} \cdot \vec{J})^n$ dieselbe Struktur:

$$J_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\vec{\omega} \cdot \frac{\sigma_i}{2})^n & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & (\vec{\omega} \cdot J_i^{(1)})^n & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & 0 & (\vec{\omega} \cdot J_i^{(\frac{3}{2})})^n & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix}$$

So ergibt sich:

$$J_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\vec{\omega}) & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \mathcal{D}^{(1)}(\vec{\omega}) & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix}$$

Die Drehmatrizen zum Drehimpuls j , $\mathcal{D}^{(j)}(\vec{\omega}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \vec{J}^{(j)}\right)$ sind irreduzibel. WIGNER-Funktionen sind Matrix-Elemente von $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \vec{J}^{(j)}\right)$.

$$\langle j', m' | \mathcal{D}(\vec{\omega}) | j, m \rangle = \delta_{j,j'} \left\langle j, m' \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right) \right| j, m \right\rangle = \delta_{j,j'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(\vec{\omega})$$

$(\mathcal{D}_{m'm}^{(j)})$ -Matrizen bilden eine $(2j+1)$ -dimensionale irreduzible Darstellung der $SU(2)$.

2.2.1 Transformation von Zuständen unter Drehungen

Zerlege

$$|\alpha\rangle = \sum_{j,m} c_{j,m} |j, m\rangle$$

durch Einschieben der Einheit:

$$\mathcal{D}(\vec{\omega})|j, m\rangle = \sum_{j', m'} |j', m'\rangle \langle j', m' | \mathcal{D}(\vec{\omega}) |j, m\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}(\vec{\omega}) |j, m'\rangle$$

2.3 Alternative Parametrisierung von Drehungen über Euler-Winkel

$$\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_z \alpha\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_z \gamma\right)$$

Man wählt J_y also $i - iJ_y^{(j)}$, womit J_y reell ist. Damit ist $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right)$ reell.

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \left\langle j, m' \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_z \alpha\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_z \gamma\right) \right| j, m \right\rangle = \\ &= \left\langle j, m' \left| \exp(-im'\alpha) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) \cdot \exp(-im\gamma) \right| j, m \right\rangle = \\ &= \exp(-i[m'\alpha + m\gamma]) \cdot \left\langle j, m' \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} J_y \beta\right) \right| j, m \right\rangle \end{aligned}$$

Die $d_{m', m}^{(j)}(\beta)$ sind reelle Funktionen. Speziell für $j = \frac{1}{2}$ gilt:

$$d^{(\frac{1}{2})}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\alpha, \beta, \gamma) &= \begin{pmatrix} \exp\left[-\frac{1}{2}(\alpha + \gamma)\right] \cdot \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\exp\left[-\frac{1}{2}(\alpha - \gamma)\right] \cdot \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \exp\left[-\frac{1}{2}(\gamma - \alpha)\right] \cdot \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \exp\left[\frac{1}{2}(\alpha + \gamma)\right] \cdot \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \text{ mit } |a|^2 + |b|^2 = 1 \end{aligned}$$

2.4 Addition von Drehimpulsen

Betrachten wir beispielsweise zwei Elektronen in einem gemeinsamen Zentralkraftpotential („He-Atom“). Die HAMILTON-Funktion lautet:

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(|\vec{r}_1|) + V(|\vec{r}_2|)$$

Bei diesem Problem lässt sich die Wellenfunktion als Produkt der Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms darstellen:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{E_1, l_1, m_1}(r_1, \theta_1, \phi_1) \psi_{E_2, l_2, m_2}(r_2, \theta_2, \phi_2)$$

Dabei handelt es sich um ein Produkt von Zuständen im Tensorprodukt der HILBERT-Räume, also $|\alpha\rangle = |E_1, l_1, m_1\rangle \otimes |E_2, l_2, m_2\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle$. Allgemein gilt:

$$|\alpha\rangle = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} c_{\alpha_1, \alpha_2} |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle$$

Der Gesamtdrehimpuls \vec{J} ist gegeben als Summe der einzelnen Drehimpulse, also:

$$\vec{J} = \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 = \vec{L}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \vec{L}_2$$

Alle Komponenten des ersten Drehimpulsoperators kommutieren damit mit allen Komponenten des zweiten Drehimpulsoperators. Im allgemeinen Falle werden zwei Subsysteme beschrieben durch Drehimpulzeigenzustände $|j_1, m_1\rangle$ und $|j_2, m_2\rangle$ und der zu betrachtende Produktzustand als Tensorprodukt: $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$. Der Drehimpulsoperator hat obige Struktur, nämlich $\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes \vec{J}_2$ mit $[J_{1k}, J_{1l}] = i\hbar \varepsilon_{klm} J_{1m}$ und $[J_{2k}, J_{2l}] = i\hbar \varepsilon_{klm} J_{2m}$. Außerdem gilt $[J_{1i}, J_{2j}] = 0$. Gesucht sind die Eigenzustände von \vec{J}^2 , J_z und weitere kommutierende Operatoren.

$$\vec{J}^2 = (\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2 = \vec{J}_1^2 + 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 + \vec{J}_2^2$$

Berechnen wir nun folgenden Kommutator:

$$[\vec{J}^2, \vec{J}_1^2] = [2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2, \vec{J}_1^2] = \sum_k 2J_{2k} [J_{1k}, \vec{J}_1^2] = 0$$

Analog gilt $[\vec{J}, \vec{J}_2^2] = 0$. Aber es ist

$$[\vec{J}^2, J_{1z}] = [2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2, J_{1z}] = 2J_{2k} [J_k, J_{1z}] = 2J_{2k} i\hbar \varepsilon_{k3i} J_i = 2J_{2k} i\hbar \varepsilon_{ik3} J_i = 2i\hbar (J_{1x} J_{2y} - J_{2x} J_{1y}) = 2i\hbar (\vec{J}_1 \times \vec{J}_2)_3$$

und ebenso gilt auch wieder $[\vec{J}^2, J_{2z}] = 2i\hbar (J_{2x} J_{1y} - J_{1x} J_{2y}) = -2i\hbar (\vec{J}_1 \times \vec{J}_2)_3$. Der maximale Satz kommutierender Operatoren ist gegeben durch:

- i.) $\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2: |j, m_j, j_1, j_2\rangle$
- ii.) $\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2^2, J_{2z}: |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$

Die Verknüpfung dieser beiden Basen ist durch eine unitäre Transformation gegeben, welche wir durch Ein-schieben der Einheit

$$\mathbf{1} = \sum_{m_1, m_2} |j, j_z, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2|$$

wie folgt schreiben können:

$$|j, m, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j, j_z, m_1, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle}_{\text{CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten}}$$

2.5 Gruppentheorie

Wir gehen aus von folgender Transformation:

$$|\alpha\rangle \mapsto |\alpha'\rangle = U(\vec{\omega})|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \vec{J}\right) |\alpha\rangle$$

Die Generatoren J_i genügen einer LIE-Algebra; da $\{\vec{\omega}\vec{J}\}$ einen Vektorraum bildet.

- ☛ Produktoperation (nichtassoziativ): $[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k$
- ☛ $[\vec{\omega}_1 \cdot \vec{J}, \vec{\omega}_2 \cdot \vec{J}] = i\hbar (\vec{\omega}_1 \times \vec{\omega}_2) \cdot \vec{J}$
- ☛ Jakobi-Identität: $[A, [B, C]] - [[A, B], C] - [B, [A, C]] \neq 0$

2.5.1 Unterschiede: Lie-Algebra – Lie-Gruppe

Betrachten wir beispielsweise die PAULI-Matrizen:

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

Diese Matrizen genügen den Relationen $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \cdot \varepsilon_{ijk} \sigma_k$ und $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \cdot \mathbf{1}$, wobei $\mathbf{1}$ die Einheitsmatrix ist. Damit lässt sich für die Spinmatrizen $S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$ die Kommutatorrelation $[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$ finden. Weiterhin berechnen wir:

$$\sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} [\sigma_i, \sigma_j] + \frac{1}{2} \{\sigma_i, \sigma_j\} = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{a} = \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix}, \vec{\sigma} \vec{a} \vec{\sigma} \vec{b} = \sigma_i \sigma_j a_i b_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k = \vec{a} \cdot \vec{b} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma} = 0 \text{ für } \vec{a} = \vec{b}$$

Dies gilt mit der EINSTEINSchen Summenkonvention. Daraus folgt nun $(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})^2 = a^2 \cdot \mathbf{1}$. Kommen wir zur Drehmatrix für den Spin 1/2:

$$\mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\vec{\omega}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\omega} \cdot \vec{S}\right) = \exp\left(-i \frac{\vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}}{2}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot \left(-i \frac{\vec{\omega}}{2}\right)^n (\hat{\omega} \cdot \vec{\sigma})^n = \mathbf{1} \cdot \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) - i \cdot (\hat{\omega} \vec{\sigma}) \cdot \sin\left(\frac{\omega}{2}\right)$$

Dies gilt, da:

$$(\hat{\omega} \cdot \vec{\sigma})^n = \begin{cases} \mathbf{1} & \text{für gerades } n \\ \hat{\omega} \cdot \vec{\sigma} & \text{für ungerades } n \end{cases}$$

Schreibe ω als $\hat{\omega} = \vec{n}$ und $\vec{\omega} = \omega \vec{n}$:

$$\mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\vec{\omega}) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) - in_3 \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) & (-in_1 - n_2) \cdot \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ (-in_1 + n_2) \cdot \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) & \cos\left(\frac{\omega}{2}\right) + in_3 \cdot \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

Mit $\vec{n}^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$ ergibt sich für die Determinante der Matrix:

$$\det \mathcal{D}^{(\frac{1}{2})} = |a|^2 + |b|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \cdot n_3^2 + (n_1^2 + n_2^2) \cdot \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) = \cos^2\left(\frac{\omega}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) = 1$$

Die allgemeinste Parametrisierung einer unitären 2×2 -Matrix U mit $\det(U) = 1$ ist $\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$; man bezeichnet sie als CAYLEY-KLEIN-Parametrisierung.

$$\begin{aligned} \text{SU}(2) &= \{U | 2 \times 2\text{-Matrizen mit } UU^\dagger = 1, \det(U) = 1\} = \left\{ \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \mid a, b \in \mathbb{C}, |a|^2 + |b|^2 = 1 \right\} = \\ &= \left\{ \mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\vec{\omega}) \mid \vec{\omega} \in \mathbb{R}^3 \right\} \end{aligned}$$

$\text{SU}(2)$ und $\text{SO}(3)$ sind lokal isomorph; das bedeutet, sie haben die gleiche Multiplikationstabelle:

$$R(\vec{\omega}_1)R(\vec{\omega}_2) = R(\vec{\omega}_3) \Leftrightarrow \mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\vec{\omega}_2)\mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\vec{\omega}_1) = \mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\vec{\omega}_3)$$

$$\mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}(\omega = 360^\circ) = -\mathbf{1}$$

Damit ist $\text{SU}(2)|_{\mathbb{Z}_2} \cong \text{SO}(3)$.

Die LIE-Algebren von $\text{SU}(2)$ und $\text{SO}(3)$ sind identisch!

2.6 Rotationssymmetrische Systeme

Betrachten wir beispielsweise folgenden HAMILTON-Operator:

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

\mathcal{R} ist eine Rotationsmatrix; wenden wir \mathcal{R} auf \vec{p} an, so stellt dies eine unitäre Transformation dar:

$$\mathcal{R}\vec{p} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}\right)\vec{p}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}\right) = U^\dagger\vec{p}U$$

$$H((\mathcal{R}\vec{p}), (\mathcal{R}\vec{r})) = U^\dagger H U = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}\right) H \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}\right) = \left(\mathbf{1} + \frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}\right) H \exp\left(\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}\right) = H$$

Eine unitäre Transformation ändert H nicht. Da außerdem $[H, \vec{L}] = 0$ gilt, ist H rotationssymmetrisch. Allgemein ist H rotationssymmetrisch, falls $[H, J] = 0$ ist. Die Energieeigenzustände sind damit Eigenzustände von \vec{J}^2 und J_z .

2.6.1 Eigenzustände der Drehimpulsoperatoren

Für eine genaue Konstruktion siehe Theoretische Physik D!

$$\vec{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 J(J+1)|j, m\rangle, J_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle$$

Wie wirken nun J_x und J_y auf einen Zustandsvektor $|j, m\rangle$? Dazu betrachten wir $J_\pm = J_x \pm iJ_y$:

$$J_\pm|j, m\rangle = C_\pm(j, m)|j, m \pm 1\rangle$$

Die Koeffizienten $C_\pm(j, m)$ wollen wir berechnen. Dazu nutzen wir die Orthonormiertheit von $|j, m\rangle$ aus:

$$\|C_\pm(j, m)|j, m \pm 1\rangle\|^2 = |C_\pm(j, m)|^2 = \langle j, m|J_\pm^\dagger J_\pm|j, m\rangle = \langle j, m|J_\mp J_\pm|j, m\rangle$$

Es gilt $J_\pm^\dagger = J_\mp$ und damit:

$$\begin{aligned} (J_\mp)(J_\pm) &= (J_x \mp iJ_y)(J_x \pm iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 \pm iJ_x J_y \mp iJ_y J_x = J_x^2 + J_y^2 \pm i[J_x, J_y] = J_x^2 + J_y^2 \pm i^2 \hbar J_z = \\ &= J_x^2 + J_y^2 \mp \hbar J_z = \vec{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z = \vec{J}^2 - J_z(J_z \pm \hbar) \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich weiter, wobei wir berücksichtigen, dass die $|j, m\rangle$ normiert sind:

$$\begin{aligned} \langle j, m|J_\mp J_\pm|j, m\rangle &= \langle j, m|(\vec{J}^2 - J_z(J_z \pm \hbar))|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) - \hbar m \cdot (\hbar m \pm \hbar) = \hbar^2 \cdot [j(j+1) - m(m \pm 1)] = \\ &= \hbar^2 \cdot (j \mp m) \cdot (j \pm m + 1) \end{aligned}$$

Die Phase von C_\pm kann frei gewählt werden.

$$C_\pm(j, m) = \hbar \cdot \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$$

Die explizite Form der J_i in der $|j, m\rangle$ -Basis lautet:

$$\langle j', m'|J_z|j, m\rangle = \hbar m \delta_{j', j} \delta_{m', m}$$

$$\begin{aligned} \langle j', m'|J_x|j, m\rangle &= \frac{1}{2} \langle j', m'|J_+ + J_-|j, m\rangle = \frac{1}{2} C_+(j, m) \underbrace{\langle j', m'|j, m+1\rangle}_{\delta_{jj'} \delta_{m', m+1}} + \frac{1}{2} C_-(j, m) \underbrace{\langle j', m'|j, m-1\rangle}_{\delta_{jj'} \delta_{m', m-1}} = \\ &= \frac{\hbar}{2} \delta_{jj'} \cdot \left[\delta_{m', m+1} \cdot \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} - \delta_{m', m-1} \cdot \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \right] \end{aligned}$$

Mit $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$ folgt weiter:

$$\langle j', m' | J_y | j, m \rangle = \frac{\hbar}{2i} \delta_{jj'} \cdot \left[\delta_{m', m+1} \cdot \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} - \delta_{m', m-1} \cdot \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \right]$$

Kommen wir nun noch zur Matrixdarstellung dieser Operatoren:

$$J_x = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & & & & & & \\ & \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} & & & & & \\ & & \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \end{pmatrix} \begin{matrix} |j, m'\rangle \\ |0, 0\rangle \\ |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{matrix}$$

$|j, m\rangle \quad |0, 0\rangle \quad |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad |1, 1\rangle \quad |1, 0\rangle \quad |1, -1\rangle$

Analog folgt für J_y :

$$J_y = \hbar \cdot \begin{pmatrix} 0 & & & & & & \\ & \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Spin } 1/2} & & & & & \\ & & \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Spin } 1} & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \end{pmatrix}$$

J_x , J_y und J_z sind in der $|j, m\rangle$ -Basis blockdiagonal mit Blöcken $J_i^{(j)}$, die $(2j+1) \cdot (2j+1)$ -dimensional sind. j ist dabei der Blockindex und i der Generatorindex.

$$[J_i^{(j)}, J_j^{(j)}] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k^{(j)}$$

Die CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten sind Elemente einer unitären Matrix. $|j_1, j_2; j, m\rangle$ ist Eigenzustand von \vec{J}_1^2 , \vec{J}_2^2 , \vec{J}^2 und J_z , wohingegen $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ Eigenzustand von \vec{J}_1^2 , J_{1z} , \vec{J}_2^2 und J_{2z} ist.

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

Wenden wir J_z auf einen Zustandsvektor $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ an:

$$J_z |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = (J_{1z} + J_{2z}) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar \cdot (m_1 + m_2) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar m |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

Damit sind die CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ nur dann ungleich 0, falls $m_1 + m_2 = m$ ist. **Unitarität** bedeutet:

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_j |j_1, j_2; j, m\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle^*$$

Dies ist abgeschlossen unter Drehungen, da in der Summe alle $m = +j, j-1, \dots, -j$ vorkommen. Der Maximalwert von m ergibt sich aus den Maximalwerten von m_1 und m_2 ; diese sind $m_1 = j_1$ und $m_2 = j_2$. Daraus folgt $m_{max} = j_1 + j_2$. Das Minimum folgt analog, nämlich $m_{min} = -(j_1 + j_2)$. Sei im folgenden $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \equiv |m_1, m_2\rangle$ als abkürzende Schreibweise:

m	$ m_1, m_2\rangle$	Mögliche j für $j_1 \geq j_2$
$j_1 + j_2$	$ j_1, j_2\rangle$	$j_1 + j_2$
$j_1 + j_2 - 1$	$ j_1, j_2 - 1\rangle; j_1 - 1, j_2\rangle$	$j_1 + j_2; j_1 + j_2 - 1$
$j_1 + j_2 - 2$	$ j_1, j_2 - 2\rangle; j_1 - 1, j_2 - 1\rangle; j_1 - 2, j_2\rangle$	$j_1 + j_2; j_1 + j_2 - 1; j_1 + j_2 - 2$
\vdots	\vdots	\vdots
$j_1 - j_2$	$ j_1, -j_2\rangle; j_1 - 1, -j_2 + 1\rangle; \dots; j_1 - 2j_2, j_2\rangle$	$j_1 + j_2; j_1 + j_2 - 1; \dots; j_1 - j_2$
$j_1 - j_2 - 1$	$ j_1 - 1, -j_2\rangle; j_1 - 2, -j_2 + 1\rangle; \dots; j_1 - 2j_2 - 1, j_2\rangle$	$j_1 + j_2 - 1; j_1 + j_2 - 1; \dots; j_1 - j_2 - 1$
\vdots	\vdots	\vdots
$j_2 - j_1$	$ 2j_2 - j_1, -j_2\rangle; \dots; -j_1, j_2\rangle$	$j_1 + j_2; j_1 + j_2 - 1; \dots; j_2 - j_1$
\vdots	\vdots	\vdots
$-j_1 - j_2$	$ -j_1, -j_2\rangle$	$j_1 + j_2; j_1 + j_2 - 1; \dots; -j_1 - j_2$

Erlaubte Werte für J sind also $j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2$. Jedes j kommt genau einmal vor. Wir machen die Probe und zählen die Zahl der Zustände ab, wobei $j_1 > j_2$ sei:

$$\begin{aligned} d &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = 2 \cdot \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} j + \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} 1 = 2 \cdot \left[\sum_{j=1}^{j_1+j_2} j - \sum_{j=1}^{j_1-j_2-1} j \right] + \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} 1 = \\ &= 2 \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot (j_1 + j_2) \cdot (j_1 + j_2 + 1) - \frac{1}{2} \cdot (j_1 - j_2 - 1) \cdot (j_1 - j_2) \right) + j_1 + j_2 - (j_1 - j_2 - 1) = \boxed{(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)} \end{aligned}$$

Eine übliche Notation ist:

$$\boxed{j_1 \otimes j_2 = j_1 + j_2 \oplus j_1 + j_2 - 1 \oplus \dots \oplus |j_1 - j_2|}$$

Der Zustand mit höchstem Gewicht $m = j_1 + j_2$ ist eindeutig.

$$|j_1, j_2; j = j_1 + j_2 = m\rangle = 1 \cdot |j_1, j_2; m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle \Leftrightarrow \langle j_1, j_2; j_1, j_2 | j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 \rangle = \boxed{1}$$

Allgemein gilt, wenn man den Absteigeoperator J_- auf einen Zustand $|j, m\rangle$ anwendet:

$$\boxed{J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle}$$

Dann erhält man durch Anwendung von J_- :

$$(J_{1-} + J_{2-}) |j_1, j_2; m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle = \hbar \sqrt{2j_1} \cdot |j_1, j_2; m_1 = j_2 - 1, j_2\rangle + \hbar \sqrt{2j_2} \cdot |j_1, j_2; m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1\rangle$$

$$J_- |j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = \hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)} \cdot |j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1\rangle$$

Damit folgt dann weiter:

$$\boxed{|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle}$$

Aufgrund der Orthogonalität der Zustandsvektoren folgt weiter:

$$|j = j_1 + j_2 - 1, m = j_1 + j_2\rangle = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle$$

Das Vorzeichen vor beiden Wurzeln ist Konvention. (Die Phase kann im Prinzip frei gewählt werden.) Wir machen deshalb Gebrauch von der Phasenkonvention von CONDON-SHORTLEY und zwar wählen wir $\langle j_1, j_2; j_1 = m_1, (j - j_1) = m_2 | j, j \rangle$ reell und außerdem positiv. Fassen wir also zusammen:

- 1.) Sämtliche CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten sind reell; das heißt, es gilt $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = \langle j, m | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle$. Dies folgt aus der Phasenkonvention von CONDON-SHORTLEY.
- 2.) Die CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten verschwinden, außer für $m = m_1 + m_2$ und $j \in \{j_1 + j_2; j_1 + j_2 - 1; \dots; |j_1 - j_2|\}$. Man spricht dabei auch von den **Auswahlregeln**.
- 3.) Unitaritäten, Vollständigkeitsrelationen:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'}$$

$$\sum_{j, m} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \cdot \delta_{m_2 m'_2}$$

- 4.) Rekursionsformeln:

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J_{\pm} | j, m = m_1 + m_2 \mp 1 \rangle &= \langle j, m = m_1 + m_2 \mp 1 | J_{1\mp} + J_{2\mp} | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle^* \\ &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \cdot \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m = m_1 + m_2 \rangle = \\ &= \sqrt{(j_1 + m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \cdot \langle j, m = m_1 + m_2 \mp 1 | j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 \rangle + \\ &+ \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)} \cdot \langle j, m = m_1 + m_2 \mp 1 | j_1, j_2; m_1, m_2 \mp 1 \rangle \end{aligned}$$

Die Rekursionsformeln zusammen mit der CONDON-SHORTLEY-Phasenkonvention bestimmen die CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten eindeutig.

2.7 Anwendung: 2-Nukleon-System mit Spin 1/2

Wir betrachten ein quantenmechanisches System bestehend aus zwei Spin-1/2-Teilchen der Masse M_0 . Mit der reduzierten Masse $\mu = \frac{M_0}{2}$ des Systems und den Relativkoordinaten \vec{r}, \vec{p} lässt sich der HAMILTON-Operator H schreiben als:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) \text{ mit } V(r) = V_1(r) + \frac{1}{2\hbar^2} \cdot V_2(r) \cdot (2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) + \frac{1}{2\hbar^2} \cdot V_3(r) \cdot (2\vec{L} \cdot \vec{S})$$

Wir können das Potential außerdem umschreiben wie folgt:

$$V(r) = V_1(r) + \frac{1}{2\hbar^2} \cdot V_2(r) \cdot \left[(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2 \right] + \frac{1}{2\hbar^2} \cdot V_3(r) \cdot \left[(\vec{L} + \vec{S})^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right]$$

Angewendet auf einen $|\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2\rangle$ -Zustand ergibt:

$$V(r) = V_1 + \frac{1}{2} \cdot V_2(r) \cdot \left[S(S+1) - \frac{3}{2} \right] + \frac{1}{2} \cdot V_3(r) \cdot [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]$$

Damit lässt sich der Zustand des Systems beschreiben durch folgende Wellenfunktion:

$$\sum u(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \otimes |\vec{S}_1^2, S_{1z}\rangle \otimes |\vec{S}_2^2, S_{2z}\rangle = \sum \psi(\vec{r}) \otimes |\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}^2, S_z\rangle$$

Erlaubte Werte von S sind:

1.) $S = 1$:

$$|1, m = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$|1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|1, m = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

Der Zustand mit $S = 1$ ist symmetrisch im Spin und muss damit antisymmetrisch in der Ortswellenfunktion sein: $\psi(\vec{r}) = -\psi(-\vec{r})$. Damit wird die Forderung an ein ungerades l gestellt.

2.) $S = 0$:

$$|0, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$S = 0$ ist antisymmetrisch, womit die Ortswellenfunktion symmetrisch sein muss; also ist l gerade.

Betrachten wir außerdem die Werte für l :

☞ Fall $l = 0$:

Im Falle $l = 0$ ist $s = 0$ und damit auch $j = 0$.

$$V(r) = V_1 - \frac{3}{4} \cdot V_2$$

☞ Fall $l = 1$:

Da $s = 1$ gelten muss, nimmt j die Werte 0, 1 und 2 an.

$$V(r) = V_1 + \frac{1}{4} \cdot V_2 + \frac{1}{2} \cdot V_3 \cdot [j(j+1) - 4] \quad \text{mit } j(j+1) - 4 = \begin{cases} -4 & \text{für } j = 0 & 1 \text{ Zustand} \\ -2 & \text{für } j = 1 & 3 \text{ Zustände} \\ +2 & \text{für } j = 2 & 5 \text{ Zustände} \end{cases}$$

2.7.1 Fermionen mit Bahndrehimpuls l

Es sei $j_1 = l$ und $j_2 = \frac{1}{2}$. Für $l = 0$ ergibt sich $j = 1\frac{1}{2} = j_2$ und für $l > 0$ folgt $j = l \pm \frac{1}{2}$. Konstruktion von:

$$\left| j = l \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle = C_{\uparrow}^{\pm} \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \uparrow \right\rangle + C_{\downarrow}^{\pm} \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \downarrow \right\rangle$$

Für $k = l + \frac{1}{2}$ gilt:

$$C_{\uparrow}^{+} = \left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| j = l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \equiv \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \right.$$

Mit $j_1 = l$, $j_2 = \frac{1}{2}$; $m_1 = m - \frac{1}{2}$, $m' = m + 1$, $j = l + \frac{1}{2}$ ergibt sich, wobei wir zuerst folgende Nebenrechnung machen:

$$\begin{aligned} & \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} + m + 1\right) \cdot \left(l + \frac{1}{2} - m\right)} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \\ & = \sqrt{\left(l - m + \frac{1}{2}\right) \cdot \left(l + m + \frac{1}{2}\right)} \left\langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m + 1 \right\rangle + 0 \\ C_{\uparrow}^{+} & = \left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| j = l + \frac{1}{2}; m \right\rangle \equiv \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \equiv \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \right. \\ & = \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2} + m + 1}} \left\langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m + 1 \right\rangle = \sqrt{\frac{j + m}{j + (m + 1)}} \cdot \sqrt{\frac{j + m + 1}{j + (m + 2)}} \cdot \left\langle m + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \left| j, m + 2 \right\rangle = \right. \\ & = \sqrt{\frac{j + m}{j + j}} \left\langle j - \frac{1}{2}, m_1 = j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \left| j, j \right\rangle = \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} + m}{2l + 1}} \left\langle j - \frac{1}{2}, m_1 = j - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \left| j, j \right\rangle \right. \end{aligned}$$

Die CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten bilden eine orthogonale Matrix:

$$\begin{pmatrix} C_{\uparrow}^+ & C_{\downarrow}^- \\ C_{\uparrow}^- & C_{\downarrow}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{pmatrix} \text{ mit } \sin(\alpha) = \sqrt{1 - (c_{\uparrow}^{\dagger})^2} = \sqrt{1 - \frac{l + \frac{1}{2} + m}{2l + 1}}, C_{\downarrow}^+, C_{\uparrow}^- = \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} - m}{2l + 1}}$$

$$\left| j = l \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle = Y_l^{j=l \pm \frac{1}{2}, m}(\theta, \phi) = \pm \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} \pm m}{2l + 1}} \cdot Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} \mp m}{2l + 1}} Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2l + 1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l + \frac{1}{2} \pm m} Y_{l, m - \frac{1}{2}} \\ \sqrt{l + \frac{1}{2} \mp m} Y_{l, m + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Dies ist ein Eigenvektor von \vec{J}^2 , \vec{L}^2 und J_z . Die Eigenwerte sind gegeben durch $l \pm \frac{1}{2}$, l und m .

2.8 Produkte von Darstellungsmatrizen $\mathcal{D}_{m, m'}^{(j)}(\vec{\omega})$

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right) |j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \underbrace{\langle j, m' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right) |j, m\rangle}_{\mathcal{D}_{m', m}^{(j)}(\vec{\omega})}$$

Die Matrixelemente sind gerade die WIGNER-Funktionen. Andererseits gilt wegen $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_1 \cdot \vec{\omega}\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_2 \cdot \vec{\omega}\right) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_1 \cdot \vec{\omega}\right) |j_1, m_1\rangle \otimes \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_2 \cdot \vec{\omega}\right) |j_2, m_2\rangle = \\ &= \sum_{m'_1, m'_2} |j_1, j_2; m'_1, m'_2\rangle \underbrace{\langle j_1, m'_1 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_1 \cdot \vec{\omega}\right) |j_1, m_1\rangle}_{\mathcal{D}_{m'_1, m_1}^{(j_1)}} \underbrace{\langle j_2, m'_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J}_2 \cdot \vec{\omega}\right) |j_2, m_2\rangle}_{\mathcal{D}_{m'_2, m_2}^{(j_2)}(\vec{\omega})} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m', m}^{(j)}(\vec{\omega}) &= \langle j, m' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right) |j, m\rangle = \\ &= \sum_{m'_1, m'_2} \sum_{m_1, m_2} \underbrace{\langle j, m' | j_1, j_2, m'_1, m'_2\rangle}_{\langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m\rangle} \underbrace{\langle j_1, j_2, m'_1, m'_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle}_{\mathcal{D}_{m'_1, m_1}^{(j_1)}(\vec{\omega}) \mathcal{D}_{m'_2, m_2}^{(j_2)}(\vec{\omega})} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle \end{aligned}$$

Daraus kann man $\mathcal{D}^{(j)}$ explizit aus $\mathcal{D}^{(\frac{1}{2})}$ konstruieren.

2.9 Vektor/Tensor-Operatoren

$\vec{V} = (V_1, V_2, V_3)$ heißt Vektoroperator, wenn \vec{V} sich unter Drehungen wie der Ortsoperator transformiert:

$$\mathcal{D}^{\dagger}(\vec{\omega}) V_i \mathcal{D}(\vec{\omega}) = R_{ij}(\vec{\omega}) V_j = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right) V_i \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{\omega}\right)$$

Es gilt das BAKER-CAMPBELL-HAUSDORFF-Lemma:

$$\exp(A) B \exp(-A) = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots$$

Alternativ kann man die Kommutatorrelationen von v_i und r_i mit J_i betrachten; diese müssen isomorph sein. Für den Ortsoperator $\vec{r} = (r_1, r_2, r_3)$ gilt:

$$[L_i, r_j] = [\varepsilon_{ikl} r_k p_l, r_j] = \varepsilon_{ikl} r_k \underbrace{[p_l, r_j]}_{-i\hbar\delta_{lj}} = -i\hbar\varepsilon_{ikj} r_k = i\hbar\varepsilon_{ijk} r_k$$

$\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$ ist ein Vektoroperator, wenn gilt $[J_i, V_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} V_k$. Wir gehen von der kartesischen Basis über in die J_z -Basis. Für den Ortsoperator wäre das der Übergang $(x, y, z) \mapsto rY_{lm}(\theta, \phi)$. Wir definieren Operator $V_m^{(1)}$ durch folgende Art und Weise:

$$V_m^{(1)} := V_{\pm}^{(1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_1 \pm iV_2), V_0^{(1)} = V_3$$

Wie sehen nun die Kommutatorrelationen $[J_z, V_m^{(1)}]$ und $[J_{\pm}, V_m^{(1)}]$ aus?

$$[J_z, V_{\pm 1}^{(1)}] = \left[J_3, \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_1 \pm iV_2) \right] = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (i\hbar V_2 \pm i \cdot (-i\hbar) \cdot V_1) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \hbar \cdot (V_1 \pm iV_2) = \pm \hbar \cdot V_{\pm 1}^{(1)}$$

$$[J_z, V_0^{(1)}] = [J_z, V_3] = 0 \Rightarrow [J_z, V_m^{(1)}] = \hbar m \cdot V_m^{(1)}$$

$$[J_{\pm}, V_0^{(1)}] = [J_1 + iJ_2, V_3] = -i\hbar V_2 \pm (i)^2 \hbar V_1 = \mp \hbar V_1 - i\hbar V_2 = \underbrace{\mp \hbar (V_1 \pm iV_2)}_{\mp \sqrt{2} V_{\pm 1}^{(1)}} = \hbar \sqrt{2} \cdot V_{\pm 1}^{(1)}$$

Ebenso gilt:

$$[J_+, V_+^{(1)}] = 0 = [J_-, V_-^{(1)}], [J_+, V_-^{(1)}] = \sqrt{2} \hbar V_0^{(1)} = [J_-, V_+^{(1)}]$$

Die Relationen sind ganz analog zu $J_z|j = 1, m\rangle = \hbar m|1, m\rangle$ und $J_{\pm}|1, 0\rangle = \hbar\sqrt{2}|1, \pm 1\rangle$. Wir haben also folgende Korrespondenz:

$$\boxed{V_m^{(1)} \Leftrightarrow |1, m\rangle, [J_i, V_m^{(1)}] \Leftrightarrow J_i|1, m\rangle}$$

Wir wenden die Drehung auf einen dieser Zustände an:

$$\mathcal{D}(\vec{\omega})|1, m\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m', m}(\vec{\omega})|1, m'\rangle$$

$$\mathcal{D}(\vec{\omega})V_m^{(1)}\mathcal{D}^\dagger(\vec{\omega}) = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m', m}^{(N)}(\vec{\omega})V_{m'}^{(1)}$$

$\mathcal{D}_{m', m}$ sind die WIGNER-Matrizen. Ein Zustand korrespondiert also mit einem Vektoroperator.

Definition:

Ein irreduzibler, sphärischer Tensoroperator vom Rang j ist ein Satz von $2j + 1$ Operatoren $T_m^{(j)}$ ($m = -j, -j + 1, \dots, j$) mit:

$$[J_z, T_m^{(j)}] = \hbar m T_m^{(j)}, [J_{\pm}, T_m^{(j)}] = \hbar \sqrt{(j \mp m) \cdot (j \pm m + 1)} T_{m \pm 1}^{(j)}$$

Wir haben wir also auf Operatoren mit wohldefiniertem Drehimpuls verallgemeinert. Kommutatoren haben die gleichen Eigenschaften wie bei der Anwendung auf Zustände. Kommen wir zur Interpretation des ganzen: Die $T_m^{(j)}$ tragen den Drehimpuls $\vec{J}^2 = \hbar^2 j(j + 1)$, $J_z = \hbar m$. Wir betrachten als Beispiel die Multiplikation eines Zustandes mit $Y_l^m(\theta, \phi)$, was ein irreduzibler Tensoroperator darstellt: $Y_l^m(\theta, \phi)\psi_{j', m', E}(\vec{r})$.

Beweis:

$$[L_i, Y_l^m(\theta, \phi)] = (L_i Y_l^m(\theta, \phi)) \Rightarrow L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m, L_{\pm} Y_l^m = \hbar \sqrt{(j \pm m)(j \pm m + 1)} Y_l^{m \pm 1}$$

Beispiel:

Speziell lässt sich ein Quadrupol beschreiben mit einem Satz von Operatoren r_i durch den tensoriellen Ausdruck $r_i r_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} r^2$. Sei beispielsweise $i = 3$ und $j = 1$:

$$z \cdot x = r^2 \cos \theta \sin \theta \cdot \frac{\exp(i\varphi) + \exp(-i\varphi)}{2}$$

Mittels der Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{l=2}^{m=\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \exp(\pm i\varphi)$$

lässt sich dies ausdrücken durch eine Linearkombination dieser Kugelflächenfunktionen:

$$z \cdot x \sim r^2 \cdot (Y_2^{+1} + Y_2^{-1})$$

Dies besitzt eine sehr häufige Anwendung in der Kernphysik.

2.10 Matrixelemente von Tensoroperatoren

Das Matrixelement $\langle \alpha', j, m | T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle$ verschwindet für $m \neq m_1 + m_2$. (Als Beispiel lässt sich hier \langle Eigenzustand des H-Atoms—Dipoloperator—Eigenzustand des H-Atoms \rangle anführen.) Wir wollen dies nun beweisen:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \alpha', j, m | [J_z, T_{m_1}^{(j_1)}] - \hbar m_1 T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle = \langle \alpha', j, m | (\hbar m - \hbar m_2 - \hbar m_1) T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle = \\ &= \hbar(m - m_1 - m_2) \langle \alpha', j, m | T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle \end{aligned}$$

Genauso funktioniert dies für $[J_{\pm}, T_m^{(j)}]$.

$$\hbar \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle \alpha', j, m | T_{m_1 \mp 1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle = \langle \alpha', j, m | [J_{\mp}, T_{m_1}^{(j_1)}] | \alpha, j_2, m_2 \rangle$$

$$\hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha', j, m \pm 1 | T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle = \langle \alpha', j, m | J_{\pm} T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle$$

$$-\hbar \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)} \langle \alpha', j, m | T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \mp 1 \rangle - \langle \alpha', j, m | T_{m_1}^{(j_1)} J_{\mp} | \alpha, j_2, m_2 \rangle$$

(Vergleiche mit Rekursionsformel für CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten!)

Die Matrixelemente $\langle \alpha', j, m | T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle$ und die CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ erfüllen das gleiche lineare Gleichungssystem. Die Rekursionsformeln sind nichts anderes als ein lineares Gleichungssystem; Lösungen dieser Gleichungssysteme sind proportional zueinander.

2.11 Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle \alpha', j', m | T_{m_1}^{(j_1)} | \alpha, j_2, m_2 \rangle = \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \cdot \underbrace{\langle \alpha', j | | T^{(j_1)} | | \alpha, j_2 \rangle}_{\sqrt{2j_2+1}}$$

$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ sind die CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten. Die beiden senkrechten Striche $\|$ bedeuten, dass es sich um kein Matrixelement handelt, sondern nur um irgendeine komplexe Zahl; man spricht dann von einem reduzierten Matrixelement. $\langle \alpha', j | | T^{(j_1)} | | \alpha, j_2 \rangle$ hängt **nicht** mehr von m_1 , m_2 und m ab. Es ist damit eine Vorhersage über Verhältnisse von reduzierten Matrixelementen möglich und darüber hinaus, wie stark Übergänge zwischen verschiedenen m 's sind (siehe Übungszettel). Wie genau die Matrixelemente aussehen, ist nicht mehr wichtig. Damit hat das WIGNER-ECKART-Theorem vielläufige Anwendungen wie beispielsweise der β -Zerfall und Isospin.

2.11.1 Projektionstheorem

V_q sei ein Vektoroperator. Dann gilt

$$\langle \alpha', j', m' | V_q | \alpha, j, m \rangle = \frac{\langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m' | J_q | j, m \rangle$$

wobei J_q gegeben ist durch $J_{\pm 1} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (J_1 \pm iJ_2)$ und $J_0 = J_3$.

Beweis:

$$\langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle = \langle \alpha', j, m | J_0 \cdot V_0 - J_{+1} \cdot V_{-1} - J_{-1} \cdot V_{+1} | \alpha, j, m \rangle = C_{jm} \langle \alpha', j | V | \alpha, j \rangle$$

C_{jm} hängt nicht von α , α' und V ab. $\vec{J} \cdot \vec{V}$ ist ein skalarer Operator mit $[J_i, \vec{J} \cdot \vec{V}] = 0$. Das WIGNER-ECKART-Theorem besagt für $j_1 = 0$ und $j_2 = j$:

$$\langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle = \underbrace{\langle 0, j; 0, m | j, m \rangle}_{=1} \cdot \frac{\langle \alpha', j | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

C_{jm} ist also m -unabhängig.

2.12 Projektionstheorem: Matrixelement eines Vektoroperators

$$\langle \alpha', j, m' | V_q | \alpha, j, m \rangle = \frac{\langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m' | J_q | j, m \rangle$$

Wir hatten gesehen:

$$\langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle = C_j \cdot \langle \alpha', j | V | \alpha, j \rangle$$

Speziell für $\vec{V} = \vec{J}$ und $\alpha' = \alpha$ gilt:

$$\langle \alpha, j, m | \vec{J}^2 | \alpha, j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1) = C_j \cdot \langle \alpha, j | J | \alpha, j \rangle$$

Betrachten wir nun das WIGNER-ECKART-Theorem:

$$\langle \alpha', j, m' | V_q | \alpha, j, m \rangle = \langle 1, j; q, m | j, m' \rangle \langle \alpha', j | V | \alpha, j \rangle$$

$$\langle \alpha, j, m | J_q | \alpha, j, m \rangle = \langle 1, j; q, m | j, m' \rangle \langle \alpha, j | J | \alpha, j \rangle$$

Wir drücken den CLEBSCH-GORDON-Koeffizienten aus durch die untere Gleichung und schreiben damit die obere Gleichung als:

$$\begin{aligned} \langle \alpha', j, m | V_q | \alpha, j, m \rangle &= \frac{\langle \alpha, j, m | J_q | \alpha, j, m \rangle}{\langle \alpha, j | J | \alpha, j \rangle} \langle \alpha', j | V | \alpha, j \rangle = \frac{\langle \alpha, j, m | J_q | \alpha, j, m \rangle}{\langle \alpha, j | J | \alpha, j \rangle} \cdot \frac{\langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle}{C_j} = \\ &= \frac{\langle \alpha', j, m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m' | J_q | j, m \rangle \end{aligned}$$

Beachte, dass $\langle j, m' | J_q | j, m \rangle$ gegeben ist durch:

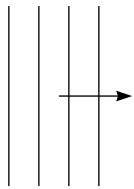
$$\textcircled{R} \quad q = 0: \langle j, m' | J_z | j, m \rangle = \hbar m \delta_{m'm}$$

$$\textcircled{R} \quad q = \pm 1: \left\langle j, m' \left| \mp \frac{1}{\sqrt{2}} J_{\pm} \right| j, m \right\rangle = \mp \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \delta_{m', m \pm 1}$$

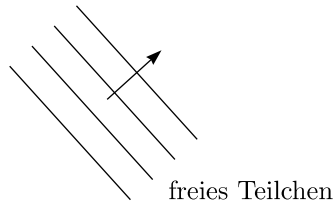
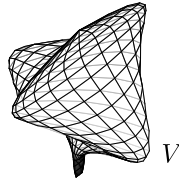
Kapitel 3

Streuprozesse

3.1 Einführung



ebene Welle



Benötigt wird die Drehimpulszerlegung von Energie-Eigenzuständen freier Teilchen. Der HAMILTON-Operator für zentralsymmetrische Potentiale $V(r)$ sei H . Dann lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$H\psi_{E,l,m} = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} \right) + V(r) \right] \psi_{E,l,m} = E\psi_{E,l,m} = ER_{E,l}(r)Y_l^m(\theta, \phi) \text{ mit}$$

$$\frac{\vec{L}^2}{2mr^2}\psi_{E,l,m} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m \cdot r^2}\psi_{E,l,m}$$

Hier sei $V = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{E,l}(r) = ER_{E,l}$$

Wir setzen nun $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ (Wellenzahl für freies Teilchen) und $R_{E,l} = \frac{U_{E,l}}{r}$:

$$k^2 \cdot \left(\frac{d^2}{d(k \cdot r)^2} + k^2 - k^2 \cdot \frac{l(l+1)}{(k \cdot r)^2} \right) U_{E,l}(\varrho) = 0$$

Die Energieabhängigkeit verschwindet für $U_l(\varrho) = U_{E,l}(r)$ mit $\varrho = k \cdot r$. Mit $k \cdot R_{E,l}(r) = \frac{U_l(k, r)}{k \cdot r}$ ist folgende Differentialgleichung zu lösen:

$$\boxed{\left(-\frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \right) U_l(\varrho) = +U_l(\varrho)}$$

Der Trick, um diese Differentialgleichung zu lösen, ist Auf- und Absteigeoperatoren einzuführen:

$$d_l = \frac{d}{d\varrho} + \frac{l+1}{\varrho}, \quad d_l^\dagger = -\frac{d}{d\varrho} + \frac{l+1}{\varrho} \text{ wegen } \left(\frac{d}{d\varrho} \right)^\dagger = -\frac{d}{d\varrho}$$

Entsprechend gilt für $d_l d_l^\dagger$:

$$d_l d_l^\dagger = \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} \right) \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} \right) = -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{(l+1)^2}{\rho^2} + \underbrace{\left[\frac{d}{d\rho}, \frac{l+1}{\rho} \right]}_{-\frac{l+1}{\rho^2}} = -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}$$

Damit können wir die SCHRÖDINGER-Gleichung durch die Operatoren d_l und d_l^\dagger ausdrücken, nämlich $d_l d_l^\dagger U_l = U_l$.

$$d_l^\dagger d_l = -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{(l+1)^2}{\rho^2} + \frac{l+1}{\rho^2} = -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2} = d_{l+1} d_{l+1}^\dagger$$

$$d_l^\dagger (d_l d_l^\dagger U_l) = d_l^\dagger U_l = (d_l^\dagger d_l) d_l^\dagger U_l = (d_{l+1} d_{l+1}^\dagger) \underbrace{d_l^\dagger U_l}_{U_{l+1}}$$

Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für $l+1$ gegeben durch Lösung für l :

$$\boxed{U_{l+1}(\rho) = d_l^\dagger U_l} \xrightarrow{l=0} \boxed{-\frac{d^2}{d\rho^2} U_0 = U_0}$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung kennen wir aus dem ersten Semester; es handelt sich nämlich um die Differentialgleichung für den harmonischen Oszillator:

$$U_0(\rho) = \begin{cases} \sin(\rho) \\ \cos(\rho) \end{cases} \Rightarrow R_0(\rho) = \begin{cases} \frac{\sin(\rho)}{\rho} & \text{regulär} \\ \frac{\cos(\rho)}{\rho} & \text{singulär} \end{cases}$$

Für $\rho > \rho_{min} > 0$ sind beide Lösungen erlaubt. Für $0 \leq \rho \leq \rho_{min}$ ist nur die reguläre Lösung erlaubt. Wir multiplizieren U_{l+1} mit $\frac{1}{\rho^{l+2}}$:

$$U_{l+1} = \rho \cdot R_{l+1} = d_l^\dagger (\rho \cdot R_l) = -R_l - \rho \cdot R_l' + R_l(l+1) = \rho \cdot \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} \right) R_l = \rho^{l+1} \left(-\frac{d}{d\rho} \right) \frac{R_l}{\rho^l}$$

$$\Leftrightarrow \frac{R_{l+1}}{\rho^{l+1}} = \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) \frac{R_l}{\rho^l} = \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^2 \frac{R_{l-1}}{\rho^{l-1}} = \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^{l+1} \frac{R_0}{\rho^0} = \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^{l+1} R_0$$

Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für Drehimpuls l lautet also:

$$\text{☞ Regulär: } R_l(\rho) = j_l(\rho) = \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin(\rho)}{\rho}$$

$j_l(\rho)$ sind sphärische BESSEL-Funktionen der Ordnung l .

$$\text{☞ Singulär: } -R_l(\rho) = n_l(\rho) = \rho^l \left(-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{-\cos(\rho)}{\rho}$$

Bei $n_l(\rho)$ handelt es sich um sphärische NEUMANN-Funktionen.

Schreiben wir explizit einige dieser Funktionen auf:

$$j_0(\rho) = \frac{\sin(\rho)}{\rho}, \quad j_1(\rho) = \frac{\sin(\rho)}{\rho^2} - \frac{\cos(\rho)}{\rho}$$

$$j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cdot \sin(\rho) - \frac{3 \cos(\rho)}{\rho^2} \sim \rho^2 \text{ für } \rho \mapsto 0$$

Allgemein gilt:

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \sim \rho^l$$

$$j_l(\varrho) \xrightarrow{\text{gro\ss e } \varrho} \frac{1}{\varrho} \sin\left(\varrho - \frac{l\pi}{2}\right)$$

Die Wellenfunktion eines freien Teilchens mit Energie E und Drehimpuls l ergibt sich also durch:

$$\psi_{E,l,m}(r) = j_l(k \cdot r) Y_l^m(\theta, \phi) \text{ mit } E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m}$$

Eine alternative Basis für ein freies Teilchen der Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ sind ebene Wellen. Diese müssen sich in Drehimpulzeigenzustände aufgrund der Vollständigkeit dieser Basis zerlegen lassen:

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) = \sum_{l,m} C_{l,m} j_l(k \cdot r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Betrachten wir speziell $\vec{k} = k(0, 0, 1) = k\hat{z}$ und damit $\vec{k} \cdot \vec{x} = kr \cos \theta$:

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l,m} C_{l,m} j_l(k \cdot r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

Die linke Seite ist ϕ -unabhängig. Die Kugelflächenfunktionen ohne ϕ -Abhängigkeit sind die mit $m = 0$. Damit muss also $C_{lm} = 0$ für $m \neq 0$ gelten:

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \cdot P_l(\cos \theta)$$

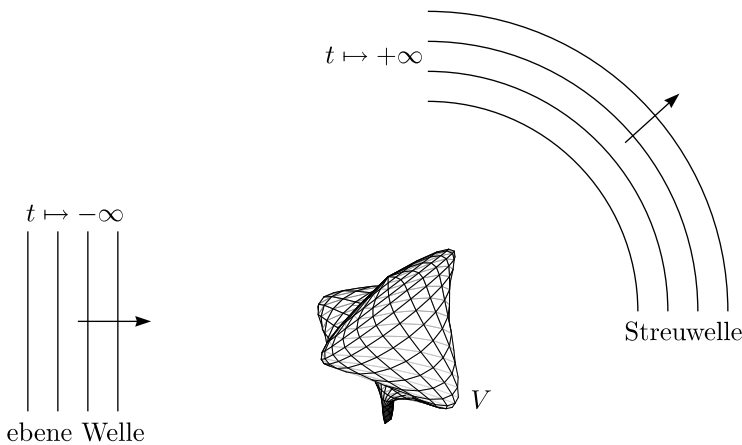
Damit folgt weiter:

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_l C_{l,0} j_l(k \cdot r) Y_l^0(\theta, \phi) = \sum_l \tilde{C}_l j_l(k \cdot r) P_l(\cos \theta)$$

Mit $\int_{-1}^{+1} dc P_l(c) P_{l'}(c) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$ erhalten wir $\int_{-1}^{+1} \exp(ikr) P_l(c) dc = \tilde{C}_l j_l(k \cdot r) \cdot \frac{2}{2l+1}$ mit $\tilde{C}_l = i^l \cdot (2l+1)$.

$$\exp(ikr \cos \theta) = \sum_l i^l \cdot (2l+1) \cdot j_l(k \cdot r) \cdot P_l(\cos \theta)$$

3.2 Formale Streutheorie



Die SCHRÖDINGER-Gleichung für das Problem lautet:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\psi(t)\rangle = V|\psi(t)\rangle \text{ mit } H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Die Randbedingung ist $|\psi(t)\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} |\phi, t\rangle$, wobei $|\phi, t\rangle$ die Lösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung ist, also eine ebene Welle/Wellenpaket. Wir schalten das Potential adiabatisch an: $V \mapsto V \exp(\eta \cdot t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} 0$, wobei $\eta > 0$ und $\ll 1$ (infinitesimal) sei. Für die Zeitabhängigkeit machen wir den Ansatz der GREEN-Funktion:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G_+(t, t') = \delta(t - t')$$

Aufgrund der Kausalität gilt $G_+(t, t') = 0$ für $t < t'$, bevor also das δ -Signal passiert. Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist gegeben durch:

$$|\psi^{(+)}(t)\rangle = |\phi, t\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t, t') V |\psi^{(+)}(t')\rangle dt'$$

$|\phi, t\rangle$ ist wieder eine ebene Welle. Dies ist nämlich die Standardanwendung von GREEN-Funktionen; setzen wir die Lösung in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein, so erhalten wir:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\psi^{(+)}(t)\rangle = 0 + \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G_+(t, t')}_{\delta(t-t')} V |\psi^{(+)}(t')\rangle dt' = V |\psi^{(+)}(t)\rangle$$

Mit der Randbedingung für $t \mapsto -\infty$ gilt:

$$|\psi^{(+)}(t)\rangle = |\phi, t\rangle + \int_{-\infty}^t G_+(t, t') V \exp(\eta \cdot t') |\psi^{(+)}(t')\rangle dt' \mapsto |\phi, t\rangle$$

Für $t' < t$ folgt $\exp(\eta \cdot t') < \exp(\eta \cdot t)$, aber $\exp(\eta \cdot t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} 0$.

$$\text{Die Lösung für } G_+ \text{ ist } G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \cdot \theta(t - t') \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t - t')\right).$$

Die obigen Forderungen sind erfüllt:

☞ $G_+ = 0$ für $t < t'$

☞ Einsetzen in die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G_+(t, t') &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \theta(t - t') \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t - t')\right) \right] = \\ &= \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial t} \theta(t - t') \right]}_{\delta(t-t')} \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t - t')\right) - \frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \cdot \left(i\hbar \cdot \left(-\frac{i}{\hbar} H_0\right) - H_0 \right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0(t - t')\right) = \\ &= \delta(t - t') \end{aligned}$$

Wir betrachten Energieeigenzustände:

$$|\phi, t\rangle = |\phi\rangle \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right), \quad |\psi, t\rangle = |\psi^{(+)}\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right)$$

Für $t = 0$ ist:

$$\begin{aligned}
 |\psi^{(+)}\rangle &= |\phi\rangle + \int_{-\infty}^{t=0} \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar}H_0 t'\right) V \exp(\eta \cdot t') |\psi^{(+)}\rangle \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et'\right) dt' = \\
 &= |\phi\rangle + \int_{-\infty}^{t=0} \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot (E - H_0 \cdot t + i\eta\hbar) \cdot t'\right) V |\psi^{(+)}\rangle dt' = \\
 &= |\phi\rangle + \frac{\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot (E - H_0 + i\eta\hbar) \cdot t'\right)}{E - H_0 + i\eta\hbar} \Bigg|_{t'=-\infty}^{t'=0} V |\psi^{(+)}\rangle
 \end{aligned}$$

Hieraus folgt also die LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung:

$$\boxed{|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V |\psi^{(+)}\rangle} \quad \text{mit } \varepsilon = \eta\hbar > 0 \text{ und } \ll 1$$

In der Ortsbasis $|\vec{x}\rangle$ lautet die LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle + \int d^3 \vec{x}' \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} \right| \vec{x}' \right\rangle \langle \vec{x}' | V | \psi^{(+)} \rangle$$

$\langle \vec{x} | \phi \rangle$ ist eine einlaufende ebene Welle, die freie Teilchenzustände beschreibt:

$$\langle \vec{x} | \phi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right)$$

Oben kommt außerdem das Matrixelement von $\frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}$ vor:

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \vec{x}' \right\rangle$$

Der Grund für den Vorfaktor $\frac{\hbar^2}{2m}$ ist folgender:

$$\begin{aligned}
 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} &= \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left[E - \frac{\vec{p}^2}{2m} \pm i\varepsilon \right]^{-1} = \left[\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \left(E + \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \pm i\varepsilon \right) \right]^{-1} = \left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \vec{\nabla}^2 \pm i\varepsilon \right]^{-1} = \\
 &= \left[\vec{\nabla}^2 + \vec{k}^2 \right]^{-1} \quad \text{mit } \vec{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}
 \end{aligned}$$

$\vec{\nabla}^2 + \vec{k}^2$ ist der sogenannte HELMHOLTZ-Operator, welcher aus der Elektrodynamik bekannt ist. G_{\pm} ist das Inverse des HELMHOLTZ-Operators.

$$\begin{aligned}
 (\vec{\nabla}_x^2 + \vec{k}^2) G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') &= \left(\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) \left\langle \vec{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \vec{x}' \right\rangle = \\
 &= \left\langle \vec{x} \left| (E - H_0) \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \vec{x}' \right\rangle = \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')
 \end{aligned}$$

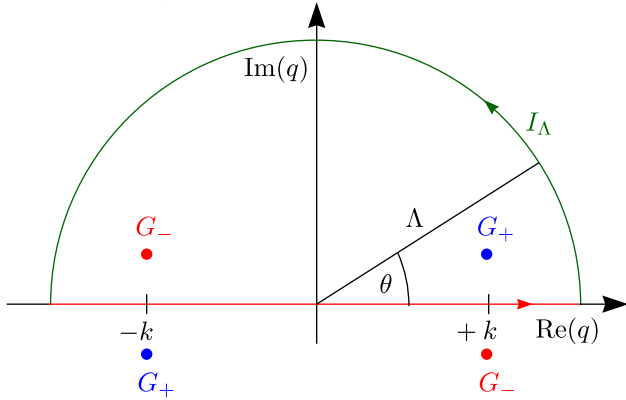
Wir berechnen G_{\pm} :

$$\begin{aligned}
 G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 \vec{p}' d^3 \vec{p}'' \langle \vec{x} | \vec{p}' \rangle \left\langle \vec{p}' \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \vec{p}'' \right\rangle \langle \vec{p}'' | \vec{x}' \rangle = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 \vec{p}' d^3 \vec{p}'' \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}\right)}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{1}{E - \frac{\vec{p}'^2}{2m} \pm i\varepsilon} \cdot \delta(\vec{p}' - \vec{p}'') \cdot \frac{\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}'' \cdot \vec{x}'\right)}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3 \vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')\right) \cdot \frac{\frac{2m}{\hbar^2}}{\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m \cdot \vec{p}'^2}{\hbar^2 \cdot 2m} \pm i\varepsilon} \stackrel{\vec{p}' \equiv \hbar \vec{q}}{=} \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\vec{q} \cdot (\vec{x} - \vec{x}'))}{\vec{k}^2 - \vec{q}^2 \pm i\varepsilon}
 \end{aligned}$$

Wir wählen das Koordinatensystem geschickt; wir legen die z -Achse parallel zu $(\vec{x} - \vec{x}')$, womit sich das Integral schön berechnen lässt:

$$\begin{aligned}
 G_+(\vec{x}, \vec{x}') &= \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi \exp(iq|\vec{x} - \vec{x}'| \cos \theta) \stackrel{R \equiv |\vec{x} - \vec{x}'|}{=} \\
 &\stackrel{R \equiv |\vec{x} - \vec{x}'|}{=} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \cdot 2\pi \cdot \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \frac{d}{d(\cos \theta)} \left(\frac{\exp(iqR \cos \theta)}{iqR} \right) = \\
 &= \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} \cdot \frac{2\pi}{iqR} \cdot \exp(iqR \cos \theta) \Big|_{\cos \theta = -1}^{+1} = \\
 &= -i \int_0^\infty \frac{dq}{(2\pi)^2 \cdot R} \cdot [q \cdot \exp(iqR) - q \cdot \exp(-iqR)] \cdot \frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} = \\
 &= -i \int_0^\infty \frac{dq}{(2\pi)^2 \cdot R} \cdot [q \cdot \exp(iqR) + q' \cdot \exp(iq'R)] \Big|_{q'=-q} \cdot \frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\varepsilon} = \\
 &= \frac{i}{4\pi^2 R} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{q \cdot \exp(iqR)}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon} \equiv \frac{i}{4\pi^2 \cdot R} \cdot I
 \end{aligned}$$

Wir wollen das Integral I berechnen. Dazu benutzen wir Methoden aus der Funktionentheorie. Wir betrachten dazu einen geschlossenen Integrationsweg auf der komplexen Ebene, der aus einer Geraden auf der Realachse von $-\infty$ bis $+\infty$ und einem Halbkreis in der oberen Halbebene besteht:



Den Halbkreis parametrisieren wir durch $q = \Lambda \cdot \exp(i\theta)$ mit $dq = i\Lambda \exp(i\theta) d\theta$. Dann integrieren wir entlang dieses Halbkreises:

$$\begin{aligned}
 I_\Lambda &= \int i\Lambda \exp(i\theta) d\theta \frac{\Lambda \cdot \exp(i\theta) \cdot \exp(iR \cdot [\Lambda \cos \theta + i\Lambda \sin \theta])}{\Lambda^2 \cdot \exp(2i\theta) - k^2 \mp i\varepsilon} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow \infty} \\
 &\int i\Lambda \exp(i\theta) \cdot \frac{1}{\Lambda} \exp(-\Lambda \cdot R \cdot \sin \theta) \cdot \text{Phase} d\theta \xrightarrow{\Lambda \rightarrow \infty} 0
 \end{aligned}$$

Das Integral über den Halbkreis verschwindet also, wenn der Radius Λ des Halbkreises gegen unendlich strebt. Da dieses Integral also keinen Beitrag liefert, können wir unser Ausgangsintegral I als geschlossenes Wegintegral schreiben:

$$I = \oint dq \frac{q \cdot \exp(iqR)}{q^2 - k^2 \mp i\varepsilon}$$

Die Singularitäten liegen bei $q = \sqrt{k^2 \pm i\varepsilon}$ und $q = -\sqrt{k^2 \pm i\varepsilon}$.

$$q = \sqrt{k^2 \pm i\varepsilon} = k \cdot \sqrt{1 \pm i \frac{\varepsilon}{k^2}} \approx k \cdot \left(1 \pm i \cdot \frac{\varepsilon}{2k^2} \right) \approx k \pm i\varepsilon' \text{ mit } \varepsilon' > 0$$

Nach dem Residuensatz ergibt sich das Integral als Summe über alle Residuen innerhalb des geschlossenen Weges und Multiplikation mit $2\pi i$:

$$I = 2\pi i \cdot \text{Res} \left(\frac{q \cdot \exp(iqR)}{(q-k)(q+k)} \right) \Big|_{q=\pm k} = 2\pi i \cdot \left(\frac{\pm k}{\pm 2k} \right) \cdot \exp(\pm ikR) = \pi i \cdot \exp(\pm ikR)$$

Also folgt schlussendlich:

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{\exp(\pm ikR)}{4\pi R} = -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{\exp(\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|)}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

Die Streulösung ist gegeben durch:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle - \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \int d^3 \vec{x}' \frac{\exp(ik|\vec{x} - \vec{x}'|)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \cdot \langle \vec{x}' | V | \psi^{(+)} \rangle$$

$\frac{1}{R} \cdot \exp(ikR) \cdot \exp(-i\omega t)$ beschreibt eine auslaufende Kugelwelle.

3.2.1 Lokales Potential

Wir wollen uns mit folgenden Fällen näher beschäftigen:

☞ V ist eine Funktion von \vec{x} :

$$\langle \vec{x}' | V | \vec{x}'' \rangle = V(\vec{x}') \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'')$$

☞ $V = V(\vec{x}, \vec{p})$ ist ein Polynom in \vec{p} :

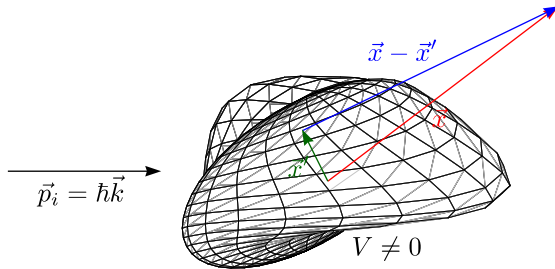
$$\langle \vec{x}' | V | \vec{x}'' \rangle = V \left(\vec{x}', \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{x}'} \right) \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'')$$

Hieraus folgt:

$$\langle \vec{x}' | V | \psi^{(+)} \rangle = \int d^3 \vec{x}'' \underbrace{\langle \vec{x}' | V | \vec{x}'' \rangle}_{V(\vec{x}') \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'')} \langle \vec{x}'' | \psi^{(+)} \rangle = V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle$$

Wir betrachten eine einlaufende ebene Welle mit Impuls $\vec{p}_i = \hbar \vec{k}$:

$$|\phi\rangle = |\vec{k}\rangle \text{ mit } \langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}') \Rightarrow \langle \vec{x} | \phi \rangle = \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}$$



Es sei \vec{x} sehr groß:

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = \sqrt{r^2 - 2\vec{x} \cdot \vec{x}' + r'^2} \approx r \cdot \sqrt{1 - \frac{2\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r^2}} \approx r \cdot \left(1 - \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r^2} \right) = r - \frac{\vec{x}}{r} \cdot \vec{x}' + O\left(\frac{r'}{r}\right) = r - \hat{x} \cdot \vec{x}' + O\left(\frac{r'}{r}\right)$$

Mit $\vec{k}' = k\hat{x}$ können wir dies auch folgendermaßen ausdrücken:

$$k|\vec{x} - \vec{x}'| \approx k \cdot r - k\hat{x} \cdot \vec{x}' = k \cdot r - \vec{k}' \cdot \vec{x}'$$

Damit folgt die Streulösung:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle &= \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \int d^3 \vec{x}' \frac{\exp(ikr) \cdot \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{x}')}{r} V(\vec{x}') \cdot \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) + \frac{\exp(ikr)}{r} \cdot f(\vec{k}, \vec{k}') \right] \end{aligned}$$

Die Funktion $f(\vec{k}, \vec{k}')$ ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} f(\vec{k}, \vec{k}') &= -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \int d^3 \vec{x}' \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{x}') \cdot V(\vec{x}') \cdot (2\pi)^{\frac{3}{2}} \cdot \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \int d^3 \vec{x}' \underbrace{\langle \vec{x}' | \vec{k} \rangle^*}_{\langle \vec{k}' | \vec{x}' \rangle} \cdot (2\pi)^3 \cdot V(\vec{x}') \cdot \langle \vec{x}' | \psi^{(+)} \rangle = \boxed{-\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle} \end{aligned}$$

3.2.2 Wirkungsquerschnitt

Dieser ist definiert durch:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\text{Anzahl der gestreuten Teilchen pro Zeit}}{\text{Anzahl der einlaufenden Teilchen pro Flächeneinheit und pro Zeiteinheit}} = \\ &= \frac{\text{Gestreuter Fluss} \cdot \text{Fläche}}{\text{Einlaufender Fluss}} = \frac{|\vec{j}_{gestr}| \cdot r^2 d\Omega}{|\vec{j}_{eintl}|} \end{aligned}$$

Der Strom \vec{j} ist gegeben durch:

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{m} \cdot \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right) = \frac{\hbar}{m} \cdot \text{Im} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi \right)$$

Dies ergibt sich aus $\text{Im}(z) = \frac{1}{2i}(z + z^*)$. Damit folgt weiter:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\left| \frac{f(\vec{k}, \vec{k}')}{r^2} \right|^2}{1} \cdot r^2 d\Omega \Rightarrow \boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}, \vec{k}')|^2}$$

☞ Ebene Welle: $\psi = N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})$

$$\vec{\nabla} \psi = i\vec{k} \psi \Rightarrow \vec{j} = \frac{\hbar}{m} \cdot \vec{k} \cdot |N|^2$$

☞ Sphärische Welle: $\psi = N' \cdot \frac{\exp(ikr)}{r}$

$$\vec{\nabla} \psi = N' \cdot \left[ik \cdot \frac{\exp(ikr)}{r} - \frac{\exp(ikr)}{r^2} \right] \cdot \hat{x}$$

3.3 Bornsche Näherung

Allgemein ist eine iterative Lösung von f als Funktion von V , $\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle$ möglich. In der niedrigsten Ordnung (BORN-Approximation) gilt:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})$$

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \int d^3 \vec{x}' \exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}') V(\vec{x}') \text{ mit } \vec{k} - \vec{k}' = \vec{q}$$

Dabei handelt es sich um die FOURIER-Transformation des Potentials V . Betrachten wir den Spezialfall eines kugelsymmetrischen Potentials $V(\vec{x}) = V(r)$ mit $r = |\vec{x}|$, wobei wir die z -Achse in \vec{q} -Richtung legen:

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{x} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}) V(r) &= \int_0^\infty r^2 dr V(r) \int d\Omega \exp(iqr \cos \theta) = \\ &= \int_0^\infty r^2 dr V(r) \cdot 2 \cdot 2\pi \cdot \frac{\exp(iqr) - \exp(-iqr)}{2iqr} = \frac{4\pi}{q} \cdot \int_0^\infty r dr \sin(q \cdot r) \cdot V(r) \end{aligned}$$

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q} \cdot \int_0^\infty dr r \cdot \sin(q \cdot r) \cdot V(r)$$

1.) Die Winkel- und Energieabhängigkeit des BORNSchen Wirkungsquerschnittes steckt in:

$$\begin{aligned} q &= |\vec{k} - \vec{k}'| = \sqrt{k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}' + k'^2} = \sqrt{k^2 - 2k^2 \cdot \cos \theta + k^2} = k \cdot \sqrt{2 - 2 \cdot \cos \theta} = \\ &= k \cdot \sqrt{2 \cdot (1 - \cos \theta)} = 2k \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$$

Man kann also entweder die Energie oder den Winkel ändern, um das Potential experimentell auszumessen.

2.) Da H hermitesch ist, ist V und damit (\vec{k}, \vec{k}') reell. Dies gilt **nur** in der BORN-Approximation.

3.) $f^{(1)}$ ist FOURIER-Transformation von V . Damit ist die Rekonstruktion von $V(q)$ aus $\sqrt{\frac{d\sigma}{d\Omega}} \approx |f^{(1)}|$ möglich.

3.3.1 Beispiel: Yukawa-Potential

Wir wollen unsere bisherigen Erkenntnisse nochmals zusammenfassen; die Streulösung lautet:

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle \stackrel{\text{groB}}{\approx} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \left[\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) + \frac{\exp(i\vec{k}' \cdot \vec{x})}{r} f(\vec{k}', \vec{k}) \right]$$

Der Wirkungsquerschnitt ist:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}', \vec{k})|^2 \text{ mit } f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle$$

In der BORNSchen Näherung gilt:

$$f^{(1)}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$$

Der Index 1 bezeichnet den ersten Term der Reihenentwicklung. Für ein Zentralkraftpotential, also $V = V(r)$, haben wir erhalten:

$$f^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q} \cdot \int_0^\infty r \cdot \sin(q \cdot r) \cdot V(r) dr \text{ mit } q = |\vec{k} - \vec{k}'| = 2k \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

Wir betrachten als Beispiel das YUKAWA-Potentials, wobei μ die Masse des Austauschteilchens ist:

$$V(r) = V_0 \cdot \frac{\exp(-\mu \cdot r)}{r}$$

$$\begin{aligned}
 f^{(1)}(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q} \cdot \text{Im} \left[\int_0^\infty dr r \cdot V_0 \cdot \frac{\exp(-\mu \cdot r)}{r} \cdot \exp(iqr) \right] = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q} \cdot \text{Im} \left(V_0 \cdot \frac{1}{\mu - iq} \right) = \\
 &= -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q} \cdot \text{Im} \left(V_0 \cdot \frac{\mu + iq}{\mu^2 + q^2} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q} \cdot V_0 \cdot \frac{q}{\mu^2 + q^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot V_0 \cdot \frac{1}{\mu^2 + q^2}
 \end{aligned}$$

Damit lautet die BORNsche Näherung:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq |f^{(1)}|^2 = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{[4k^2 \cdot \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \mu^2]^2}}$$

Dies beschreibt beispielsweise die Streuung von π and p (π -Austausch (Modell!)). Beachte: Für das COULOMB-Potential ist die BORNsche Näherung nicht ohne weiteres anwendbar!

3.3.2 Coulomb-Fall

Mit $\mu = 0$ ergibt sich das COULOMB-Potential aus dem YUKAWA-Potential. Damit wollen wir die Formel für die RUTHERFORD-Streuung herleiten. Mit

$$V_0 = \frac{Z \cdot Z' \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad \text{und} \quad E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m}$$

erhalten wir:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{klassisch}} = \left(\frac{2m \cdot Z \cdot Z' \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}}{\hbar^2 \cdot k^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{16 \cdot \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} = \boxed{\frac{1}{16} \cdot \left(\frac{Z \cdot Z' \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot E} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}}$$

3.4 Übergangoperator (Transitionsoperator) T

Wir betrachten $V|\psi^{(+)}\rangle = T|\phi\rangle$, wodurch T definiert wird. Dies vergleichen wir mit der LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung:

$$V|\psi^{(+)}\rangle = V|\phi\rangle + V \cdot \frac{1}{E - H + i\epsilon} V|\psi^{(+)}\rangle = V|\phi\rangle + V \cdot \frac{1}{E - H + i\epsilon} T|\phi\rangle$$

Damit ergibt sich folgende Operatoridentität:

$$T|\phi\rangle = \left(V + V \cdot \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T \right) |\phi\rangle \quad \forall |\phi\rangle \Rightarrow \boxed{T = V + V \cdot \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T}$$

Hieraus ergibt sich durch Rekursion eine Reihenentwicklung (im Vergleich zur geometrischen Reihe):

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots$$

Die Streuamplitude f ergibt sich durch folgenden exakten Ausdruck:

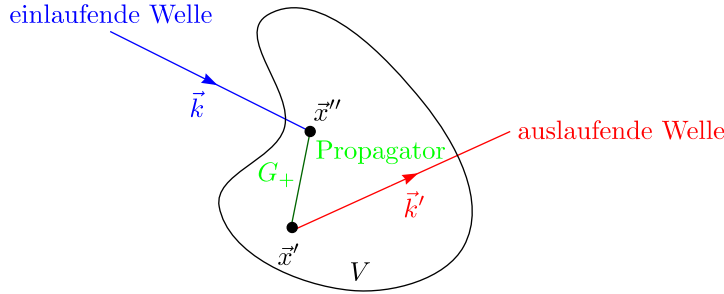
$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \cdot \langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle = -\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar} \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\vec{k}', \vec{k})$$

Vergleiche dies mit der Reihenentwicklung, in der Terme $\sim V^n$ vorkommen. Für $n = 1$ ergibt sich die BORNsche Näherung. Mit $n = 2$ folgt:

$$\begin{aligned}
 f^{(2)}(\vec{k}', \vec{k}) &= -\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \int d^3\vec{x}' \int d^3\vec{x}'' \underbrace{\langle \vec{k}' | \vec{x}' \rangle}_{\frac{\exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{x}')}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}} V(\vec{x}') \underbrace{\langle \vec{x}' | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \vec{x}'' \rangle}_{\frac{2m}{\hbar^2} G_+(\vec{x}', \vec{x}'')} V(\vec{x}'') \underbrace{\langle \vec{x}'' | \vec{k} \rangle}_{\frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}'')}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}} = \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \int d^3\vec{x}' d^3\vec{x}'' \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{x}') V(\vec{x}') \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot G_+(\vec{x}', \vec{x}'') V(\vec{x}'') \cdot \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}'')
 \end{aligned}$$

Man bezeichnet den Ausdruck $\frac{2m}{\hbar^2} G_+(\vec{x}', \vec{x}'')$ auch als **Propagator**. V ist außerdem lokal!

$$V = \int d^3 \vec{x}' |\vec{x}'\rangle V(\vec{x}') \langle \vec{x}'| \Leftrightarrow A = \sum_i |\alpha_i\rangle \alpha_i \langle \alpha_i|$$



Dies ist der einfachste Fall eines FEYNMAN-Diagramms. In höheren Ordnungen sind die Integrale **sehr** kompliziert!

3.5 Optisches Theorem

Die Vorwärtsamplitude $f(\theta = 0) = f(\vec{k}' = \vec{k}, \vec{k})$ und σ_{tot} sind korreliert über:

$$\text{Im}[f(\theta = 0)] = \frac{k \cdot \sigma_{tot}}{4\pi} \text{ mit } \sigma_{tot} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

Beweis:

$$f(\theta = 0) = f(\vec{k}, \vec{k}) = -\frac{4\pi^2}{\hbar^2} \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle = -\frac{4\pi^2}{\hbar^2} \langle \vec{k} | V | \psi^{(+)} \rangle$$

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |\psi^{(+)}\rangle$$

Hieraus ergibt sich weiter, indem wir nach $|\vec{k}\rangle$ auflösen und den Ausdruck adjungieren:

$$\langle \vec{k} | = \langle \psi^{(+)} | - \langle \psi^{(+)} | V \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon}$$

$$\text{Im}(f(\theta = 0)) = -\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \text{Im} \left[\langle \psi^{(+)} | V | \psi^{(+)} \rangle - \left\langle \psi^{(+)} \left| V \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} V \right| \psi^{(+)} \right\rangle \right]$$

$\langle \psi^{(+)} | V | \psi^{(+)} \rangle$ ist der Erwartungswert des hermiteschen Operators V , ist damit reell und trägt nicht zum Ausdruck bei. Wir gehen nun über zum Impulsraum, da H_0 im Nenner sich im Ortsraum befindet:

$$\frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} = \int d^3 \vec{k}' |\vec{k}'\rangle \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \cdot \vec{k}'^2}{2m} - i\epsilon} \langle \vec{k} |$$

H_0 ist in der $\{|k\rangle\}$ -Basis diagonal. Damit folgt also:

$$\text{Im}[f(\theta = 0)] = \frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \text{Im} \left[\int d^3 \vec{k}' \langle \psi^{(+)} | V | \vec{k}' \rangle \cdot \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \cdot \vec{k}'^2}{2m} - i\epsilon} \cdot \langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle \right]$$

Wir nutzen nun aus, wobei mit P das Hauptwertintegral bezeichnet wird:

$$\frac{1}{x - i\epsilon} = P \frac{1}{x} + i\pi \delta(x) \Rightarrow \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \cdot \vec{k}'^2}{2m} - i\epsilon} = P \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 \cdot \vec{k}'^2}{2m}} + i\pi \cdot \delta \left(E - \frac{\hbar^2 \cdot \vec{k}'^2}{2m} \right)$$

Außerdem werten wir die δ -Funktion aus, wobei k_i die Nullstellen der Funktion $f(k)$ seien:

$$\delta(f(k)) = \sum_i \frac{1}{|f'(k_i)|} \cdot \delta(k - k_i) \Rightarrow \delta\left(E - \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m}\right) = \frac{m}{\hbar^2 k} \cdot \delta\left(k - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)$$

Damit ergibt sich weiter;

$$\begin{aligned} \text{Im}[f(\theta = 0)] &= \frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \int d\Omega \cdot \int_0^\infty k'^2 dk' \frac{\pi \cdot m}{\hbar^2 \cdot k'} \cdot \underbrace{\delta\left(k' - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)}_{\delta(k'-k)} \cdot \underbrace{\left|\langle \vec{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle\right|^2}_{-\frac{\hbar^2}{4\pi^2 \cdot m} \cdot f(\vec{k}', \vec{k})} = \\ &= k \cdot \frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \frac{\pi \cdot m}{\hbar^2} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{4\pi^2 \cdot m}\right)^2 \cdot \int d\Omega |f(\vec{k}', \vec{k})|^2 = \frac{k}{4\pi} \cdot \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \boxed{\frac{k}{4\pi} \cdot \sigma_{tot}} \end{aligned}$$

3.6 Streuung und Rotationssymmetrie

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T \Rightarrow T = V(E - H_0) \frac{1}{E - H_0 - V + i\epsilon}$$

Für ein rotationssymmetrisches Potential gilt $[V, L_i] = 0$; außerdem ist $[H_0, L_i] = 0$ mit $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m}$, womit $[T, L_i] = 0$ folgt. Benötigt werden die Energieeigenzustände in der $\{l, m\}$ -Basis $|E, l, m\rangle \leftrightarrow |\vec{k}\rangle$. Wir hatten gesehen, dass gilt:

$$\langle \vec{x} | E, l, m \rangle = c_l \cdot j_l(k \cdot r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) = c_l \cdot j_l(k \cdot r) \cdot Y_l^m$$

$$\langle \vec{k} | E, l, m \rangle = g_l(k, E) \cdot Y_l^m(\hat{k})$$

c_l und g_l werden fixiert durch die Normierungsbedingung; es gilt $\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(E - E')$.

$$0 = \langle \vec{k} | (E - E) | E, l, m \rangle = \langle \vec{k} | (E - H_0) | E, l, m \rangle = \left\langle \vec{k} \left| E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right| E, l, m \right\rangle = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \cdot \langle \vec{k} | E, l, m \rangle$$

Damit dies gilt, muss $\langle \vec{k} | E, l, m \rangle$ proportional zu einer δ -Funktion sein, nämlich $\delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$. Daraus ergeben sich die g_l :

$$g_l(k, E) = N \cdot \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \text{ mit Normierungsfaktor } N$$

Der Normierungsfaktor N wird fixiert durch:

$$\begin{aligned} \langle E', l', m' | E, l, m \rangle &= \int d^3 \vec{k} \langle E', l', m' | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | E, l, m \rangle = \int d^3 \vec{k} N^* \delta\left(E' - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_l^{m'*}(\hat{k}) \cdot N \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_l^m(\hat{k}) = \\ &= \int_0^\infty k^2 dk \int d\Omega Y_l^{m'*}(\hat{k}) \cdot Y_l^m(\hat{k}) \cdot \left[N \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) N^* \delta\left(E' - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \right] = \\ &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \cdot \int_0^\infty k^2 dk |N|^2 \cdot \delta\left(E' - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \cdot \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \end{aligned}$$

Aufgrund der Beziehung

$$\delta(f(x)) = \frac{1}{|f'(x_0)|} \cdot \delta(x - x_0)$$

können wir dies auch schreiben als:

$$\delta_{ll'} \delta_{mm'} \cdot \int_0^\infty k^2 dk |N|^2 \cdot \delta(E' - E) \cdot \frac{m}{\hbar^2 k^2} \cdot \delta\left(k - \frac{\sqrt{2m \cdot E}}{\hbar}\right) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \cdot \delta(E' - E) \cdot |N|^2 \cdot \frac{m \cdot k}{\hbar^2} \Big|_{k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot i^l \cdot j_l(k \cdot r) \cdot P_l(\cos \theta) \quad \text{mit } c_l = \frac{i^l}{\hbar} \cdot \sqrt{\frac{2mk}{\pi}}$$

Für die Streuamplitude ergibt sich:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \cdot \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$$

Aufgrund der Rotationssymmetrie gilt $[T, L_i] = 0$, wobei T ein sphärischer Tensor vom Rang 0 ist. Daraus ergibt sich:

$$E', l', m' | T | E, l, m \rangle = \underbrace{\langle l, 0; m, 0 | l', m' \rangle}_{\delta_{l'l'} \delta_{mm'}} \cdot \langle E', l' | T | E, l \rangle \quad \text{mit } \langle E, l | T | E, l \rangle \equiv T_l(E)$$

Einsetzen in f liefert:

$$\begin{aligned} f(\vec{k}, \vec{k}') &= -\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \sum_{l', m'} \sum_{l, m} \int dE' dE \langle \vec{k}' | E', l', m' \rangle \langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \vec{k} \rangle = \\ &= -\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \sum_{l', m'} \sum_{l, m} \int dE' E \frac{\hbar}{\sqrt{m \cdot k'}} \cdot \delta \left(E' - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \right) \cdot Y_{l'}^{m'}(\hat{k}') \cdot \delta_{l'l'} \cdot \delta_{mm'} \cdot T_l(E) \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{m \cdot k}} \times \\ &\quad \times \delta \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \cdot Y_l^{m*}(\hat{k}) = \\ &= -\frac{4\pi^2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar^2}{m \cdot k} \cdot \sum_{l, m} Y_l^m(\hat{k}') \cdot Y_l^{m*}(\hat{k}) \cdot T_l(E) \end{aligned}$$

Wir erinnern uns an das Additionstheorem der Kugelflächenfunktionen Y_l^m :

$$P_l(\hat{k}, \hat{k}') = \frac{4\pi}{2l+1} \cdot \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\hat{k}) \cdot Y_l^m(\hat{k}')$$

Wir wählen nun $\hat{k} = \hat{z}$ und erhalten:

$$\begin{aligned} Y_l^{m*}(\hat{k}) &= Y_l^{m*}(\theta = 0, \phi) = \delta_{m,0} \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \cdot \underbrace{P_l(\cos \theta = 1)}_{=1} \\ \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\hat{k}') \cdot Y_l^{m*}(\hat{k}) &= Y_l^0(\hat{k}') \cdot \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} = \frac{2l+1}{4\pi} \cdot P_l(\cos \theta) \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich weiter:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2}{k} \cdot \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} \cdot P_l(\cos \theta) \cdot T_l(E) = \boxed{\sum_l (2l+1) \cdot f_l(k) \cdot P_l(\cos \theta) \quad \text{mit } f_l(k) = -\frac{\pi}{k} \cdot T_l(E)}$$

Man spricht von der **Partialwellenzerlegung** der Streuamplitude. Die Streulösung lautet für große r :

$$\langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \left[\exp(ikr \cos \theta) + f(\vec{k}', \vec{k}) \cdot \frac{\exp(ikr)}{r} \right]$$

Betrachten wir die sphärischen BESSEL-Funktionen für $r \mapsto \infty$:

$$\begin{aligned} j_l(\varrho) &= (-\varrho)^l \cdot \left(\frac{1}{\varrho} \cdot \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\sin(\varrho)}{\varrho} \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} (-1)^l \cdot \frac{1}{\varrho} \cdot \frac{d^l}{d\varrho^l} \sin(\varrho) + O\left(\frac{1}{\varrho^2}\right) = \\ &= (-1)^l \cdot \frac{1}{\varrho} \cdot \frac{d^l}{d\varrho^l} \left(\frac{\exp(i\varrho) - \exp(-i\varrho)}{2i} \right) + O\left(\frac{1}{\varrho^2}\right) = \\ &= i^l \cdot (-1)^l \cdot \frac{1}{\varrho} \cdot \frac{i^l \cdot \exp(i\varrho) - (-i)^l \cdot \exp(-i\varrho)}{2i} = \frac{1}{2i\varrho} \cdot [\exp(i\varrho) - (-1)^l \cdot \exp(-i\varrho)] + O\left(\frac{1}{\varrho^2}\right) \end{aligned}$$

Damit folgt weiter für die Streulösung für große r :

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \psi^{(+)} \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \sum_l (2l+1) \cdot P_l(\cos \theta) \cdot \left[i^l \cdot j_l(k \cdot r) + f_l(k) \cdot \frac{\exp(ikr)}{r} \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \sum_l \frac{(2l+1) \cdot P_l(\cos \theta)}{2ik} \cdot \left[\frac{\exp(ikr)}{r} \cdot (2ik \cdot f_l(k) + 1) - (-1)^l \cdot \frac{\exp(-ikr)}{r} \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \sum_l \langle \vec{x} | \psi_l^{(+)} \rangle \end{aligned}$$

3.6.1 Unitarität

$|\psi_l^{(+)}\rangle$ sind Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung $(H_0 + V)|\psi_l^{(+)}\rangle = E|\psi_l^{(+)}\rangle$. Mit $2ikf_l(k) + 1 = S_l$ folgt:

$$\psi_l = \psi_l(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \psi_l^{(+)} \rangle \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) = \left(\frac{\exp(ikr)}{r} \cdot S_l - \frac{\exp(-ikr)}{r} \cdot (-1)^l \right) \cdot P_l(\cos \theta)$$

Der Wahrscheinlichkeitsstrom ist gegeben durch:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \cdot \text{Im} \left(\psi_l^* \vec{\nabla} \psi_l \right)$$

Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit wird beschrieben durch eine Kontinuitätsgleichung:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} (\psi_l^* \psi) = -\frac{\partial}{\partial t} |\langle \vec{x} | \psi_l^{(+)} \rangle|^2 = 0$$

Damit ist der Wahrscheinlichkeitsstrom divergenzfrei. Wir betrachten den GAUSSschen Satz für eine Kugel K_r mit Radius r :

$$\begin{aligned} \int_{K_r} d^3\vec{x} \vec{\nabla} \cdot \vec{j} &= \oint_{\partial K_r} d\Omega r^2 \hat{n} \cdot \vec{j} = \frac{\hbar}{m} \cdot \oint d\Omega r^2 \cdot \text{Im} \left(\psi_l^* \hat{r} \cdot \vec{\nabla} \psi_l \right) = \\ &= \frac{\hbar}{m} \cdot \oint d\Omega P_l(\cos \theta)^2 \cdot r^2 \cdot \text{Im} \left[\left(\frac{\exp(-ikr)}{r} S_l^* - (-1)^l \cdot \frac{\exp(ikr)}{r} \right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(ik \cdot \frac{\exp(ikr)}{r} \cdot S_l + ik \cdot (-1)^l \cdot \frac{\exp(-ikr)}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right) \right] = \\ &= \frac{\hbar}{m} \cdot \oint d\Omega P_l(\cos \theta)^2 \cdot r^2 \cdot \text{Im} \left[ik \cdot \left(\frac{1}{r} \cdot |S_l|^2 + (-1)^l \cdot \frac{\exp(-2ikr)}{r^2} \cdot S_l^* - (-1)^l \cdot \frac{\exp(2ikr)}{r} S_l - \frac{1}{r^2} \right) \right] = \\ &= \frac{\hbar}{m} \cdot \oint d\Omega P_l(\cos \theta)^2 \cdot r^2 \cdot \text{Im} \left[ik \cdot \left(\frac{1}{r} \cdot |S_l|^2 + 2i \cdot \text{Im} \left((-1)^l \cdot \frac{\exp(2ikr)}{r^2} \cdot S_l^* \right) - \frac{1}{r^2} \right) \right] = \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \cdot \oint d\Omega (P_l(\cos \theta))^2 \cdot \left[k \cdot (|S_l|^2 - 1) + O\left(\frac{1}{r}\right) \right] \end{aligned}$$

Damit ergibt sich also $|S_l|^2 = 1$; dies ist die **Unitaritätsbedingung**.

Bei zusätzlichen Beiträgen von inelastischen Prozessen gilt $|S_l|^2 < 1$. S_l ist ein Phasenfaktor; es gilt nämlich $S_l = \exp(2i \cdot \delta_l)$, wobei die 2 Konvention ist. $\delta_l = \delta_l(k)$ ist dann die sogenannte Streuphase. Wir lösen nun S_l nach f_l auf:

$$f_l = \frac{S_l - 1}{2ik} = \frac{\exp(2i\delta_l) - 1}{2ik} = \frac{\exp(i\delta_l)}{k} \cdot \frac{\exp(i\delta_l) - \exp(-i\delta_l)}{2i} = \frac{\exp(i\delta_l)}{k} \cdot \sin(\delta_l)$$

Für die Streuamplitude ergibt sich dann:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot \frac{\exp(i\delta_l) \cdot \sin(\delta_l)}{k} \cdot P_l(\hat{k} \cdot \hat{k}')$$

Wir berechnen außerdem den totalen Wirkungsquerschnitt durch Integration:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{tot} &= \int d\Omega |f(\vec{k}', \vec{k})|^2 = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \cdot (2l+1)^2 \cdot \frac{\sin^2(\delta_l)}{k^2} = \\
 &= \int d\Omega \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1) \cdot (2l'+1) \cdot \frac{(\exp(i\delta_l - i\delta_{l'})) \cdot \sin(\delta_l) \cdot \sin(\delta_{l'})}{k^2} \cdot P_l(\cos\theta) \cdot P_{l'}(\cos\theta) = \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1) \cdot (2l'+1) \cdot \frac{(\exp(i\delta_l - i\delta_{l'})) \cdot \sin(\delta_l) \cdot \sin(\delta_{l'})}{k^2} \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) P_l(\cos\theta) \cdot P_{l'}(\cos\theta) = \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1) \cdot (2l'+1) \cdot \frac{(\exp(i\delta_l - i\delta_{l'})) \cdot \sin(\delta_l) \cdot \sin(\delta_{l'})}{k^2} \cdot \frac{2 \cdot 2\pi}{2l+1} \cdot \delta_{ll'} = \\
 &= \boxed{\frac{4\pi}{k^2} \cdot \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot \sin^2(\delta_l)} = \sigma_{tot} = \sum_l \delta_l
 \end{aligned}$$

Der Beitrag von festem l zum Wirkungsquerschnitt ist:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \cdot (2l+1) \cdot \sin^2(\delta_l) \leq \frac{4\pi}{k^2} \cdot (2l+1)$$

Beispiel: Elektron-Elektron-Streuung

Wir betrachten den Prozess:

$$e^+e^- \mapsto Z \mapsto \begin{cases} e^+e^- \\ \mu^+\mu^- \\ \text{Hadronen} \end{cases}$$

Alle Teilchen haben $j = 1$. Für diese Anwendung gilt obiger Wirkungsquerschnitt. δ_1 ist beschränkt, eben durch $\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)$. Beachte: Die obere Schranke wird für größere Energie immer kleiner; es sind damit hohe Luminositäten erforderlich! Für den Unitaritätsgrenze des Wirkungsquerschnittes gilt:

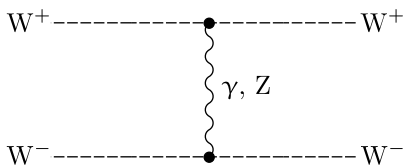
$$\delta_l \sim \frac{1}{k^2} \sim \begin{cases} \frac{1}{E_{kin}} & \text{nichtrelativistisch: } E_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \frac{1}{E^2} & \text{Relativistisch: } E = \sqrt{(\vec{p}c)^2 + m^2 c^4} \simeq |\vec{p}c| \sim k \end{cases}$$

Eine zehnmal größere Energie führt also zu einem Faktor 10^{-2} im relativistischen Wirkungsquerschnitt. Bei hohen Energien ist $\sigma(E)$ ungefähr konstant. Dies ist jedoch nur möglich, wenn die Zahl der beitragenden l (Partialwellen) zunimmt. (Für die Praxis ist dies wichtig.)

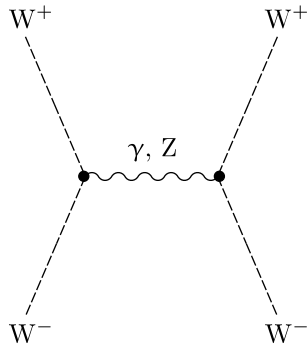
Beispiel:

Warum muss es das HIGGS-Boson geben?

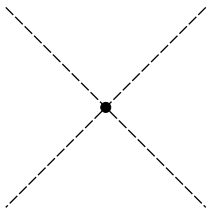
☞ Potentialstreuung:



☞ Paarerzeugung/Paarvernichtung



☞ Weiterer Beitrag:

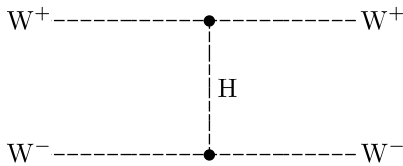


$$kf_l(k)^{W,Z,\gamma} = c_1 \cdot \frac{k^2}{m_w^2} + c_2(1)$$

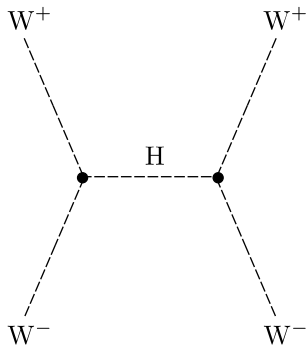
$$kf_l(k) \simeq \frac{k^2}{m_w^2} > 1 \text{ für } k\hbar c > 1,2 \text{ TeV} (\approx 15 \cdot m_w c^2)$$

Dies verletzt die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit, wenn es kein zusätzliches Teilchen geben würde.

☞ Potentialstreuung:



☞ Paarerzeugung/Pairvernichtung



$$Kf_l^H = -c'_1 \cdot \frac{k^2}{m_w^2} + c'_2(2)$$

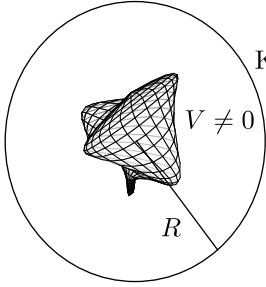
Addiert man die Amplituden beider Prozesse, so erhält man $|c_1 + c'_2| < 1 \forall E$, falls $m_H < 1 \text{ TeV}$. Aus den FEYNMAN-Regeln für die FEYNMAN-Diagramme lassen sich die Streuamplituden sofort hinschreiben.

Außerdem wollen wir die Gültigkeit des optischen Theorems prüfen:

$$\begin{aligned} \text{Im}[f(\theta = 0)] &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot \text{Im} \left(\underbrace{\frac{\exp(i\delta_l) \cdot \sin(\delta_l)}{k}}_{\frac{\sin^2(\delta_l)}{k^2}} \right) \cdot \underbrace{P_l(\cos(\theta) = 1)}_{=1 \text{ wegen Normierung}} = \\ &= \sum_l \frac{1}{k} \cdot (2l+1) \cdot \sin^2(\delta_l) = \frac{k}{4\pi} \cdot \sigma_{tot} \end{aligned}$$

3.7 Bestimmung von Streuphasen

Beachte: Bei starker Wechselwirkung versagt die Störungsrechnung; da die Störungsreihe nicht konvergiert. Wir betrachten ein Streupotential endlicher Reichweite mit $V(r) = 0$ für $r > R$.



Kugel mit Radius R

$r > R$: freie Teilchen

Für $r > R$ gilt die allgemeine Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für festes l :

$$\langle \vec{r} | \psi_l^{(+)} \rangle = a_l \cdot j_l(k \cdot r) \cdot P_l(\cos \theta) + b_l \cdot n_l(k \cdot r) \cdot P_l(\cos \theta)$$

$n_l(k \cdot r)$ divergiert am Ursprung logarithmisch; für $r > R$ ist diese Divergenz jedoch egal.

3.7.1 Sphärische Bessel- und Neumann-Funktionen

$$j_l(\varrho) = (-\varrho)^l \cdot \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \left(\frac{\sin(\varrho)}{\varrho} \right)$$

$$n_l(\varrho) = (-\varrho)^l \cdot \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \left(-\frac{\cos(\varrho)}{\varrho} \right)$$

Daraus lassen sich außerdem die sphärischen HANKEL-Funktion konstruieren durch $h^{(1)} = j_l + in_l$ und $h^{(2)} = j_l - in_l$.

$$h^{(1/2)} = (-\varrho^l) \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \left[\frac{\sin(\varrho) \mp i \cos(\varrho)}{\varrho} \right] = \mp i \cdot (-\varrho)^l \cdot \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\exp(\pm i\varrho)}{\varrho} \xrightarrow{\varrho \rightarrow \infty} \mp i \cdot (-1)^l \cdot (\pm i)^l \cdot \frac{\exp(i\varrho)}{\varrho}$$

$$h^{(1)}(k \cdot r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\exp(ikr) \cdot (-i)^l}{ikr}, \quad h^{(2)}(k \cdot r) = -\frac{\exp(-ikr) \cdot i^l}{ikr}$$

$$\langle \vec{r} | \psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \sum_l (2l+1) \cdot i^l \cdot A_l(r) \cdot P_l(\cos \theta)$$

Für $r > R$ gilt:

$$i^l \cdot A_l = c_l^{(1)} \cdot i^l \cdot h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)} \cdot i \cdot h_l^{(2)}(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} c_l^{(1)} \cdot \frac{\exp(ikr)}{ikr} - c_l^{(2)} \cdot (-1)^l \cdot \frac{\exp(-ikr)}{ikr}$$

Wir vergleichen:

$$\langle \vec{r} | \psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cdot \sum_l (2l+1) \cdot P_l(\cos \theta) \cdot \left[\frac{\exp(ikr)}{2ikr} \cdot \exp(2i\delta_l) - \frac{(-1)^l \cdot \exp(-ikr)}{2ikr} \right]$$

Der Ausdruck in der Klammer muss gleich $i^l \cdot A_l$ sein; durch Koeffizientenvergleich erhält man:

$$c_l^{(1)} = \frac{\exp(2i\delta_l)}{2}, c_l^{(2)} = \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} A_l(r) &= \frac{1}{2} \cdot \exp(2i\delta_l) \cdot h_l^{(1)} + \frac{1}{2} \cdot h_l^{(2)} = \frac{1}{2} \cdot \exp(2i\delta_l) \cdot (j_l + in_l) + \frac{1}{2} \cdot (j_l - in_l) = \\ &= \exp(i\delta_l) \cdot \left[j_l \cdot \frac{\exp(i\delta_l) + \exp(-i\delta_l)}{2} - n_l \cdot \frac{\exp(i\delta_l) - \exp(-i\delta_l)}{2i} \right] = \\ &= \exp(i\delta_l) \cdot [j_l(k \cdot r) \cdot \cos(\delta_l) - n_l(k \cdot r) \cdot \sin(\delta_l)] \end{aligned}$$

Kommen wir zur Streuamplitude zurück:

$$f_l(\vec{k}', \vec{k}) = \frac{\exp(i\delta_l) \cdot \sin(\delta_l)}{k}$$

δ_l ist eine Streuphase. Für $r > R$ ergibt sich mit $V = 0$:

$$\langle \vec{r} | \psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_l i^l \cdot A_l(r) \cdot (2l+1) \cdot P_l(\cos \theta)$$

$$A_l(r) = \exp(i\delta_l) \cdot [\cos(\delta_l) \cdot j_l(k \cdot r) - \sin(\delta_l) \cdot n_l(k \cdot r)]$$

Die Lösung im Bereich $V \neq 0$ ist $u_l(r) = r \cdot A_l(r)$ im Bereich $0 \leq r \leq R$. Dabei handelt es sich um die Lösung folgender Differentialgleichung:

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2mV}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l = 0 \text{ mit } u_l(r) = 0$$

Wir wollen δ_l durch Anpassen bei $r = R$ berechnen. Die willkürliche Normierung spielt keine Rolle:

$$\beta_l = \frac{r}{A_l} \frac{dA_l}{dr} \Big|_{r=R} = kR \cdot \left(\frac{\cos(\delta_l) \cdot j'_l(k \cdot R) - \sin(\delta_l) \cdot n'_l(k \cdot R)}{\cos(\delta_l) \cdot j_l(k \cdot R) - \sin(\delta_l) \cdot n_l(k \cdot R)} \right)$$

$$\boxed{\tan(\delta_l) = \frac{k \cdot R \cdot j'_l(k \cdot R) - \beta_l \cdot j_l(k \cdot R)}{k \cdot R \cdot n'_l(k \cdot R) - \beta_l \cdot n_l(k \cdot R)}}$$

3.7.2 Streuung an harter Kugel

Das Potential ist gegeben durch:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{für } r > R \\ \infty & \text{für } r < R \end{cases}$$

Die Lösung für u_l für $r < R$ lautet $u_l = 0$; damit ergibt sich $A_l(R) = 0$.

$$\cos(\delta_l) \cdot j_l(k \cdot R) = \sin(\delta_l) \cdot n_l(k \cdot R) \Rightarrow \boxed{\tan(\delta_l) = \frac{j_l(k \cdot R)}{n_l(k \cdot R)}}$$

Dies gilt exakt! Betrachten wir den Spezialfall für $l = 0$:

$$\tan(\delta_0) = \frac{\frac{\sin(k \cdot R)}{k \cdot R}}{\frac{\cos(k \cdot R)}{k \cdot R}} = -\tan(k \cdot R) \Rightarrow \boxed{\delta_0 = -k \cdot R}$$

Für $r > R$ lautet die Lösung:

$$A_0(k \cdot r) = \exp(i\delta_0) \cdot \left(\frac{\sin(k \cdot r)}{k \cdot r} \cdot \cos(\delta_0) + \frac{\cos(k \cdot r)}{k \cdot r} \cdot \sin(\delta_0) \right) = \exp(i\delta_0) \cdot \frac{\sin(k \cdot r + \delta_0)}{k \cdot r} = \exp(-ikR) \cdot \frac{\sin[k \cdot (r - R)]}{k \cdot r}$$

Wir betrachten außerdem den Niederenergielimes; also das Verhalten bei $k \mapsto 0$, das heißt, $kR \ll 1$:

$$j_l(\varrho) = (-\varrho)^l \cdot \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\sin(\varrho)}{\varrho} = (-\varrho)^l \cdot \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \left[1 - \frac{\varrho^2}{3!} + \frac{\varrho^4}{5!} - \dots + \frac{\varrho^{2l}}{(2l+1)!} \right] =$$

$$= \frac{\varrho^l}{(2l+1) \cdot (2l-1) \cdot (2l-3) \cdot \dots \cdot 3 \cdot 1} \cdot [1 + O(\varrho^2)]$$

$$j_l(\varrho) = \frac{\varrho^l}{(2l+1)!!} + \dots, \quad n_l(\varrho) = -\frac{(2l-1)!!}{\varrho^{l+1}} \cdot (1 + O(\varrho^2))$$

$$\tan(\delta_l) = -\frac{(k \cdot R)^{2l+1}}{(2l+1)!! \cdot (2l-1)!!} \sim k^{2l+1}$$

Nahe der Produktionsschwelle ($k \mapsto 0$) sind höhere Partialwellen gegenüber δ_0 mit Faktor k^{2l} unterdrückt.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot \frac{\exp(i\delta_l) \cdot \sin(\delta_l)}{k} \cdot P_l(\cos\theta) \right|^2 \approx \left| \frac{\sin^2(\delta_0)}{k^2} \cdot P_0(\cos\theta) \right|^2 = \left| \frac{\sin^2(\delta_0)}{k^2} \cdot 1 \right|^2 = \frac{\sin^2(\delta_0)}{k^2} = R^2$$

- 1.) Die Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ ist groß gegen den Radius des Bereichs mit $V \neq 0$.

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ ist ungefähr konstant; es handelt sich um isotrope Streuung.

- 2.) Speziell für die harte Kugel gilt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx R^2 \cdot (1 + O(k \cdot R)^2)$$

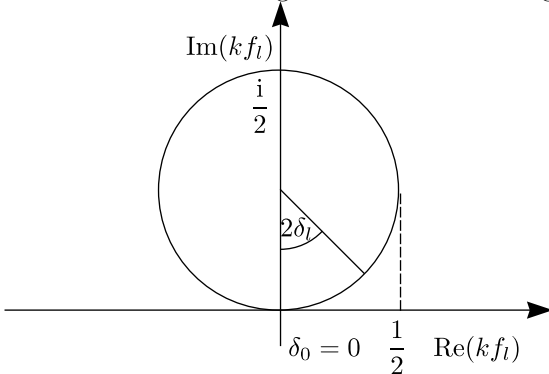
Für $k \cdot R \ll 1$ gilt:

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = R^2 \cdot 4\pi$$

Die Querschnittsfläche der Kugel ist bekanntlich πR^2 . Faktor 4: Diffraktion

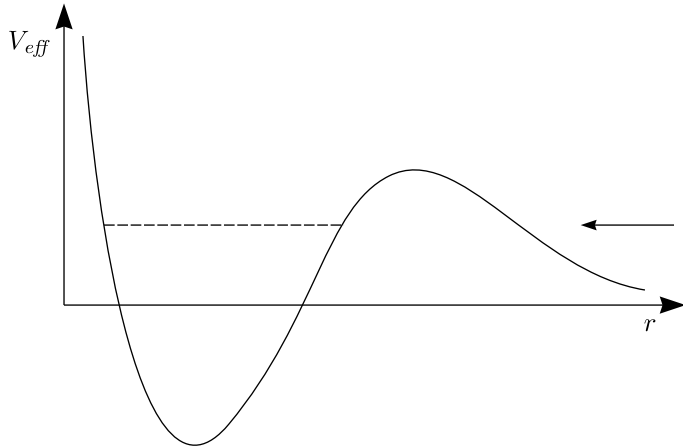
$$k \cdot f_l(k) = \frac{\exp(2i\delta_l) - 1}{2i} = \frac{\delta_l - 1}{2i}$$

Wir schauen uns das sogenannte ARGAND-Diagramm an:



Dies ist eine in der Kern- und Teilchenphysik gebräuchliche Auftragung der komplexen Partialwellen-Amplitude in der komplexen Ebene als Funktion der Energie. Aus dem ARGAND-Diagramm lassen sich bei gemessener Amplitude wichtige Eigenschaften des Streuprozesses ablesen, beispielsweise ob es sich um elastische Streuung oder um Resonanzstreuung handelt (Streutheorie). Die Streuamplitude wird dargestellt als Vektor in der komplexen Ebene. δ_l ist die Streuphase l -ten Partialwelle. Aufgrund des Kausalitätsprinzips muss mit steigender Energie der Vektor den Kreis entgegen dem Uhrzeigersinn durchlaufen. Der maximale Betrag $k f_l$ liegt bei $\delta_l = \frac{\pi}{2}$, $\exp(2i\delta_l) = -1$.

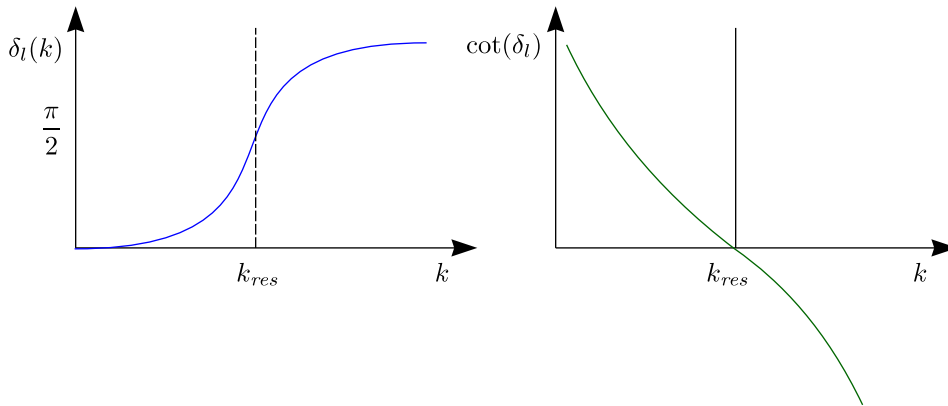
3.7.3 Resonanzstreuung



$$V_{eff} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

Resonanz tritt auf für $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_R$. Die BREIT-WIGNER-Formel lautet:

$$f_l(k) \sim \frac{1}{E - E_R + i\frac{\Gamma}{2}}$$



Wir betrachten die Streuphase als Funktion von k

$$f_l(k) = \frac{1}{k} \cdot \exp(i\delta_l) \cdot \sin(\delta_l) = \frac{\sin(\delta_l)}{k \cdot (\cos(\delta_l) - i \sin(\delta_l))} = \frac{1}{k \cdot (\cot(\delta_l) - i)} = \frac{1}{k \cdot (-c(E - E_R) - i)}$$

Wir wollen $\cot(\delta_l(E))$ entwickeln:

$$\cot(\delta_l(E)) = \cot(\underbrace{\delta_l(E = E_R)}_{=0}) - c \cdot (E - E_R) + O((E - E_R)^2)$$

Die Breite Γ der Resonanz ist definiert durch:

$$c = \frac{2}{\Gamma} = - \left. \frac{d(\cot(\delta_l))}{dE} \right|_{\delta_l = \frac{\pi}{2}}$$

$$f_l(k) = - \frac{\frac{\Gamma}{2}}{k(E - E_R + i\frac{\Gamma}{2})}$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \cdot \frac{(2l+1) \cdot \frac{\Gamma^2}{4}}{(E - E_R)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} = \sigma_l^{max} \text{ für } E = E_R$$

3.8 Pfadintegrale

Ein eindimensionales System kann beschrieben werden durch eine Koordinate q und einen Impuls p , wobei $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ ist. Im folgenden müssen wir sorgfältig zwischen q und \hat{q} (also dem Operator) unterscheiden. In der Ortsbasis $\{|q\rangle\}$ gilt $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$, wobei wir den Zustand $|\alpha, t\rangle_S$ nach der Ortsbasis $\{|q\rangle\}$ entwickeln:

$$\alpha, t\rangle_S = \int dq |q\rangle \langle q|\alpha, t\rangle_S = \int dq |q\rangle \left\langle q \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \right| \alpha, 0 \right\rangle_H = \int dq |q\rangle \psi(q, t)$$

Wir definieren

$$|q, t\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|q\rangle$$

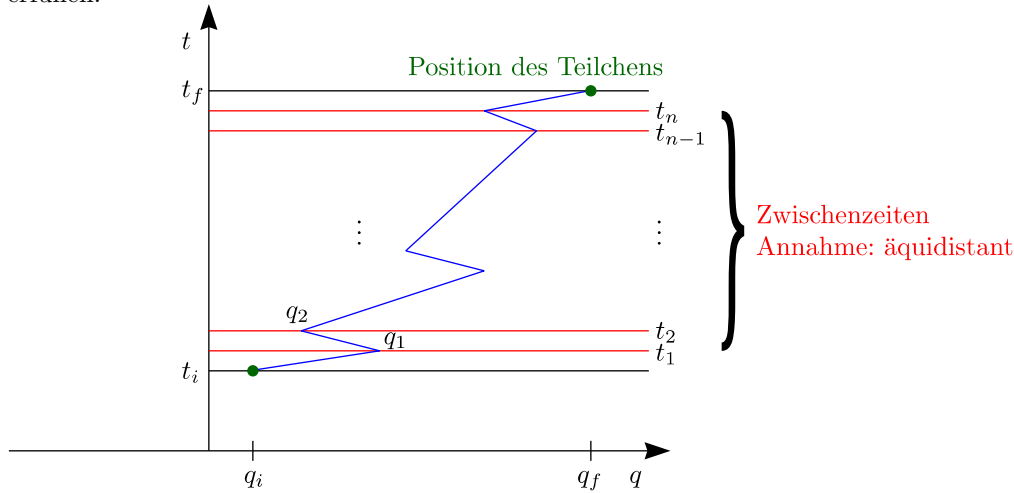
die Basis ändert sich also mit der Zeit. Wir benötigen:

$$\psi(q_f, t_f) = \langle q_f, t_f|\alpha\rangle_H = \int dq_i \langle q_f, t_f|q_i, t_i\rangle \langle q_i, t_i|\alpha\rangle_H = \int dq_i K(q_f, t_f; q_i, t_i) \psi(q_i, t_i)$$

K bezeichnet man als Integrationskern oder auch **Propagator**. Der Propagator $K(q_f, t_f; q_i, t_i)$ löst das Anfangswertproblem der Quantenmechanik. Nach FEYNMAN ist K ein Integral über alle Pfade zwischen $q(t_f) = q_f$ und $q(t_i) = q_i$:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \underbrace{\int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(q, \dot{q}) dt\right)}_{\text{Gewicht}} \Bigg|_{\substack{q(t_f)=q_f \\ q(t_i)=q_i}}$$

Es handelt sich um ein unendlich dimensionales Integral. K ist eine quantenmechanische Größe und \mathcal{L} die klassische LAGRANGE-Funktion. Es wird über alle möglichen Funktionen integriert, die $q(t_f) = q_f$ und $q(t_i) = q_i$ erfüllen.



$$\langle q_f, t_f|q_i, t_i\rangle = \int dq_1 \dots dq_n \langle q_f, t_f|q_n, t_n\rangle \langle q_n, t_n|q_{n-1}, t_{n-1}\rangle \langle q_{n-1}, t_{n-1}|\dots|q_1, t_1\rangle \langle q_1, t_1|q_i, t_i\rangle$$

Wir berechnen die einzelnen Ausdrücke $\langle q_{j+1}, t_{j+1}|q_j, t_j\rangle$:

$$\langle q_{j+1}, t_{j+1}|q_j, t_j\rangle = \left\langle q_{j+1} \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_{j+1}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_j\right) \right| q_j \right\rangle = \left\langle q_{j+1} \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau\right) \right| q_j \right\rangle \text{ mit } t_{j+1} - t_j =: \tau$$

Im Limes $n \mapsto \infty$ gilt $\tau \mapsto 0$ und wir können die Exponentialfunktion entwickeln:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau\right) \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau + O(\tau^2)$$

Mit dem HAMILTON-Operator

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

ergibt sich weiter:

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1}, t_{j+1} | q_j, t_j \rangle &= \delta(q_{j+1} - q_j) - \frac{i}{\hbar} \cdot \tau \cdot \langle q_{j+1} | \hat{H} | q_j \rangle + \dots = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(q_{j+1} q_j)\right) - \frac{i}{\hbar} \cdot \tau \cdot \left[\int dp \left\langle q_{j+1} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| p \right\rangle \langle p | q_j \rangle + V(q_j) \delta(q_{j+1} - q_j) \right] \end{aligned}$$

Wir werten den zweiten Term unter Verwendung der Normierung

$$\langle q_{j+1} | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p q_{j+1}\right)$$

aus, indem wir folgende Nebenrechnung durchführen:

$$\int dp \frac{p^2}{2m} \langle q_{j+1} | p \rangle \langle p | q_j \rangle = \int dp \frac{p^2}{2m} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p q_{j+1}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p q_j\right) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(q_{j+1} - q_j)\right) \cdot \frac{p^2}{2m}$$

Damit folgt weiter:

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1}, t_{j+1} | q_j, t_j \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(q_{j+1} - q_j)\right) \cdot \left[1 - \frac{i}{\hbar} \cdot \tau \cdot \left(\frac{p^2}{2m} + V(q_j)\right) + \dots \right] = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(q_{j+1} q_j)\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \tau \cdot \left[\frac{p^2}{2m} + V(q_j)\right]\right) = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(q_{j+1} - q_j)\right) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \tau \cdot H(p, q_j)\right) \end{aligned}$$

Wir können nun $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle$ mit obiger Zerlegung als $2n + 1$ -faches Integral schreiben:

$$\begin{aligned} \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=0}^n \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \frac{[p_j \cdot (q_{j+1} - q_j)] \cdot \tau}{\tau} - \tau \cdot H(p_j, q_j)\right] = \\ &= \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot \int_{t_i}^{t_f} [p \cdot \dot{q} - H] t\right) \end{aligned}$$

Dies ist die allgemeine Form des **Pfadintegrals**. Es ist zu beachten, dass die Ableitung $\frac{q_{j+1}(t_{j+1} - q_j(t_j))}{\tau}$ Probleme bereitet, falls die Trajektorie nicht differenzierbar ist. Wir betrachten den Spezialfall

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

welcher quadratisch in p ist:

$$\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^n dq_j \prod_{j=1}^n \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n \left[p_j \cdot (q_{j+1} - q_j) - \frac{p_j^2}{2m} \cdot \tau - V(q_j) \cdot \tau \right]\right)$$

Wir machen eine quadratische Ergänzung des Arguments der Exponentialfunktion:

$$p_j \cdot (q_{j+1} - q_j) \cdot \frac{1}{\hbar} - \frac{p_j^2}{2m} \cdot \frac{\tau}{\hbar} = - \left(p_j \cdot \sqrt{\frac{\tau}{2\pi\hbar}} - \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}} \cdot (q_{j+1} - q_j) \right)^2 + (q_{j+1} - q_j)^2 \cdot \frac{m}{2\pi\hbar}$$

Allgemein handelt es sich um ein GAUSS-Integral der folgenden Form:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \cdot \exp[-\alpha \cdot (p + p_0)^2] = \frac{1}{2\pi\hbar} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

Mit $\alpha = i\frac{\tau}{2m\hbar}$ ergibt sich also:

$$I = \frac{1}{2\pi\hbar} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{i\tau}} = \sqrt{\frac{2m\hbar}{i\tau \cdot 4\pi\hbar^2}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar \cdot \tau i}}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned} \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \underbrace{\prod_{j=1}^n dq_j}_{\mathcal{D}q} \left(\frac{m}{2\pi\hbar \cdot \tau i} \right)^{\frac{n+1}{2}} \exp \left(i \cdot \sum_{i=0}^n \left[\frac{(q_{j+1} - q_j)^2}{\tau^2} \cdot \frac{m \cdot \tau^2}{2\pi\hbar} - V(q_j) \right] \right) = \\ &= \int \mathcal{D}q \exp \left(\frac{i}{\hbar} \cdot \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{m}{2} \cdot \dot{q}^2(t) - V(q(t)) \right] dt \right) \Bigg|_{\substack{q(t_f)=q_f \\ q(t_i)=q_i}} \end{aligned}$$

Die Phase ist gegeben durch die klassische LAGRANGEfunktion. Das Endergebnis sollte man sich merken! Es ist für formale Überlegungen in der Quantenfeldtheorie wichtig!

3.8.1 Beispiel: Freies Teilchen

Wir betrachten den LAGRANGEfunktion des freien Teilchens, also $\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2$ mit den Randbedingungen $t_i = 0$, $t_f = 1$ s und $x_i = 0$, $x_f = 1$ cm. Die Wirkung ergibt sich durch:

$$S = \int_0^1 \mathcal{L}(t) dt = \frac{1}{2}m \cdot \int_0^1 \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 dt$$

☞ Pfad ①: Gleichförmige Bewegung

$$x_1(t) = v \cdot t \text{ mit } v = 1 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \Rightarrow S_1 = \frac{1}{2}m \cdot v^2 \cdot t_f$$

☞ Pfad ②: Gleichmäßig beschleunigte Bewegung

$$x_2(t) = g \cdot t^2 \text{ mit } g = 1 \frac{\text{cm}}{\text{s}^2} \Rightarrow S_2 = \frac{1}{2}m \cdot \int_0^{t_f} (2g \cdot t)^2 dt = \frac{2}{3}m_g^2 \cdot t_f^3 = \frac{4}{3}S_1$$

Handelt es sich beim Teilchen um ein makroskopisches Objekt mit $m = 1$ g, so ergibt sich $S_1 = 4,7 \cdot 10^{26} \cdot \hbar$ und $S_2 - S_1 = 1,6 \cdot 10^{26} \hbar$. Für ein mikroskopisches Teilchen wie beispielsweise eine Elektron folgt mit $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg, dass $S_1 = 0,43\hbar$ und $S_2 - S_1 = 0,14\hbar$ ist. Es gibt konstruktive Interferenz in der Umgebung von Extrema der Wirkung

$$S = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(q, \dot{q}) dt$$

Extrema entsprechen den klassischen Pfaden. Pfade mit $S - S_{min} \gg \hbar$ fallen durch destruktive Interferenz weg. Das System verhält sich quantenmechanisch für $S - S_{min} \simeq \hbar$.

Kapitel 4

Relativistische Quantenmechanik

1.) Kinematik:

Hier hat man es mit gewissen kinematischen Gesetzmäßigkeiten zu tun, die wir bis jetzt nicht berücksichtigt haben.

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \xrightarrow{\text{relativistisch}} E = \sqrt{(m \cdot c^2)^2 + (\vec{p}c)^2} \approx m \cdot c^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} + \dots$$

Damit müssen wir die SCHRÖDINGER-Gleichung abwandeln, um diese kinematischen Effekte zu berücksichtigen. Wir werden dann die KLEIN-GORDON-Gleichung, welche Spin-0-Teilchen beschreibt, kennenlernen und außerdem die für Spin-1/2-Teilchen sehr wichtige DIRAC-Gleichung.

2.) Äquivalenz von Energie und Masse: $E = m \cdot c^2$

Es treten physikalische Prozesse wie Paarerzeugung und Paarvernichtung auf, bei denen die Anzahl der Teilchen nicht erhalten ist. Die Theorie, welche diese Prozesse beschreibt, ist die Feldtheorie.

4.1 Notation: Vierervektoren

Die Zeit wird neben dem Ort in Koordinatensystem-Transformationen mit einbezogen, was man am besten durch Vierervektoren $x^\mu = (ct, \vec{x})$ beschreiben kann. Dabei ist x^μ ein kontravarianter und $x_\mu = (ct, -\vec{x})$ ein kovarianter Vektor. Diese kovarianten und kontravarianten Vektoren benötigt man, um die relativistische Invarianten zu definieren wie beispielsweise:

$$x^2 = x^\mu x_\mu = (ct)^2 - \vec{x}^2$$

Eine LORENTZ-Transformation ist nun eine lineare Transformation, die x^2 invariant lässt. In einem System sei x ein Vierervektor und in einem anderen System x' . Der Zusammenhang zwischen x und x' lässt sich durch eine LORENTZ-Transformation herstellen, nämlich durch $x'^\mu = L^\mu_\nu x^\nu$, wobei L^μ_ν 4×4 -Matrizen sind. Betrachten wir beispielsweise eine räumliche Drehung um die z -Achse. Die Zeit transformiert sich hierbei nicht und deshalb können wir die LORENTZ-Transformation, welche diese Drehung beschreibt, angeben durch folgende Matrix:

$$L^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Transformationen zwischen zwei beweglichen Systemen, die sich mit der Geschwindigkeit v zueinander bewegen, bezeichnet man als **Boosts**. Ein Boost mit $\vec{v} = \beta \cdot c \cdot \hat{x}$ lässt sich angeben durch:

$$L^\mu_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$x' = (ct', x', y', z')$ sei nun ein Vektor im bewegten System und $x = (ct, \vec{x})$ ein Vektor im Ruhesystem. Mit der zuvor angegebenen LORENTZ-Transformation lässt sich nun x' angeben:

$$ct' = x'^0 = L^0_{\nu} x^{\nu} = \gamma \cdot x^0 - \beta\gamma \cdot x^1 = \gamma \cdot ct - \beta\gamma \cdot x^1 = c\gamma \cdot \left(t - \frac{\beta}{c} \cdot x \right)$$

4.1.1 Rapidität

Es ist möglich $\gamma = \cosh(\eta)$ und $\beta\gamma = \sinh(\eta)$ zu schreiben, was man zeigen kann durch:

$$1 = \cosh^2(\eta) - \sinh^2(\eta) = \gamma^2 - \gamma^2 \cdot \beta^2 = \gamma^2 \cdot \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) = \gamma^2 \cdot \frac{1}{\gamma^2} = 1$$

Damit kann ein Boost in x -Richtung beschrieben werden durch folgende Transformation:

$$L^{\mu}_{\nu} = \begin{pmatrix} \cosh(\eta) & -\sinh(\eta) & 0 & 0 \\ -\sinh(\eta) & \cosh(\eta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Es ist eindeutig eine Symmetrie zu Drehungen erkennbar, wobei es sich hier aber um Hyperbolikusfunktionen und nicht um trigonometrische Funktionen handelt. Dahinter stecken Gruppeneigenschaften. Allgemein ist ein Vierer-Vektor ein Objekt, das sich wie ein Ortsvektor unter LORENTZ-Transformationen verhält.

Beispiel:

Der Vierervektor des Impulses ist gegeben durch:

$$p^{\mu} = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \text{ mit } E = \sqrt{m^2 \cdot c^4 + \vec{p}^2 \cdot c^2}$$

Das Quadrat von p muss ja relativistisch invariant sein:

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

Bei der Invariante handelt es sich gerade um die Ruheenergie eines Teilchens.

Beispiel:

Man kann das skalare Potential ϕ und das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{x})$ zusammenfassen zu einem Vierervektor:

$$A^{\mu}(x) = \left(\frac{1}{c}\phi, \vec{A} \right)$$

Durch LORENTZ-Transformationen kann der Zusammenhang zwischen diesen Viererpotentialen in verschiedenen Koordinatensystemen hergestellt werden durch $A'^{\mu}(x') = L^{\mu}_{\nu} A^{\nu}(x)$.

4.1.2 Inneres Produkt zweier Vierervektoren

Betrachten wir die beiden Vierervektoren a^{μ} und b^{μ} . Das innere Produkt ist dann gegeben durch:

$$a \cdot b = a^{\mu} b_{\mu} = a^{\mu} g_{\mu\nu} b^{\nu} \text{ mit } g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Dieses innere Produkt bleibt invariant unter LORENTZ-Transformationen. Aus $a'^{\mu} = L^{\mu}_{\nu} a^{\nu}$ und $b'_{\mu} = L_{\mu}^{\nu} b_{\nu}$ ergibt sich $a' \cdot b' = a \cdot b$. Eine allgemeine LORENTZ-Transformation ist das Produkt aus drei Rotationen (SO(3)) und drei Boosts entlang der x -, y - und z -Achsen.

4.1.3 Definition der Vierableitungen

Wir definieren:

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right), \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right)$$

$$\partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\nu = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right)$$

Der Grund für das Minuszeichen ist:

$$\partial_\mu(a \cdot x) = \frac{\partial}{\partial x^\mu}(a_\nu x^\nu) = \frac{\partial}{\partial x^\mu}(a^0 x^0 - a^1 x^1 - a^2 x^2 - a^3 x^3) = a_\mu$$

Außerdem definieren wir den D'ALEMBERT-Operator durch:

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

4.2 Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung

Nichtrelativistisch gilt $E = \frac{p^2}{2m}$. Wir ersetzen:

$$E \mapsto i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{und} \quad \vec{p} \mapsto \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Die SCHRÖDINGER-Gleichung lautet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 \psi(x)$$

Im relativistischen Fall ist die Verwendung von Vierervektoren unerlässlich:

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \mapsto \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}, -\hbar i \vec{\nabla} \right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right) = i\hbar \partial^\mu$$

Es gilt außerdem $E = \sqrt{m^2 \cdot c^4 + \vec{p}^2 \cdot c^2}$ oder $E^2 = m^2 \cdot c^4 + \vec{p}^2 \cdot c^2$. Kommen wir nun zur KLEIN-GORDON-Gleichung:

$$\frac{E^2}{c^2} = p^{02} = \left(i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 = m^2 \cdot c^2 + \vec{p}^2 = m^2 \cdot c^2 + \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right)^2$$

Wenden wir die Gleichung auf die Wellenfunktion $\psi(x)$ an:

$$-\hbar^2 \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x) = m^2 \cdot c^2 \psi(x) - \hbar \vec{\nabla}^2 \psi(x)$$

Dividieren wir nun noch durch \hbar^2 und verwenden den zuvor definierten D'ALEMBERT-Operator, so folgt:

$$0 = \frac{m^2 \cdot c^2}{\hbar^2} + \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) \psi(x) \Rightarrow \boxed{0 = \left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi(x)}$$

$\frac{\hbar}{mc}$ ist die COMPTON-Wellenlänge für ein Teilchen der Masse m .

4.2.1 Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Klein-Gordon-Gleichung

Mit der Wahrscheinlichkeitsdichte ϱ und dem Wahrscheinlichkeitsstrom \vec{j} ergibt sich:

$$c \cdot \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

Mit unserer Notation der Vierervektoren lässt sich diese schreiben als:

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

Da im nichtrelativistischen Limes $\vec{j} \sim \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*$ gilt, erwarten wir $j^\mu \sim \psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*$. Sei ψ eine Lösung der KLEIN-GORDON-Gleichung:

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^* \left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi - \psi \left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi^* = \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = \\ &= \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* + (\partial_\mu \psi^*) (\partial^\mu \psi) - (\partial_\mu \psi) (\partial^\mu \psi^*) = \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) \end{aligned}$$

Man kann also einen erhaltenen Strom $\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*$ definieren (dessen Vierer-Divergenz verschwindet). Der Vorfaktor bleibt der gleiche wie im nichtrelativistischen Grenzfall:

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*)$$

4.2.2 Lösung der Klein-Gordon-Gleichung

Eine spezielle Lösung der KLEIN-GORDON-Gleichung ist eine ebene Welle, die ein freies Teilchen beschreibt.

$$\psi_p(x) = N \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p \cdot x\right) \text{ mit } p = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right)$$

Mit $p_\mu x^\mu = p^0 x^0 - \vec{p} \cdot \vec{x}$ ergibt sich:

$$\psi_p(x) = N \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p^0 x^0\right) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right) = N \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right) \cdot \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}\right)$$

Hieraus folgt weiter:

$$\square \psi_p = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \psi_p = \left[\frac{1}{\hbar^2 c^2} \cdot (-E^2) + \frac{\vec{p}^2}{\hbar^2} \right] \psi_p = -\frac{m^2 \cdot c^2}{\hbar^2} \psi_p \Leftrightarrow \frac{E^2}{c^2} = m^2 \cdot c^2 + \vec{p}^2$$

- 1.) Das Problem ist, dass sowohl positive als auch negative Energien zugelassen sind:

$$E = \pm \sqrt{(m \cdot c^2)^2 + \vec{p}^2 \cdot c^2}$$

Die Energie ist also nicht nach unten beschränkt.

- 2.) Für Zustände mit $E < 0$ ist $c\varrho = j^0$ negativ!

Der Wahrscheinlichkeitsstrom j^μ ist erhalten für jede Lösung der KLEIN-GORDON-Gleichung:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right)$$

Dieser ist identisch mit dem nichtrelativistischen Wahrscheinlichkeitsstrom.

$$j^0 = \varrho c = \frac{i\hbar}{2mc} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial E} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$$

Für einen Energieeigenzustand

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \psi_E(x)$$

können wir j^0 und damit ϱ berechnen:

$$\begin{aligned} \varrho &= \frac{i\hbar}{2mc} \cdot \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}Et\right) \psi_E^*(x) \psi_E(x) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \cdot \left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) - \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \psi_E(x) \cdot \psi_E^*(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar}Et\right) \cdot \left(\frac{i}{\hbar}Et\right) \right] = \\ &= \frac{E}{mc^2} \cdot |\psi(x)|^2 \end{aligned}$$

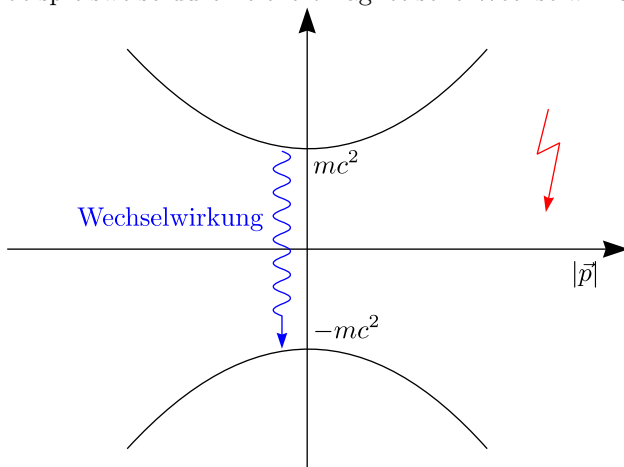
Mit

$$E = \pm \left(mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} + \dots \right)$$

erhalten wir:

$$\varrho = \left(1 + \frac{\vec{p}^2}{2m^2c^2} + \dots \right) |\psi(x)|^2$$

Dies ist im nichtrelativistischen Limes völlig in Ordnung (für $|\vec{p}c| \ll mc^2$). Das Problem ist jedoch, dass $\varrho < 0$ für Zustände mit $E < 0$ ist; man hat also eine negative Wahrscheinlichkeit. Zustände mit $E < 0$ können beispielsweise durch elektromagnetische Wechselwirkungen erreicht werden:



Die KLEIN-GORDON-Gleichung ist richtig für Teilchen ohne Spin.

- ☞ Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation von ϱ ist problematisch.
- ☞ Die Interpretation von j^μ als elektromagnetischer Strom ist in Ordnung.

Für $E > 0$ hat man Teilchen mit $q > 0$ wie beispielsweise π^+ und für $E < 0$ Anti-Teilchen mit der Ladung $-q$ wie π^- . Vergessen wir also zunächst die KLEIN-GORDON-Gleichung. Mehr dazu erfahren wir in der Feldtheorie.

4.3 Die Dirac-Gleichung

Gesucht ist eine Gleichung, deren Lösungen ebene Wellen sind und welche

- ☞ die Struktur $i\hbar\partial_t\psi = H\psi$ aufweist
- ☞ die eine positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho = |\psi|^2$ liefert

Der Fall $N = 2$ erlaubt maximal drei antikommutierende Matrizen, nämlich die PAULIMatrizen. Um vier antikommutierende Matrizen zu erhalten, ist mindestens der Fall $N = 4$ notwendig! Wir wählen β diagonal:

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \\ 0 & 1 & & \\ & & -1 & 0 \\ 0 & & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$$

Außerdem machen wir folgenden Ansatz für die α_i :

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} a & b \\ b^\dagger & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & b_i \\ b_i^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$

Aus $\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}$ erhalten wir $\{b_i, b_j\} = 2\delta_{ij}$, was für die PAULIMatrizen $b_i = \sigma_i$ erfüllt ist.

$$\boxed{\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}}$$

Die DIRAC-Gleichung hat als Lösung ebene Wellen. Damit lautet die DIRAC-Gleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = c \left(\vec{\alpha} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc \right) \psi \text{ mit } E = \sqrt{(\vec{p}c)^2 + m^2 c^4}$$

Wir schreiben dies in der relativistischen Notation:

$$i\hbar \partial_t \psi = c \left(\vec{\alpha} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc \right) \psi$$

$$\left(i\beta \cdot \frac{1}{c} \partial_t \psi + i\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) \psi - \frac{mc}{\hbar} \psi = 0 \Leftrightarrow \left(i\beta \cdot \partial_0 \psi + i\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right) \psi - \frac{mc}{\hbar} \psi = 0$$

Damit können wir schlussendlich mit $\gamma^0 = \beta$ und $\gamma^i = \beta \alpha_i$ schreiben:

$$\boxed{\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(x) = 0 \text{ mit } \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbf{1}}$$

Man sagt: Die γ -Matrizen genügen der DIRAC-Algebra. Wir überprüfen die Antikommutatorrelationen:

$$\{\gamma^0, \gamma^0\} = \{\beta, \beta\} = 2\beta^2 = 2$$

$$\{\gamma^0, \gamma^i\} = \beta \beta \alpha_i + \beta \alpha_i \beta = \alpha_i - \beta \beta \alpha_i = 0$$

Gibt es nun \vec{k} , so dass $\partial_t \varrho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}$ automatisch für jede Lösung ψ der DIRAC-Gleichung gilt? Aus $\varrho = \psi^\dagger \psi$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \varrho &= i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi + \psi^\dagger i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^\dagger \psi + \psi^\dagger c \left(\vec{\alpha} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc \right) \psi = \\ &= -c \psi^\dagger \left(\vec{\alpha} \frac{\hbar}{-i} \vec{\nabla} + \beta mc \right) \psi + c \psi^\dagger \left(\vec{\alpha} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc \right) \psi = -i\hbar c \left((\vec{\nabla} \psi^\dagger) \vec{\alpha} \psi + \psi^\dagger \vec{\alpha} \vec{\nabla} \psi \right) = -i\hbar c \vec{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) \end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\partial_t \varrho = -c \vec{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} \Rightarrow \boxed{\vec{j} = c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi}$$

Wir wollen den Strom in Vierer-Schreibweise notieren:

$$j^\mu = (c\varrho, \vec{j}) = (c\psi^\dagger \beta \psi, \psi^\dagger \beta \vec{\alpha} \psi) = c\psi^\dagger \beta \gamma^\mu \psi = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$$

$\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0 = \psi^\dagger \beta$ bezeichnet man als PAULI-Adjungierte.

4.4 Elektromagnetische Wechselwirkung und Dirac-Gleichung

Um die Wechselwirkung eines Teilchens mit einem äusserem Feld zu beschreiben, führen wir die minimale Substitution $p \mapsto p - eA$ analog zur SCHRÖDINGER-Gleichung durch, wobei e die Ladung des entsprechenden Teilchens ist. In der DIRAC-Gleichung müssen wir auf das Vierer-Potential zurückgreifen:

$$A^\mu = \left(\frac{\phi}{c}, \vec{A} \right) \text{ mit } \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \text{ und } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi$$

Damit geht unsere Substitution über in $p^\mu \mapsto p^\mu - eA^\mu$. Wir haben ja gelernt, dass in der Quantenmechanik die kanonischen Impulse p^μ übersetzt werden nach $i\hbar\partial^\mu$. Wir elektromagnetischem Feld ergibt sich dann die Ersetzung $i\hbar\partial^\mu - eA^\mu$:

$$i\hbar\partial^\mu - eA^\mu = \left(i\hbar\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c}\phi, -i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A} \right) = \left(\frac{1}{c} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right), \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A} \right)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - e\vec{A} \right) + \beta mc^2 \right] \psi + e\phi\psi$$

Eine andere Notation ist $i\hbar\partial^\mu - eA^\mu = i\hbar D^\mu$ (kovariante Ableitung). Durch Multiplikation der oberen Gleichung mit β ergibt sich folgende Schreibweise für die DIRAC-Gleichung:

$$\left(i\gamma^\mu D_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0$$

Wir wollen die DIRAC-Gleichung adjungieren:

$$-i\hbar\partial\psi^\dagger = (\vec{\nabla}\psi^\dagger) \left(\frac{\hbar}{-i}c\vec{\alpha} \right) - \psi^\dagger (-ec\vec{A} \cdot \vec{\alpha}) + \psi^\dagger\beta mc^2 + \psi^\dagger e\phi$$

Wir multiplizieren nun die DIRAC-Gleichung mit ψ^\dagger und die adjungierte DIRAC-Gleichung mit ψ und addieren die beiden Ausdrücke:

$$i\hbar \left(\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi + \psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t} \right) = \vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{i}\psi^\dagger c\vec{\alpha}\psi$$

Der Strom $j^\mu = e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ ist auch bei der Wechselwirkung mit einem elektromagnetischem Feld erhalten.

4.5 Nichtrelativistischer Limes

Wir betrachten $E = mc^2 + E_S$ mit $E_S \ll 2mc^2$. E_S liegt bei 10 eV und $2mc^2$ für ein Elektron bei ungefähr 1 MeV, was sich durch fünf Größenordnungen unterscheidet. Die volle Zeitabhängigkeit steckt im exponentiellen Vorfaktor:

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \psi_E(\vec{x})$$

Wir machen nun einen Ansatz, in dem wir den vierkomponentigen Spinor ψ mittels zweier zweikomponentiger Spinoren φ und χ schreiben:

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}mc^2 \cdot t\right) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

Dies setzen wir in die DIRAC-Gleichung ein, wobei wir zuerst folgende Nebenrechnung machen:

$$\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \psi = (\vec{\alpha} \cdot \vec{\pi})\psi = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\chi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\varphi \end{pmatrix} \text{ und } \beta\vec{\psi} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix}$$

Damit ergibt sich:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\chi} \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \cdot \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \chi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

Es ergeben sich damit folgende gekoppelten Differentialgleichungen für φ und χ :

$$i\hbar\dot{\varphi} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\chi + e\phi\varphi \quad (1)$$

$$i\hbar\dot{\chi} + 2mc^2\chi = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\varphi + e\phi\chi \quad (2)$$

Es gelten folgende Eigenwertgleichungen:

$$E_S\varphi = i\hbar\dot{\varphi} \text{ und } (E_S + 2mc^2)\chi = i\hbar\dot{\chi}$$

Damit ergibt sich aus der zweiten Gleichung:

$$\chi = \frac{c}{E_S + 2mc^2 - e\phi} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi \xrightarrow{|E_S|, |e\phi| \ll 2mc^2} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \varphi$$

χ lässt sich also im nichtrelativistischen Grenzfall durch φ selbst ausdrücken. Wir setzen also dieses χ in die erste Gleichung ein und daraus folgt die PAULI-Gleichung:

$$i\hbar\dot{\varphi} = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \varphi + e\phi\varphi$$

Wir machen folgende Abschätzung, da χ klein gegen φ ist:

$$\frac{1}{2mc^2} \cdot \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \approx \frac{p^2}{(2mc)^2} \approx \frac{E_S}{2mc^2} \approx 10^{-5} \text{ und } \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \approx 3 \cdot 10^{-3}$$

Mit $\pi_j = \frac{\hbar}{i} D_j$ ergibt sich:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = -\hbar^2 \sum_{i,j=1}^3 \sigma_i \sigma_j D_i D_j$$

Wir können den Ausdruck $\sigma_i \sigma_j$ schreiben als:

$$\sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} [\sigma_i, \sigma_j] + \frac{1}{2} \{\sigma_i, \sigma_j\} = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

womit sich ergibt:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = -\hbar^2 \vec{D}^2 - \hbar^2 \sigma_k i\varepsilon_{ijk} D_i D_j$$

$$\varepsilon_{ijk} D_i D_j = \varepsilon_{jik} D_j D_i = -\varepsilon_{ijk} D_j D_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} (D_i D_j - D_j D_i) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} [D_i, D_j]$$

Mit $\frac{\hbar}{i} \vec{D} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e\vec{A}$ ergibt sich:

$$\sigma_k \varepsilon_{ijk} D_i D_j = \frac{1}{2} \sigma_k \varepsilon_{ijk} \left[\nabla_i - \frac{ie}{\hbar} A_i, \nabla_j - \frac{ie}{\hbar} A_j \right] = \frac{1}{2} \sigma_k \varepsilon_{ijk} \left(\frac{-ie}{\hbar} \right) (\nabla_i A_j - \nabla_j A_i) = \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \left(\frac{-ie}{\hbar} \right)$$

Weiterhin gilt

$$\varepsilon_{ijk} (\nabla_i A_j - \nabla_j A_i) = 2 \left(\vec{\nabla} \times \vec{A} \right)_k$$

ergibt sich weiter:

$$i\hbar\dot{\varphi} = \frac{\left(\frac{\hbar}{i} \vec{D} \right)^2}{2m} \varphi - \frac{\hbar \cdot i\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \left(\frac{-ie}{\hbar} \right)}{2m} \varphi + e\phi\varphi = \boxed{\frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} \varphi - \frac{e}{2m} \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \varphi + e\phi\varphi}$$

Vergleiche dies mit $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$. Betrachten wir speziell ein schwaches homogenes \vec{B} -Feld mit

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

$$\begin{aligned} \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} &\approx \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m} \cdot (\vec{p}\vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m} \cdot \frac{1}{2} (p_i \varepsilon_{ijk} B_j r_k + \varepsilon_{ijk} B_j r_k p_i) = \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m} (\vec{B} \cdot \vec{L}) \end{aligned}$$

Damit folgt weiter für den oberen Term:

$$\boxed{i\hbar\dot{\varphi} = \frac{\vec{p}^2}{2m}\varphi - \frac{e}{2m}\vec{B} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})\varphi + e\phi\varphi \text{ mit } \mu = \frac{e}{2m}(\vec{L} + 2\vec{S})}$$

Wegen $\vec{L} + 2\vec{S}$ erkennen wir, dass der g-Faktor des freien Elektrons gleich zwei ist. In der Quantenelektrodynamik findet man jedoch:

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right)$$

Angeblich soll SCHWINGER auf einer Konferenz gesagt haben, dass er eine Woche gebraucht habe, um dieses Ergebnis für den g-Faktor zu erhalten. FEYNMAN habe dann am nächsten Morgen „Ja, bestätigt!“ erwidert.

$$g = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right)$$

Die Korrektur erhält man, indem man von der Vorstellung der DIRAC-Gleichung als feste Ein-Teilchen-Gleichung weggeht. Die Quantenelektrodynamik reicht dennoch nicht aus; es sind außerdem hadronische Korrekturen und die schwache Wechselwirkung zu berücksichtigen.

Betrachten wir nun im folgenden wieder die gekoppelten Gleichungen für die Zweierspinoren φ und χ . Aus der DIRAC-Gleichung lassen sich noch mehr Informationen (Atomphysik) herausholen. Gehen wir deshalb nochmal zurück und rechnen weitere Korrekturen aus.

4.5.1 Relativistische Korrekturen

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}(\vec{x}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_S t\right) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}(\vec{x})$$

Gesucht ist eine zweikomponentige SCHRÖDINGER-Gleichung für φ . Es sind also folgende exakten gekoppelten Differentialgleichungen zu lösen:

$$\boxed{(2mc^2 + E_S - V)\chi = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\varphi \text{ und } E_S\varphi = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\chi + V\varphi}$$

$V = e\phi$ sei das elektrostatische Potential. Wir wollen nun für die erste Gleichung eine TAYLOR-Entwicklung machen, wobei wir einen weiteren Term berücksichtigen. (Zuvor haben wir nur die nullte Ordnung berechnet.)

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{2mc^2 + E_S - V} c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\varphi = \frac{1}{2mc \left(1 + \frac{E_S - V}{2mc^2} \right)} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\varphi = \\ &= \frac{1}{2mc} \left(1 - \frac{E_S - V}{2mc^2} + \dots \right) \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\varphi \end{aligned} \quad (*)$$

In die zweite Gleichung eingesetzt, ergibt dies:

$$(E_S - V)\varphi = \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \frac{1}{2m} \left(1 - \frac{E_S - V}{2mc^2} + \dots \right) \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\varphi$$

Das Ziel ist die Vereinfachung dieses Ausdrucks; wir machen dazu folgende Nebenrechnung:

$$(E_S - V)\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi = \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} (E_S - V)\varphi + \vec{\sigma} [E_S - V, \vec{\pi}] \varphi = (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \varphi + \vec{\sigma} \left[-V, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right] \varphi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^3}{2m} \varphi + \frac{\hbar}{i} \vec{\sigma} (\vec{\nabla} V) \varphi$$

Wir setzen dies in Gleichung (*) ein und erhalten die **erweiterte Pauli-Gleichung**:

$$(E_S - V)\varphi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \varphi - \frac{1}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \left(\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^3}{2m} + \frac{\hbar}{i} \vec{\sigma} (\vec{\nabla} V) \right) \varphi$$

Wir betrachten nun den Spezialfall $\vec{A} = 0$; es soll also kein (äußeres) Magnetfeld vorhanden sein. Damit ist $\vec{\pi} = \vec{p}$ und $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = \vec{p}^2$. Des weiteren sei $V = V(r)$ ein radialsymmetrisches Potential:

$$\vec{\nabla} V = \frac{\vec{r} dV}{r dr}$$

Damit folgt:

$$(E_S - V)\varphi = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3 c^2} \right) \varphi - \frac{\hbar}{i} \frac{1}{4m^2 c^2} \sigma_i \sigma_j p_i r_j \cdot \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \cdot \varphi$$

Mit $\sigma_i \sigma_j = i \varepsilon_{ijk} \delta_k + \delta_{ij}$ und $\varepsilon_{ijk} p_i r_j = -L_k$ resultiert:

$$\begin{aligned} E_S \varphi &= \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3 c^2} + V \right) \varphi + \frac{1}{4m^2 c^2} \hbar \sigma_k L_k \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \varphi - \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{1}{4m^2 c^2} \nabla_i (\nabla_i V) \varphi = \\ &= \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3 c^2} + V \right) \varphi + \frac{1}{2m^2 c^2} \vec{L} \cdot \vec{S} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \varphi + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \left((\vec{\nabla}^2 V) + (\vec{\nabla} V) V \right) \varphi = H_\varphi \varphi \end{aligned}$$

Ganz rechts steht ein Ausdruck der Form $\vec{\nabla} \varphi$, wobei $\vec{\nabla} = \frac{i}{\hbar} \vec{p}$ gilt, was jedoch **nicht hermitesch** ist. Ist deshalb H auch nicht hermitesch? Dieses Problem werden wir später lösen.

Interpretation:

Betrachten wir zunächst den Ausdruck $\frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3 c^2}$. Mit der TAYLOR-Entwicklung der Wurzel, nämlich

$$\sqrt{1 + \varepsilon} = 1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{8} + O(\varepsilon^3)$$

ergibt sich:

$$E = \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{(mc)^2}} \simeq mc^2 \left(1 + \frac{\vec{p}^2}{2m^2 c} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3 c^2} + \dots \right) = mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3 c^2} + \dots$$

Es ist also eine relativistische Korrektur zur kinetischen Energie E_{kin} . Der Operator

$$H_{LS} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

beschreibt die \vec{L} - \vec{S} -Kopplung einschließlich des Faktors $\frac{1}{2}$ von der THOMAS-Präzession. Der Faktor $\frac{1}{2}$ folgt aus einer komplizierten Herleitung, die von THOMAS zum ersten mal durchgeführt wurde. Die DIRAC-Gleichung liefert diesen Faktor $\frac{1}{2}$ quasi als „Nebenprodukt“. Das Problem ist nun – wie zuvor schon erwähnt wurde – dass $(\vec{\nabla} V) \vec{\nabla} \varphi$ nicht hermitesch ist. Dies verletzt die Unitarität; wir haben damit keine unitäre Zeitentwicklung und Wahrscheinlichkeitserhaltung. Dazu betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^\dagger \psi = \varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi$. Für $\vec{A} = \vec{\sigma}$ gilt

$$\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{4m^2 c^2} \varphi$$

und damit folgt weiter unter Verwendung von $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \vec{p}^2$:

$$\varphi^\dagger \varphi + \varphi^\dagger \frac{\vec{p}^2}{4m^2 c^2} \varphi = \varphi^\dagger \left(1 + \frac{\vec{p}^2}{4m^2 c^2} \right) \varphi = \left| \left(1 + \frac{\vec{p}^2}{8m^2 c^2} \right) \varphi \right|^2$$

$$\varrho = \phi^\dagger \phi \text{ mit } \phi = \Omega \varphi \text{ wobei } \Omega = 1 + \frac{\vec{p}^2}{8m^2 c^2} + \dots$$

Man ersetzt nun ϕ durch $\Omega \varphi$:

$$E_S \phi = \Omega E_S \varphi = \Omega H_\varphi \Omega^{-1} \Omega \varphi = (\Omega H_\varphi \Omega^{-1}) \Omega \varphi = H \Omega \varphi$$

$\Omega H_\varphi \Omega^{-1}$ ist dann der richtige HAMILTON-Operator:

$$\Omega H_\varphi \Omega^{-1} = \left(1 + \frac{\vec{p}^2}{8m^2 c^2} \right) H_\varphi \left(1 - \frac{\vec{p}^2}{8m^2 c^2} \right) = H_\varphi + \left[\frac{\vec{p}^2}{8m^2 c^2}, H_\varphi \right] \text{ mit } H_\varphi = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V + \dots$$

Damit ergibt sich weiter:

$$H_\varphi - \frac{1}{8m^2 c^2} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \left[\vec{\nabla}^2, V \right]$$

Mit der Auswertung des Kommutators, nämlich

$$\left[\vec{\nabla}^2, V \right] = \vec{\nabla} \cdot \left[\vec{\nabla}, V \right] + \left[\vec{\nabla}, V \right] \cdot \vec{\nabla} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} V) + (\vec{\nabla} V) \cdot \vec{\nabla} = \vec{\nabla}^2 V + 2(\vec{\nabla} V) \cdot \vec{\nabla}$$

ergibt sich weiter:

$$H_\varphi - \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \left(\vec{\nabla}^2 V + 2(\vec{\nabla} V) \cdot \vec{\nabla} \right) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3 c^2} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} (\vec{\nabla}^2 V)$$

$$H\phi = \left(\underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m} + V}_{H_0} - \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{8m^3 c^2} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} (\vec{\nabla}^2 V)}_{\text{Störung } H_I} \right) \phi$$

Betrachten wir nun speziell das COULOMBpotential $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$:

$$H_{LS} \propto \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Dies liefert kein Beitrag für $l = 0$. Außerdem gilt $\vec{\nabla}^2 V \propto \delta(\vec{r})$, ergibt also eine δ -Funktion am Ursprung. Es gibt damit einen Beitrag nur für $l = 0$, sonst verschwindet die Wellenfunktion. Die niedrigste Ordnung Störungstheorie liefert für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms:

$$E_n^{(0)} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a_0 n^2}$$

$$\Delta E_n^{(1)} = -\alpha^2 \cdot E_n^{(0)} \frac{1}{n} \cdot \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \text{ mit } j = l \pm \frac{1}{2} \text{ und } \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

Dabei handelt es sich um die **Feinstruktur-Aufspaltung**. Diese Aufspaltung ist von j (und n , nicht aber von l) abhängig; es gibt also eine Aufspaltung von $2p_{\frac{1}{2}}$ und $2p_{\frac{3}{2}}$, während $2s_{\frac{1}{2}}$ und $2p_{\frac{1}{2}}$ entartet bleiben.

4.6 Dirac-Gleichung und Lorentz-Transformation

Die Situation, die wir haben, ist folgende: $\psi(x)$ sei ein DIRAC-Spinor im Inertialsystem A und $\psi(x')$ im Inertialsystem B . Der Zusammenhang zwischen den Variablen ist gegeben durch eine lineare Transformation, nämlich $\Omega x = x'$. Wie ist jedoch die Transformation zwischen den beiden Spinoren ψ und ψ' zu bewerkstelligen? Gehen wir dazu aus vom DIRAC-Strom $j^\mu(x) = c\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$. Allgemein wollen wir Objekte der Form $j^\mu = \bar{\psi}\Gamma\psi$ betrachten, wobei Γ beliebige 4×4 -Matrizen sind.

4.6.1 Beispiel: Ebene Wellen

Wir betrachten Lösungen der freien DIRAC-Gleichung

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right) \psi = 0 \Leftrightarrow \frac{mc}{\hbar} \psi = i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \psi = i\gamma^\mu \left(-\frac{ip_\mu}{\hbar}\right) \psi$$

die folgende Form haben:

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p \cdot x\right) w(p)$$

Durch Einsetzen ergibt sich eine Differentialgleichung für $w(p)$:

$$(p^\mu \gamma_\mu - mc) w(p) = 0$$

Im Ruhesystem des Teilchens gilt:

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{\sigma}\right) \Rightarrow p_\mu \gamma^\mu = p^0 \gamma^0 - \vec{p} \cdot \vec{\gamma} = \frac{E}{c} \beta = \frac{E}{c} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Damit ergibt sich:

1.) Zwei Lösungen für $E = +mc^2$:

$$w_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2.) Zwei Lösungen für $E = -mc^2$:

$$w_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad w_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eine LORENTZ-Transformation ins System, in dem das Teilchen den Impuls \vec{p} hat, liefert die allgemeine ebene Welle Lösung $w(p)$. Für eine LORENTZ-Transformation gilt $x' = \Omega x$ oder in Komponentenschreibweise $x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu$. Die definierende Eigenschaft von Ω ist:

$$x' \cdot x' = g_{\mu\nu} x'^\mu x'^\nu = g_{\mu\nu} \Omega^\mu_\rho \Omega^\nu_\sigma x^\rho x^\sigma = g_{\rho\sigma} x^\rho x^\sigma = x \cdot x$$

Das Quadrat des Vektors muss also in beiden Systemen gleich sein. Daraus folgt:

$$\Omega_\mu^\rho \Omega^\mu_\sigma = g^\rho_\sigma = \delta^\rho_\sigma \Leftrightarrow (\Omega^{-1})^\rho_\mu = \Omega_\mu^\rho$$

LORENTZ-Transformationen sind also eine Verallgemeinerung von orthogonalen Transformationen in drei Dimensionen. In infinitesimalen Falle ergibt sich $\Omega^\mu_\sigma = g^\mu_\sigma + \omega^\mu_\sigma$. Es muss jedoch obige Bedingung erfüllt sein, was die ω^μ_σ einschränkt.

$$g^\rho_\sigma = (g^\mu_\sigma + \omega^\mu_\sigma) (g^\rho_\mu + \omega^\rho_\mu) = g^\rho_\sigma + \omega^\rho_\sigma + \omega_\sigma^\rho$$

Damit muss $\omega^\rho_\sigma + \omega_\sigma^\rho = 0$ sein. ω muss also eine antisymmetrische 4×4 -Matrix sein. $\omega_{\rho\sigma}$ ist bestimmt durch sechs reelle Parameter und damit sechs Generatoren. \vec{J} sind die Generatoren für die Rotationen, welche die erste, zweite und dritte Komponente von ω_{ij} , also $\vec{\omega}$ transformieren. Die drei Generatoren \vec{K} für die Boosts transformieren ω_{0i} .

4.7 Dirac-Gleichung und Lorentz-Transformation

1.) System A :

$$\left(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(x) = 0$$

2.) System B :

$$\left(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x') = 0$$

Kovarianz: $\psi'(x') = S(\Omega)\psi(x)$

$S(\Omega)$ bilden die Darstellung der LORENTZ-Gruppe:

$$S(\Omega_1\Omega_2) = S(\Omega_1)S(\Omega_2) \Rightarrow S(\Omega^{-1}) = S^{-1}(\Omega), S(\mathbf{1}) = \mathbf{1}$$

Es ist also $\psi(x) = S(\Omega^{-1})\psi'(x')$ und damit:

$$S(\Omega) \left(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right) S(\Omega^{-1})\psi'(x') = 0 \Leftrightarrow \left(iS(\Omega)\gamma^\mu S(\Omega^{-1}) \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x') = 0$$

Nach der Kettenregel gilt

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Omega^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu}$$

Die $\Omega^\nu{}_\mu$ sind nun die Koeffizienten der Transformationsmatrix zwischen x und x' .

$$\left(iS(\Omega)\gamma^\mu S(\Omega^{-1})\Omega^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - \frac{mc}{\hbar} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x') = 0$$

Damit die LORENTZ-Invarianz nicht verletzt ist (Konsistenz!), muss $S(\Omega)\Omega^\nu{}_\mu \gamma^\mu S(\Omega^{-1}) = \gamma^\nu$ sein. (Die Komponenten $\Omega^\nu{}_\mu$ vertauschen natürlich mit $S(\Omega)$.) Dies ist äquivalent mit:

$$\Omega^\nu{}_\mu \gamma^\mu = S(\Omega^{-1})\gamma^\nu S(\Omega)$$

Für den infinitesimalen Fall gilt:

$$\Omega^\nu{}_\mu = g^\nu{}_\mu + \omega^\nu{}_\mu, S(\Omega) = \mathbf{1} - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu}$$

σ ist antisymmetrisch, also $\sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu}$. Die inverse Transformation ist dann gegeben durch:

$$S(\Omega^{-1}) = \mathbf{1} + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu}$$

Wir können dann schreiben:

$$\omega^\nu{}_\mu \gamma^\mu = \omega^{\alpha\beta} \frac{i}{2} (g^\nu{}_\alpha \gamma_\beta - g^\nu{}_\beta \gamma_\alpha) = \frac{i}{4} \omega^{\alpha\beta} (\sigma_{\alpha\beta} \gamma^\nu - \gamma^\nu \sigma_{\alpha\beta})$$

$$[\sigma_{\alpha\beta}, \gamma^\nu] = \frac{2}{i} (g^\nu{}_\alpha \gamma_\beta - g^\nu{}_\beta \gamma_\alpha) = 2i (g^\nu{}_\beta \gamma_\alpha - g^\nu{}_\alpha \gamma_\beta)$$

Die Lösung ist $\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i}{2} [\gamma_\alpha, \gamma_\beta]$. Wir überprüfen dies:

$$\begin{aligned} \frac{2}{i} [\sigma_{\alpha\beta}, \gamma^\nu] &= (\gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha) \gamma^\nu - \gamma^\nu (\gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha) = \\ &= (\gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha) \gamma^\nu + \gamma_\alpha \gamma^\nu \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma^\nu \gamma_\alpha - \gamma^\nu (\gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha) - \gamma_\alpha \gamma^\nu \gamma_\beta + \gamma_\beta \gamma^\nu \gamma_\alpha = \\ &= \gamma_\alpha \gamma_\beta \gamma^\nu + \gamma_\alpha \gamma^\nu \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha \gamma^\nu - \gamma_\beta \gamma^\nu \gamma_\alpha - \gamma^\nu \gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\alpha \gamma^\nu \gamma_\beta + \gamma^\nu \gamma_\beta \gamma_\alpha + \gamma_\beta \gamma^\nu \gamma_\alpha = \\ &= \gamma_\alpha (\gamma_\beta \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma_\beta) - \gamma_\beta (\gamma_\alpha \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma_\alpha) - (\gamma^\nu \gamma_\alpha + \gamma_\alpha \gamma^\nu) \gamma_\beta + (\gamma^\nu \gamma_\beta + \gamma_\beta \gamma^\nu) \gamma_\alpha = \\ &= \gamma_\alpha 2g_\beta{}^\nu - \gamma_\beta 2g_\alpha{}^\nu - 2g^\nu{}_\alpha \gamma_\beta + 2g^\nu{}_\beta \gamma_\alpha = 2\gamma_\alpha 2g_\beta{}^\nu - 2\gamma_\beta 2g_\alpha{}^\nu = 4(g^\nu{}_\beta \gamma_\alpha - g^\nu{}_\alpha \gamma_\beta) \end{aligned}$$

4.7.1 Lorentz-Transformationsmatrizen für Spinoren

Wir können nun auf endliche Transformationen verallgemeinern:

$$S(\Omega) = \exp\left(-\frac{i}{4}\sigma_{\alpha\beta}\omega^{\alpha\beta}\right) \text{ mit } \sigma_{\alpha\beta} = \frac{i}{2}[\gamma_\alpha, \gamma_\beta] = \frac{i}{2}(\gamma_\alpha\gamma_\beta - \gamma_\beta\gamma_\alpha)$$

Wie transformiert sich nun $\bar{\psi}(x)$ und $j^\mu(x) = c\bar{\psi}\gamma^\nu\psi$? Wir hatten $\bar{\psi}(x)$ definiert als $\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^0$. Was ist also $\psi'^\dagger(x')$, wenn wir wissen, dass $\psi'(x') = S(\Omega)\psi(x)$ ist? Durch Adjungieren folgt:

$$\psi'^\dagger(x') = \psi^\dagger(x)S^\dagger(\Omega) = \psi^\dagger(x)\exp\left(+\frac{i}{4}\sigma_{\alpha\beta}^\dagger\omega^{\alpha\beta}\right)$$

Was ist $\sigma_{\alpha\beta}^\dagger$?

$$\sigma_{\alpha\beta}^\dagger = -\frac{i}{2}(\gamma_\beta^\dagger\gamma_\alpha^\dagger - \gamma_\alpha^\dagger\gamma_\beta^\dagger) = \frac{i}{2}[\gamma_\alpha^\dagger, \gamma_\beta^\dagger]$$

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

$$(\gamma^i)^\dagger = (\beta\alpha_i)^\dagger = \alpha_i\beta = -\beta\alpha_i = \beta(\beta\alpha_i)\beta = \beta\gamma^i\beta$$

Es ist also $(\gamma^\alpha)^\dagger = \gamma^0\gamma^\alpha\gamma^0$, womit wir erhalten:

$$\sigma_{\alpha\beta}^\dagger = \frac{i}{2}[\gamma^0\gamma_\alpha\gamma^0, \gamma^0\gamma_\beta\gamma^0] = \gamma^0\frac{i}{2}[\gamma_\alpha, \gamma_\beta]\gamma^0 = \gamma^0\sigma_{\alpha\beta}\gamma^0$$

Weiter folgt:

$$\psi'^\dagger(x') = \psi^\dagger(x)\exp\left(+\frac{i}{4}\sigma_{\alpha\beta}^\dagger\omega^{\alpha\beta}\right) = \psi^\dagger(x)\gamma^0\exp\left(\frac{i}{4}\sigma_{\alpha\beta}\omega^{\alpha\beta}\right)\gamma^0 = \psi^\dagger(x)\gamma^0S(\Omega^{-1})\gamma^0$$

Multiplizieren wir noch mit γ^0 :

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)S(\Omega^{-1})$$

4.7.2 Transformation des Wahrscheinlichkeitsstroms

Der transformierte Strom ist gegeben durch:

$$j'^\mu(x') = c\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = c\bar{\psi}(x)S^{-1}(\Omega)\gamma^\mu S(\Omega)\psi(x) = c\bar{\psi}(x)\Omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu\psi(x) = \Omega^\mu{}_\nu c\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x) = \Omega^\mu{}_\nu j^\nu(x)$$

Wir haben damit gezeigt, dass sich der Strom unter LORENTZTRANSFORMATIONEN als Vierervektor (Feld) transformiert. Betrachten wir als weiteres Beispiel $\varphi(x) = \bar{\psi}(x)\psi(x)$. In einem anderen Inertialsystem gilt:

$$\varphi'(x') = \bar{\psi}'(x')\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}(\Omega)S(\Omega)\psi(x) = \bar{\psi}(x)\mathbf{1}\psi(x) = \varphi(x)$$

Dieses Objekt transformiert sich genau als Skalar. In jedem LORENTZSYSTEM ist dieses Objekt am selben Punkt x identisch.

4.8 Allgemeiner Fall

Wir betrachten ein Objekt der Art $\bar{\psi}(x)\Gamma\psi(x)$, wobei Γ eine beliebige 4×4 -Matrix sei. Wir suchen nun eine Basis für Γ mit definierten Transformationseigenschaften unter LORENTZTRANSFORMATIONEN:

$$\textcircled{S} \Gamma^S = \mathbf{1} \text{ (transformiert sich wie Skalar, eine Matrix)}$$

$$\textcircled{V} \Gamma^V = \gamma^\mu \text{ (transformiert sich wie Vektor, vier Matrizen)}$$

☞ $\Gamma^T = \sigma^{\mu\nu}$ (transformiert sich wie Tensor, sechs Matrizen)

☞ $\Gamma^P = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \gamma_5 = \gamma^5$ (Pseudoskalar, eine Matrix)

Da die „5“ niemals mit irgendwelchen Objekten kontrahiert wird, ist es egal, ob sich oben oder unten steht.

☞ $\gamma^A = \gamma^\mu\gamma_5$ (Axialvektor, vier Matrizen)

Wie transformiert sich $T^{\mu\nu}(x) = \bar{\psi}(x)\sigma^{\mu\nu}\psi(x)$?

$$T^{\mu\nu}(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}(\Omega)\frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]S(\Omega)\psi(x)$$

Mit $S^{-1}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu)S = S^{-1}(\gamma^\mu SS^{-1}\gamma^\nu - \gamma^\nu SS^{-1}\gamma^\mu)S$ ergibt sich weiter:

$$\bar{\psi}(x)\frac{i}{2}[S^{-1}\gamma^\mu S, S^{-1}\gamma^\nu S]\psi(x) = \bar{\psi}(x)\frac{i}{2}[\Omega^\mu_\alpha\gamma^\alpha, \Omega^\nu_\beta\gamma^\beta]\psi(x) = \Omega^\mu_\alpha\Omega^\nu_\beta\bar{\psi}(x)\frac{i}{2}[\gamma^\alpha, \gamma^\beta]\psi(x) = \Omega^\mu_\alpha\Omega^\nu_\beta T^{\alpha\beta}(x)$$

Ein Objekt mit zwei Indizes, das sich unter LORENTZtransformationen pro Index wie ein Vierervektor transformiert, transformiert sich wie ein Tensor zweiter Stufe; $T^{\mu\nu}(x)$ ist also ein solcher Tensor zweiter Stufe.

4.8.1 Eigenschaften von γ_5

Schauen wir uns als erstes das Produkt von γ_5 mit einer Matrix γ^μ an:

$$\gamma_5\gamma^\mu = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^\mu$$

Beispielsweise gilt für $\mu = 2$:

$$i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^2 = (-1)^3 i\gamma^2\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = -\gamma^2\gamma_5$$

Dies funktioniert so für alle γ^μ ; man erhält dann $\gamma_5\gamma^\mu = -\gamma^\mu\gamma_5$. γ_5 antikommutiert also mit den vier γ^μ -Matrizen. Damit gilt weiter:

$$[\gamma_5, \sigma^{\alpha\beta}] = \gamma_5\frac{i}{2}[\gamma^\alpha, \gamma^\beta] - \frac{i}{2}[\gamma^\alpha, \gamma^\beta]\gamma_5 = 0$$

γ_5 kommutiert mit $\sigma^{\alpha\beta}$. Hieraus folgt sofort:

$$\gamma_5 S(\Omega) = S(\Omega)\gamma_5 \text{ wegen } S(\Omega) = \exp\left[-\frac{i}{4}\sigma_{\alpha\beta}\omega^{\alpha\beta}\right]$$

Betrachten wir die Transformation von $P(x)$, $A^\mu(x)$:

$$\bar{\psi}'(x')\gamma_5\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}(\Omega)\gamma_5 S(\Omega)\psi(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$$

$$\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\gamma_5\psi'(x') = \bar{\psi}(x)\gamma^\nu\gamma_5\psi(x)\Omega^\mu_\nu$$

4.8.2 Parität als Lorentztransformation

Es sei $x = (ct, \vec{x})$ und $x' = (ct, -\vec{x})$. Wie sieht nun Ω für eine solche Paritätstransformation aus?

$$(\Omega^\mu_\nu) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow x'^\mu = \Omega^\mu_\nu x^\nu = x_\mu$$

Natürlich entspricht $x = (ct, \vec{x})$ dem kontravarianten Vektor x^μ und $x' = (ct, -\vec{x})$ dem kovarianten Vektor x_μ , wie wir dies am Anfang des Kapitels schon definiert hatten. Was ist $S(\Omega) \equiv P$ für diese Paritätstransformation? Wir fordern dazu die definierende Eigenschaft von $S(\Omega)$ auch für diese spezielle Transformation:

$$P^{-1}\gamma^\mu P = \Omega^\mu_\nu\gamma^\nu = \gamma_\mu$$

Dies ist erfüllt für $P = \gamma^0$:

$$\gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 = \begin{cases} \gamma^0 & \text{für } \mu = 0 \\ -\gamma^\mu = \gamma_\mu & \text{für } \mu = 1, 2, 3 \end{cases}$$

Spinoren transformieren sich unter Paritätstransformationen also folgendermaßen:

$$\psi'(x') = \gamma^0 \psi(x) = P\psi(x) \text{ und } \bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)\gamma^0 = \bar{\psi}(x)P$$

Wie verhalten sich obige 16 Matrizen, wenn wir eine Paritätstransformation durchführen?

$$\bar{\psi}(x)\Gamma\psi(x) \xrightarrow{P} \bar{\psi}(x)\gamma^0\Gamma\gamma^0\psi(x)$$

☞ Skalar: $\gamma^0 \mathbf{1} \gamma^0 = \mathbf{1}$

☞ Pseudoskalar: $\gamma^0 \gamma_5 \gamma^0 = -\gamma_5 \gamma_0 \gamma_0 = -\gamma_5$

$$P'(x') = \bar{\psi}'(x') \gamma_5 \psi'(x') = \bar{\psi}(x) (-\gamma_5) \psi(x) = -P(x)$$

Der Pseudoskalar hat also ungerade Parität.

☞ Axialvektor: $\gamma^0 \gamma^\mu \gamma_5 \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 \gamma^0 \gamma_5 \gamma^0 = \gamma_\mu (-\gamma_5) = -\gamma_\mu \gamma_5$

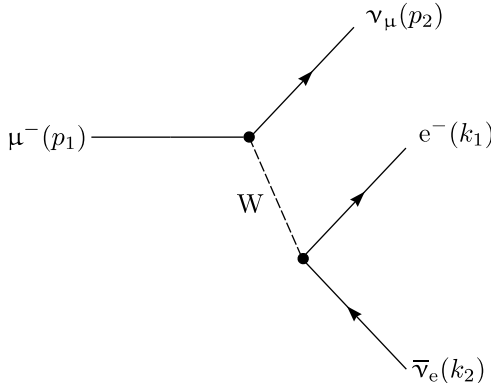
$$A'^\mu(x') = \bar{\psi}'(x') \gamma^\mu \gamma_5 \psi'(x') = -\bar{\psi}(x) \gamma_\mu \gamma_5 \psi(x) = -A_\mu(x)$$

Die zeitliche Komponente erhält also ein Minuszeichen, die Ortskomponenten nicht.

4.8.3 Anwendung: β -Zerfall

Wir betrachten als Beispiel ein μ -Meson, das in ein Elektron, ein Myon neutrino und ein Antielektron neutrino zerfällt:

$$\mu^-(p_1) \mapsto e^-(k_1) + \nu_\mu(p_2) + \bar{\nu}_e(k_2)$$



Das zugehörige Matrixelement lautet:

$$T = \frac{G_F}{\sqrt{2}} \underbrace{\bar{\psi}(p_2) \gamma^\mu (1 - \gamma_5) \psi(p_1)}_{V^\mu - A^\mu = j_1^\mu} \underbrace{\bar{\psi}(k_1) \gamma_5 (1 - \gamma_5) \psi(k_2)}_{V_\mu - A_\mu = j_{2\mu}}$$

$\psi(p_1), \dots, \psi(k_2)$ sind ebene-Wellen-Lösungen der DIRAC-Gleichung. Die schwache Wechselwirkung wird beschrieben durch eine $V - A$ -Struktur für das zerfallende Teilchen; man spricht von einer Vektor-Axialvektor-Struktur. Unter Paritätstransformationen gilt:

$$T \xrightarrow{P} T' = \frac{G_F}{\sqrt{2}} \bar{\psi}(p_2) \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \psi(p_1) \bar{\psi}(k_1) \gamma^\mu (1 + \gamma_5) \psi(k_2) \neq T$$

Unter Drehungen oder Boots passiert folgendes:

$$T = j_1 \cdot j_2 \xrightarrow{S(\Omega)} j_1^\alpha j_2^\beta \Omega_\alpha^\mu \Omega_{\mu\beta} = j_1^\alpha j_2^\beta g_{\alpha\beta} = j_1 \cdot j_2 = T$$

Die schwache Wechselwirkung verletzt also die Parität.

4.9 Drehungen von Spinoren

Wir gehen wieder aus von $x'^{\mu} = \Omega^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$ und betrachten eine Drehung um die z -Achse um den Winkel ω :

$$(\Omega^{\mu}_{\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \omega & -\sin \omega & 0 \\ 0 & \sin \omega & \cos \omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{für infinitesimale } \omega} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\omega & 0 \\ 0 & \omega & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (g^{\mu}_{\nu} + \omega^{\mu}_{\nu})$$

Alle $\omega^{\mu\nu}$ sind gleich null außer $\omega^{12} = -\omega$, $\omega^{12} = +\omega = -\omega^{21}$.

$$S(\Omega) = \exp\left(-\frac{i}{4}(\omega^{12}\sigma_{12} + \omega^{21}\sigma_{21})\right) = \exp\left(-\frac{i}{4}(\omega^{12}\sigma_{12} - \omega^{12}(-\sigma_{12}))\right) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\sigma_{12}\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\omega S_z\right)$$

Hieraus folgt:

$$S_z = \frac{\hbar\sigma_{12}}{2} = \hbar \begin{pmatrix} \frac{\sigma_3}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_3}{2} \end{pmatrix}$$

Allgemein erhalten wir:

$$S_k = \hbar \frac{\Sigma_k}{2} \text{ mit } \Sigma_k = \frac{1}{4} \varepsilon^{ijk} \sigma_{ij}$$

4.10 Ebene-Wellen-Lösungen

Die freie DIRAC-Gleichung

$$\left(i\not{\partial} - \frac{mc}{\hbar}\right) \psi(x)$$

gelöst durch

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p \cdot x\right) w(p)$$

Wir hatten als Spezialfall das Teilchen in Ruhe behandelt mit $p^{\mu} = (mc, \vec{0})$.

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} \frac{\sigma_3}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_3}{2} \end{pmatrix}$$

$$\textcircled{R} E = mc^2:$$

$$w_1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, S_z = \frac{\hbar}{2} \text{ und } w_2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, S_z = -\frac{\hbar}{2}$$

$$\textcircled{R} E = -mc^2:$$

$$w_3(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, S_z = \frac{\hbar}{2} \text{ und } w_4(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, S_z = -\frac{\hbar}{2}$$

Wir vollführen einen Boost in das Inertialsystem, in dem sich das Teilchen mit der Geschwindigkeit \vec{v} bewegt. Die Matrix

$$\omega^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & n_1 & n_2 & n_3 \\ -n_1 & 0 & 0 & 0 \\ -n_2 & 0 & 0 & 0 \\ -n_3 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

beschreibt einen Boost mit der Richtung $\sim \vec{n}$, wobei \vec{n} ein Einheitsvektor ist.

$$S(\Omega) = \exp\left(-\frac{i}{4}\omega\sigma_{\mu\nu}\right) = \exp\left(-\frac{i}{2}\sum_{j=1}^3\omega^{0j}\sigma_{0j}\right) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\vec{n} \cdot \frac{i}{2}[\beta, -\beta\vec{\alpha}]\right)$$

Mit $[\beta, -\beta\vec{\alpha}] = -\beta^2\vec{\alpha} + \beta\vec{\alpha}\beta = -2\vec{\alpha}$ erhalten wir:

$$S(\Omega) = \exp\left(-\frac{1}{2}\omega\vec{n} \cdot \vec{\alpha}\right)$$

Das Problem ist der Zusammenhang zwischen ω , \vec{n} und \vec{p} , E . Wir betrachten nun einen Boost für Vierervektoren:

$$\Omega^\mu{}_\nu = \exp(\omega^\alpha{}_\beta) = \exp\left[\omega\begin{pmatrix} 0 & -n_1 & -n_2 & -n_3 \\ -n_1 & 0 & 0 & 0 \\ -n_2 & 0 & 0 & 0 \\ -n_3 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\right] \equiv \exp(\omega I)$$

Wir schauen uns als Spezialfall einen Boost entlang der x -Achse an, also mit $n_1 = 1$ und $n_2 = n_3 = 0$:

$$I = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow I^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow I^{2n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ und } I^{2n+1} = I$$

Damit kann man die Exponentialfunktion in gerade und ungerade Terme aufspalten:

$$\exp(\omega^\alpha{}_\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega I)^n}{n!} = \cosh(\omega I) + \sinh(\omega I) = \begin{pmatrix} \cosh \omega & -\sinh \omega & 0 & 0 \\ -\sinh \omega & \cosh \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \Omega$$

Vergleichen wir dies mit $x'^\nu = \Omega^\nu{}_\mu x^\mu$. Durch Anwendung der Matrix $\exp(\omega^\alpha{}_\beta)$ auf $(x^0, x^1, x^2, x^3)^\top$ erhalten wir:

$$x'^0 = \cosh \omega (x^0 - \tanh(\omega)x^1) \stackrel{!}{=} \gamma \left(ct - \frac{v}{c}x\right)$$

$$x'^1 = \cosh \omega (x^1 - \tanh(\omega)x^0) \stackrel{!}{=} \gamma \left(x - \frac{v}{c}ct\right)$$

Durch Vergleich beider Seiten folgt $\cosh \omega = \gamma$ und $\tanh \omega = \frac{v}{c}$. ω bezeichnet man auch als Rapidität. Im gestrichenen Inertialsystem gilt für das Teilchen $p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right)$.

$$\cosh \omega = \gamma = \frac{E}{mc^2}, \quad \tanh \omega = \frac{v}{c} = \frac{|\vec{p}c|}{E}$$

☞ Ungestrichenes Inertialsystem:

Im Ruhesystem ist $p^\mu = (mc^2, \vec{0})$. Allgemein ist $\hat{v} = \vec{n} \sim \hat{p}$.

☞ Gestrichenes Inertialsystem:

Das Teilchen bewegt sich mit \vec{p} ; es handelt sich dann um einen Boost in $-\hat{p}$ -Richtung. Für diesen Boost gilt $\vec{n} = -\hat{p}$. Wir interessieren uns nun für:

$$S(\Omega) = \exp\left(\frac{1}{2}\omega\hat{p} \cdot \vec{\alpha}\right)$$

Berechnen wir also:

$$\hat{p} \cdot \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{p} \cdot \vec{\sigma} \\ \hat{p} \cdot \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\hat{p} \cdot \vec{\alpha})^2 = \begin{pmatrix} (\hat{p} \cdot \vec{\sigma})^2 & 0 \\ 0 & (\hat{p} \cdot \vec{\sigma})^2 \end{pmatrix} = \hat{p}^2 \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix} = \mathbf{1}$$

$$\cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) = \sqrt{\frac{1 + \cosh \omega}{2}} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}}$$

$$\begin{aligned} \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) &= \sqrt{\cosh^2\left(\frac{\omega}{2}\right) - 1} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2} - 1} = \sqrt{\frac{E - mc^2}{2mc^2}} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \cdot \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}} \cdot \frac{E + mc^2}{E + mc^2} = \\ &= \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \cdot \sqrt{\frac{E^2 - m^2c^4}{(E + mc^2)^2}} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \cdot \frac{|\vec{p}c|}{E + mc^2} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$S(\Omega) = \exp\left(\frac{1}{2}\omega\hat{p} \cdot \vec{\sigma}\right) = \cosh\left(\frac{1}{2}\omega\hat{p} \cdot \vec{\alpha}\right) + \sinh\left(\frac{1}{2}\omega\hat{p} \cdot \vec{\alpha}\right) = \mathbf{1} \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) + \hat{p} \cdot \vec{\alpha} \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} S(\Omega) &= \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \left(\mathbf{1} + \hat{p} \cdot \vec{\alpha} \frac{|\vec{p}c|}{E + mc^2}\right) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \left(\mathbf{1} + \frac{c\vec{p} \cdot \vec{\alpha}}{E + mc^2}\right) = \\ &= \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{cp_z}{E + mc^2} & \frac{c(p_x - ip_y)}{E + mc^2} \\ 0 & 1 & \frac{c(p_x + ip_y)}{E + mc^2} & -cp_z \\ \frac{cp_z}{E + mc^2} & \frac{c(p_x - ip_y)}{E + mc^2} & 1 & 0 \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E + mc^2} & \frac{-cp_z}{E + mc^2} & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Für w_γ , γ_3 , 4 ergibt sich:

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}p \cdot x\right) w_\gamma(\vec{p}) = S(\Omega) \exp\left(\mp \frac{i}{\hbar}Et\right) w_\gamma(0) \text{ mit } p^\mu = \left(\sqrt{m^2c^4 + (\vec{p}c)^2}, \vec{p}\right)$$

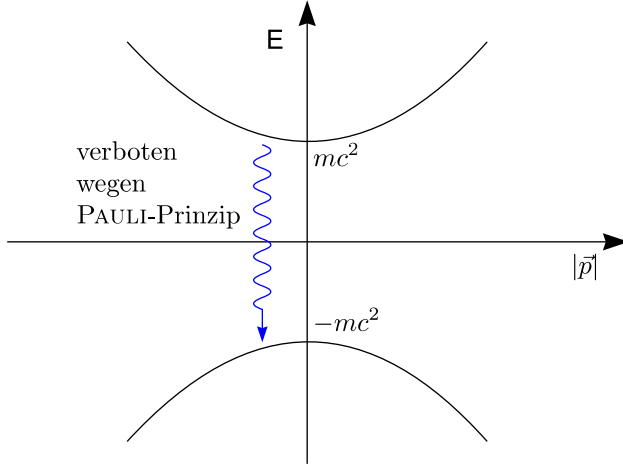
Vor dem Boost sind $w_1(0)$ und $w_3(0)$ Eigenzustände zu S_z mit Eigenwert $\frac{\hbar}{2}$. $w_2(0)$ und $w_4(0)$ sind Eigenzustände zu S_z mit Eigenwert $-\frac{\hbar}{2}$. Der Boost produziert eine Überlagerung von den Eigenzuständen von S_z **außer** für $\vec{p} \parallel \hat{z}$. Die Quantisierungsachse für den Spin parallel zu \vec{p} ist ausgezeichnet.

$$\begin{pmatrix} p_z \\ p_x + ip_y \end{pmatrix} \text{ und } \begin{pmatrix} p_x - ip_y \\ -p_z \end{pmatrix}$$

sind Eigenzustände zu $\vec{S} \cdot \hat{p}$. Die Projektion von \vec{S} auf \hat{p} bezeichnet man als **Helizität**.

4.11 Löcher-Theorie, Dirac-See

Schauen wir uns das Spektrum ebener-Wellen-Lösungen der DIRAC-Gleichung genauer an.



Im Grundzustand sind alle Zustände mit $E \leq -mc^2$ (einschließlich $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$) mit einem Fermion besetzt (gefüllter DIRAC-See). Absorption eines Photons mit $E > 2mc^2$ liefert ein Fermion mit $E > mc^2$ und ein Loch mit $E < -mc^2$ (Antiteilchen).

Im Grundzustand sind alle Zustände mit $E < 0$ besetzt. Das PAULI-Prinzip verbietet Übergänge. Das Bild ist analog für alle elementaren Fermionen, nämlich e^- , μ^- , τ^- , Neutrinos, u, d, s, c, t, b. Die Vorhersage ist, dass zu jedem Fermion ein Antifermion existiert.

4.11.1 Freie (Anti-)Fermionen

Die DIRACgleichung hat Lösungen positiver Energie $E = \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2} = p^0 c$

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) w_r(p) \text{ mit } r = 1, 2$$

und negativer Energie $E' = \sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2} = -p^0 c = -E$ (mit $p^0 > 0$):

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) w_r(p) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(-p)x\right)$$

Es ist $p^0 > 0$ sowohl für **Elektronen als auch Positronen**. p^μ ist der Viererimpuls des physikalischen (Anti-)Teilchens. Die DIRACgleichung im Impulsraum lautet:

$$(\not{p} - mc)w_r(p) = 0 \text{ für } r = 1, 2$$

$$(\not{p} + mc)w_r(p) = 0 \text{ für } r = 3, 4$$

4.11.2 u- und v-Spinoren

Wir wählen als Spin-Quantisierungsachse (räumliche Achse) $\vec{s}^\mu = (0, \vec{s})$ mit $\vec{s}^2 = 1$ und $\vec{p}^\mu = (mc, \vec{p})$ (Ruhe-system). Nun führen wir einen Boost ins bewegliche System durch:

$$p^\mu = \Omega^\mu{}_\nu \bar{p}^\nu \text{ und } s^\mu = \Omega^\mu{}_\nu \bar{s}^\nu \text{ mit } p^2 = m^2 c^2, p \cdot s = 0, s^2 = -1 = \bar{s}^2$$

a.) Teilchen-Lösung:

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) u(p, \pm s) \text{ mit Spin } \frac{\hbar}{2} \text{ in } \vec{s}\text{-Richtung}$$

b.) Antiteilchen-Lösung:

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) v(p, \pm s) \text{ mit Spin } -\frac{\hbar}{2} \text{ in } \vec{s}\text{-Richtung}$$

Es sei speziell $\vec{s} = \hat{z}$:

$$w_1(p) = u(p, +z), w_2(p) = u(p, -z), w_3(p) = v(p, -z), w_4(p) = v(p, +z)$$

z ist ein Vierervektor; im Ruhesystem gilt $\vec{z}^\mu = (0, \hat{z})$. Wir wollen nun u und v normieren.

$$\delta_{\varepsilon\varepsilon'} = \bar{w}(p, \varepsilon s)u(p, \varepsilon' s) = \bar{u}(\bar{p}, \varepsilon \bar{s})u(\bar{p}, \varepsilon' \bar{s}) = \bar{u}(\bar{p}, \varepsilon \bar{z})u(\bar{p}, \varepsilon' \bar{z}) = \bar{w}_\varepsilon(\bar{p})w_{\varepsilon'}(p) = \delta_{\varepsilon, \varepsilon'}$$

$$0 = \bar{u}(p, \varepsilon s)v(p, \varepsilon' s) = 0 = \bar{w}_{1/2}(\bar{p})w_{3/4}(\bar{p})$$

$$-\delta_{\varepsilon\varepsilon'} = \bar{v}(p, \varepsilon s)v(p, \varepsilon' s) = w_{3/4}^\dagger(\bar{p})\gamma^0 w_{3/4}(\bar{p}) = -\delta_{\varepsilon\varepsilon'}$$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, w_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

4.11.3 Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\psi^\dagger(x)\psi(x) = u^\dagger(p, \varepsilon s)u(p, \varepsilon s)$$

$$u^\dagger(p, \varepsilon s)\gamma^0\gamma^0 u(p, \varepsilon' s) = \bar{u}(p, \varepsilon s)\gamma^0 u(p, \varepsilon' s)$$

Im Ruhesystem gilt:

$$w_{r(\varepsilon)}^\dagger(\bar{p})\gamma^0\gamma^\mu w_{r(\varepsilon')}(\bar{p}) = \delta_{\varepsilon\varepsilon'}(1, \vec{\sigma}) = \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \frac{\vec{p}^\mu}{mc}$$

Hieraus ergibt sich weiter:

$$\bar{u}(p, \varepsilon s)\gamma^\mu u(p, \varepsilon' s) = \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \frac{p^\mu}{mc}$$

Speziell gilt:

$$u^\dagger(p, \varepsilon s)u(p, \varepsilon' s) = \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \frac{E}{mc^2} \bar{v}^\dagger(p, \varepsilon s)v(p, \varepsilon' s) = \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \frac{E}{mc^2}$$

$$(\gamma_0)^2 = 1, \gamma^0\gamma^i = \gamma^0(\gamma^0\alpha^i) = \alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \text{ f\"ur } i = 1, 2, 3$$

4.11.4 Ladungskonjugation

1.) DIRACgleichung f\"ur Positron:

$$(i\hbar\partial + e\mathcal{A} - mc)\psi_c(x) = 0$$

2.) DIRACgleichung f\"ur Elektron:

$$(i\hbar\partial - e\mathcal{A} - mc)\psi_c(x) = 0$$

Die Ladungskonjugation stellt einen Zusammenhang zwischen den beiden Gleichungen her. Wir schreiben die komplex konjugierte DIRACgleichung f\"ur das Elektron auf:

$$[(i\hbar\partial_\mu + eA_\mu)(\gamma^\mu)^* + mc]\psi^*(x) = 0 \quad (*)$$

Gesucht ist eine unit\"are Matrix $C\gamma^0$ mit $(C\gamma^0)(\gamma^\mu)^*(C\gamma^0)^{-1} = -\gamma^\mu$. Wir multiplizieren mit $-C\gamma^0$:

$$[(i\hbar\partial_\mu + eA_\mu)(-C\gamma^0)(\gamma^\mu)^*(C\gamma^0)^{-1} - mc]C\gamma^0\psi^*(x) = 0 \Leftrightarrow [(i\hbar\partial_\mu + eA_\mu)\gamma^\mu - mc]\psi_c(x) = 0$$

Die DIRACgleichung für das Elektron gibt die Lösung der DIRACgleichung für das Positron mit

$$\psi_c(x) = C\gamma^0\psi^*(x) \stackrel{\gamma^0=(\gamma^0)^\top}{=} C(\gamma^0)^\top(\psi^\dagger(x))^\top = C(\psi^\dagger(x)\gamma^0)^\top = C\bar{\psi}(x)^\top$$

$C\bar{\psi}(x)^\top$ ist nichts anderes als der ladungskonjugierte Spinor. Beachte: Wir haben bisher nicht gezeigt, dass es überhaupt eine solche Matrix $C\gamma^0$ gibt! $C = i\gamma^2\gamma^0$ funktioniert:

$$C\gamma^0 = i\gamma^2(\gamma^0)^2 = i\gamma^2 \Rightarrow (C\gamma^0)^2 = i^2(\gamma^2)^2 = \mathbf{1}_4 \Leftrightarrow C\gamma^0 = (C\gamma^0)^{-1}$$

$$\begin{aligned} C\gamma^0(\gamma^\mu)^*(C\gamma^0)^{-1} &= i\gamma^2(\gamma^\mu)^*i\gamma^2 = \begin{cases} -\gamma^2\gamma^\mu\gamma^2 & \text{für } \mu = 0, 1, 3 \\ \gamma^2\gamma^2\gamma^2 & \text{für } \mu = 2 \text{ da nur } \sigma^2 \text{ rein imaginär} \end{cases} = \\ &= \begin{cases} (\gamma^2)^2\gamma^\mu = -\gamma^\mu & \text{für } \mu = 0, 1, 3 \\ -\gamma^2 & \text{für } \mu = 2 \end{cases} = \gamma^\mu \end{aligned}$$

Speziell für die freie DIRACgleichung gilt: Die Lösung der DIRACgleichung für Elektronen $u(p, \pm s)$ und die Lösung für Positronen $v(p, \pm s)$ gehen durch Ladungskonjugation C ineinander über.

$$C\bar{u}(p, \pm s)^\top = v(p, \pm s) \cdot \text{Phase}$$

$$C\bar{v}(p, \pm s)^\top = u(p, \pm s) \cdot \text{Phase}$$

4.12 Drehimpuls und Diracgleichung

Der Spin ist gegeben durch:

$$\sigma_{ij} = \Sigma_k \equiv \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \text{ mit zyklischen } i, j, k$$

Wir können σ_{ij} auch schreiben als:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = \gamma_5\alpha_k$$

Um zu erkennen, dass die erste Matrix auch wirklich γ_5 ist, führen wir folgende Nebenrechnung durch:

$$\begin{aligned} \gamma_5 &= i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = i\beta\beta\alpha_1\beta\alpha_2\beta\alpha_3 = i\mathbf{1}(-\alpha_1\alpha_2\beta^2)\alpha_3 = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3 = \\ &= -i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \sigma_1\sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_1\sigma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\sigma_3 & 0 \\ 0 & i\sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Es gelten folgende Vertauschungsrelationen:

$$[\gamma_5, \Sigma] = 0, \{\gamma_5, \beta\} = 0 \text{ und } [\beta, \Sigma] = 0 \text{ wegen } \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$$

Wir betrachten die HEISENBERGgleichung mit $H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$. Da H keinen Ortsoperator enthält, gilt:

$$\frac{dp_j}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, p_j] = 0$$

Der Impuls eines freien Teilchens ist bekanntlich erhalten.

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, x_i] = c\alpha_i$$

Für die Zeitableitung des Drehimpulses gilt:

$$\frac{dL_k}{dt} = \varepsilon_{ijk}(\dot{x}_i p_j + x_i \dot{p}_j) = c\varepsilon_{ijk}\alpha_i p_j = c(\vec{\alpha} \times \vec{p})_k \neq 0$$

Wir betrachten außerdem folgende Beitrag:

$$\begin{aligned} \frac{d\Sigma_k}{dt} &= \frac{i}{\hbar} [c\alpha_j p_j + \beta mc^2, \Sigma_k] = \frac{i}{\hbar} [c\gamma_5 \Sigma_j p_j, \Sigma_k] = \frac{ic}{\hbar} \gamma_5 [\Sigma_j, \Sigma_k] p_j = \\ &= \frac{ic}{\hbar} \gamma_5 (2i\varepsilon_{jki} \Sigma_i) p_j = \frac{ic}{\hbar} \gamma_5 (2i\varepsilon_{ijk} \Sigma_i) p_j = -\frac{2c}{\hbar} \gamma_5 (\vec{\sigma} \times \vec{p})_k = \frac{2}{\hbar} (-c\vec{\alpha} \times \vec{p})_k \end{aligned}$$

Der Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$ ist damit erhalten: $\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{0}$. Ein allgemeines $\frac{\hbar}{2} \Sigma_k = S_k$ ist **nicht** erhalten. (Der Spin kann beispielsweise präzedieren). Außerdem ist die **Helizität** h , also der Spin entlang der \vec{p} -Richtung erhalten:

$$h = \frac{\hbar \vec{\Sigma} \cdot \vec{p}}{2 |\vec{p}|}, \quad \frac{d}{dt} (\vec{\Sigma} \cdot \vec{p}) = -\frac{2c}{\hbar} (\vec{\alpha} \times \vec{p}) \cdot \vec{p} = 0$$

Man arbeitet für relativistische Fermionen in der Helizitätsbasis, um den Spin zu beschreiben, da die Helizität für ein freies DIRACteilchen erhalten ist. Wie sieht das ganze für ein Teilchen im äußerem elektromagnetischen Feld $e\phi = V, \vec{A}$ aus?

1.) $V = V(r)$ ist rotationssymmetrisch, $\vec{A} = 0$

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + V(r) = H_0 + V$$

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = [H_0 + V, \vec{J}] = [V, \vec{J}] = \left[V(r)\mathbf{1}, \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \right] = 0$$

Auch hier ist der Gesamtdrehimpuls erhalten. H, \vec{J}^2 und J_z besitzen damit für rotationssymmetrische V simultane Eigenzustände.

2.) Helizitätserhaltung in beliebigem \vec{B} -Feld

Wir benutzen den kinetischen Impuls $\vec{\pi} = \vec{p} - e\vec{A}$. Wir hatten früher auf einen Übungsblatt berechnet:

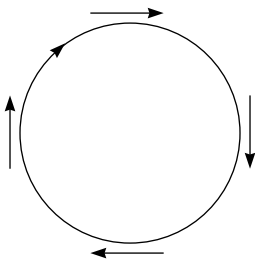
$$\frac{d\vec{p}}{dt} = e (\vec{E} + c\vec{\alpha} \times \vec{B})$$

Die Helizität ist proportional zu $\vec{\Sigma} \cdot \vec{\pi}$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\vec{\Sigma} \cdot \vec{\pi}) &= \frac{i}{\hbar} [c\vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} + \beta mc^2 + e\phi, \vec{\Sigma} \cdot \vec{\pi}] = \frac{i}{\hbar} [c\gamma_5 \vec{\Sigma} \cdot \vec{\pi} + e\phi, \vec{\Sigma} \cdot \vec{\pi}] = \\ &= \frac{ie}{\hbar} \left[\phi, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_k \right] \Sigma_k = \frac{ie}{\hbar} \cdot \left(-\frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla}_k \phi) \right) \Sigma_k = e(-\vec{\nabla}_k \phi) \Sigma_k = eE_k \Sigma_k = e\vec{E} \cdot \vec{\Sigma} \end{aligned}$$

Das heißt, für $\vec{E} = 0$ ist die Helizität erhalten, egal wie auch immer das \vec{B} -Feld aussieht.

4.12.1 Beispiel: Konstantes \vec{B} -Feld



Für die Kreisbahn ist die Umlaufdauer gegeben durch die Zyklotronfrequenz:

$$\omega_L = \frac{eB}{m} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Für $g = 2$ vollführt der Spin seine Präzession mit $\omega_s = \omega_L$. Für $g \neq 2$ gilt jedoch:

$$\frac{\omega_s}{\omega_L} = 1 + \frac{g-2}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Dies wurde am BNL zur Messung von $g - 2$ von μ^\pm benutzt.

4.13 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Die elektromagnetische Strahlung besteht aus Photonen mit

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \text{und} \quad |\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\vec{k}| = \hbar\frac{2\pi}{\lambda}$$

Betrachten wir das Spektrum für Photonen der Frequenz ω :

☞ ein Photon: $\hbar\omega$

☞ zwei Photonen: $2\hbar\omega$

☞ drei Photonen: $3\hbar\omega$

Photonen können wir in erster Approximation durch Konfigurationen von harmonischen Oszillatoren beschreiben! Die Gesamtenergie für ein elektromagnetisches Feld ist gegeben durch:

$$E = \int d^3\vec{x} \left(\frac{\epsilon_0}{2} \vec{E}^2(\vec{x}) + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2(\vec{x}) \right) = \frac{\epsilon_0}{2} \int dV \left(\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2 \right)$$

Wir wissen, dass wir elektromagnetische Felder durch ein skalares Potential und ein Vektorpotential beschreiben können:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

In dieser Darstellung sind die beiden homogenen MAXWELLgleichungen erfüllt:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad \text{und} \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

Die Potentiale werden bestimmt über die inhomogenen MAXWELLgleichungen:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = -\vec{\nabla}^2 \phi - \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) \phi - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right) = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Die zweite inhomogene MAXWELLgleichung können wir schreiben als:

$$\square \vec{A} + \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \mu_0 \vec{j} \Leftrightarrow \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Es besteht die Eichfreiheit der Potentiale:

$$\phi \mapsto \phi' = \phi + \frac{\partial f}{\partial t} \quad \text{und} \quad \vec{A} \mapsto \vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla} f$$

In der LORENTZ Eichung gilt $\partial_\mu A^\mu = 0$. Im folgenden werden wir die COULOMB Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ verwenden. Leider ist diese Eichung nicht LORENTZinvariant; diese Eichung gilt nur in einem bestimmten Koordinatensystem. Sie ist jedoch für unsere Zwecke hier besser geeignet.

4.13.1 Freies Strahlungsfeld

Es sei $\varrho = 0$ und $\vec{j} = \vec{0}$. Dann gilt in der COULOMBbeichung $-\vec{\nabla}^2\phi = 0$. Zur Beschreibung von physikalischen Situationen benötigen wir ein Potential, das im Unendlichen verschwindet: $\phi(\vec{x}) \xrightarrow{|\vec{x}| \rightarrow \infty} 0$, damit setzen wir $\phi \equiv 0$. Was von allen MAXWELLgleichungen übrigbleibt ist nur $\square \vec{A} = 0$. Dies ist genau die KLEIN-GORDON-Gleichung für $m = 0$, womit die Beschreibung besonders geeignet für Photonen ist. $\square \vec{A} = 0$ wird gelöst durch ebene Wellen $\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}_0 \exp(i[\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t])$. Setzen wir diese Lösung ein, so folgt:

$$-\frac{\omega^2}{c^2} - (-k^2) = 0 \Rightarrow \boxed{\omega = c|\vec{k}|}$$

Dies ist die übliche Relation für Photonen. Aus der COULOMBbeichbedingung erhalten wir eine Aussage über \vec{A}_0

$$i\vec{k} \cdot \vec{A} = 0 \Leftrightarrow \vec{A}_0 \cdot \vec{k} = 0 \text{ das heißt } \vec{A}_0 \perp \vec{k}$$

$A(\vec{x}, t)$ ist damit ein transversales Feld wie auch \vec{E} und \vec{B} . Die mathematische Vereinfachung ist ein Kasten der Kantenlänge L , also eine Reduktion auf ein endliches Volumen mit periodischen Randbedingungen:

$$\vec{A}\left(x_1, x_2, x_3 = -\frac{L}{2}, t\right) = \vec{A}\left(x_1, x_2, x_3 = +\frac{L}{2}\right) \text{ oder } \vec{A}(\vec{x} + L\hat{e}_i, t) = \vec{A}(\vec{x}, t)$$

Die erlaubten Wellenvektoren \vec{k} werden damit diskretisiert. Die allgemeinste Lösung kann ausgedrückt werden durch das orthonormierte System der ebenen Wellen. Dies ist eine Funktionenbasis für transversale Vektorfelder:

$$\vec{f}_{r,\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})$$

Der Index r beschreibt die beiden transversalen Koordinatenrichtungen. ε ist ein transversaler Einheitsvektor. Die \vec{k} sind – wie schon erwähnt – diskret:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3) \text{ mit } n_i \in \mathbb{Z}, V = L^3$$

Die Vektoren $\vec{\varepsilon}_1(\vec{k})$, $\vec{\varepsilon}_2(\vec{k})$ und $\hat{k} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$ bilden ein orthonormiertes Rechtssystem für den dreidimensionalen Raum \mathbb{R}^3 . Dies bedeutet $\vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \cdot \vec{\varepsilon}_s(\vec{k}) = \delta_{rs}$ und $\vec{\varepsilon}_r \cdot \hat{k} = 0$. Die allgemeinste Lösung der Wellengleichung für \vec{A} ist eine Überlagerung ebener Wellen in Form einer FOURIERtransformation:

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{x}, t) &= \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1,2} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V \omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \left[a_r(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] + a_r^*(\vec{k}) \exp[-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] \right] = \\ &= \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1,2} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \left[a_r(\vec{k}) \exp(-i\omega_k t) \vec{f}_{r,\vec{k}}(\vec{x}) + a_r^*(\vec{k}) \exp(i\omega_k t) \vec{f}_{r,\vec{k}}^*(\vec{x}) \right] \end{aligned}$$

Damit \vec{A} ein reelles Feld ist, muss der komplex konjugierte Ausdruck hinzuaddiert werden. Machen wir außerdem eine Dimensionsbetrachtung, um den Vorfaktor zu motivieren:

$$[\vec{A}] = [\vec{E}, t] = \frac{\text{N}}{\text{C}} \cdot \text{s}$$

$$\left[\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V \omega_k} \right] = \frac{\text{Js}}{\frac{\text{C}^2}{\text{N} \cdot \text{m}^2} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}} = \frac{\text{N} \cdot \text{Nm} \cdot \text{s}^2}{\text{C}^2 \cdot \text{m}} = \left(\frac{\text{N} \cdot \text{s}}{\text{C}} \right)^2$$

$a_r(\vec{k})$ ist damit dimensionslos. Wir betrachten die Orthogonalitätsbeziehung für die Basisfunktionen $\vec{f}_{r,\vec{k}}$:

$$\int_{V=L^3} d^3\vec{x} \vec{f}_{r,\vec{k}}(\vec{x}) \cdot \vec{f}_{r',\vec{k}'}^*(\vec{x}) = \int_V d^3\vec{x} \frac{1}{V} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \cdot \vec{\varepsilon}_{r'}(\vec{k}') \exp[i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{rr'}$$

Es ist völlig egal, ob wir über \vec{k} von $-\infty$ bis $+\infty$ oder über $-\vec{k}$ summieren.

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k}} \sum_{r=1,2} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \left[a_r(\vec{k}) \exp(-i\omega_k t) \vec{f}_{r,\vec{k}}(\vec{x}) + a_r^*(-\vec{k}) \exp(i\omega_k t) \vec{f}_{r,-\vec{k}}^*(\vec{x}) \right]$$

$$f_{r,\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})$$

$$f_{r,-\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{\varepsilon}_r(-\vec{k}) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) = \delta_r \vec{f}_{r,\vec{k}}^*(\vec{x}) \text{ mit } \delta_r = \pm 1, \delta_1 \delta_2 = -1$$

Da $-\vec{k}$ in entgegengesetzte Richtung wie \vec{k} zeigt, muss auch einer der Basisvektoren $\varepsilon_r(\vec{k})$ in die andere Richtung zeigen aufgrund von $\vec{\varepsilon}_1 \times \vec{\varepsilon}_2 = \hat{k}$.

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k},r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \left[a_r(\vec{k}, t) + \delta_r a_r^*(-\vec{k}, t) \right] \vec{f}_{r,\vec{k}}(\vec{x})$$

Man muss hier also berücksichtigen, dass man beim zweiten Term für einen der $\vec{\varepsilon}_r$ ein anderes Vorzeichen benötigt. Gesucht ist:

$$H_{rad} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3x (\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2) \text{ mit } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k},r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \left[i\omega_k \left(a_r(\vec{k}, t) - \delta_r a_r^*(-\vec{k}, t) \right) \vec{f}_{r,\vec{k}}(\vec{x}) \right] = \sum_{\vec{k},r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \left[i\omega_k \left(\delta_r a_r(-\vec{k}, t) - a_r^*(\vec{k}, t) \right) \right] f_{r,\vec{k}}^*(\vec{x})$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k},r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \left[a_r(\vec{k}, t) + \delta_r a_r^*(-\vec{k}, t) \right] i\vec{k} \times \vec{f}_{r,\vec{k}}(\vec{x}) = \sum_{\vec{k},r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\delta_r a_r(-\vec{k}, t) + a_r^*(\vec{k}, t) \right] (-i\vec{k} \times \vec{f}_{r,\vec{k}}^*(\vec{x}))$$

Wir benötigen

$$\int_V d^3 \left(\vec{k} \times f_{r,\vec{k}}(\vec{x}) \right) \cdot \left(\vec{k}' \times \vec{f}_{r',\vec{k}'}^*(\vec{x}) \right) = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \left(\vec{k} \times \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \right) \cdot \left(\vec{k} \times \vec{\varepsilon}_{r'}(\vec{k}) \right) = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \left[\vec{k}^2 \vec{\varepsilon}_r \cdot \vec{\varepsilon}_{r'} - \vec{k} \vec{\varepsilon}_{r'} \cdot \vec{k} \vec{\varepsilon}_r \right] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{rr'} |\vec{k}|^2$$

und erhalten also:

$$\begin{aligned} H_{rad} &= \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\vec{x} \left(\vec{E} \cdot \vec{E}^* + c^2 \vec{B} \cdot \vec{B}^* \right) = \\ &= \frac{\varepsilon_0}{2} \sum_{\vec{k},r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_k} \right) \left[(i\omega_k)^2 \left(a_r(\vec{k}, t) - \delta_r a_r^*(-\vec{k}, t) \right) \left(\delta_r a_r(-\vec{k}, t) - a_r^*(\vec{k}, t) \right) + c^2 |\vec{k}|^2 \left(a_r(\vec{k}, t) + \delta_r a_r^*(-\vec{k}, t) \right) \left(\delta_r a_r(-\vec{k}, t) + a_r^*(\vec{k}, t) \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},r} \frac{\hbar\omega_k^2}{2\omega_k} \left[2a_r(\vec{k}, t) a_r^*(\vec{k}, t) + 2a_r^*(-\vec{k}, t) a_r(-\vec{k}, t) \right] = \\ &= \sum_{\vec{k},r} \frac{\hbar\omega_k}{2} \left(a_r(\vec{k}, t) a_r^*(\vec{k}, t) + a_r^*(\vec{k}, t) a_r(\vec{k}, t) \right) \stackrel{\text{klassisch}}{=} \\ &= \sum_{\vec{k},r} \hbar\omega_k a_r^*(\vec{k}, t) a_r(\vec{k}, t) \end{aligned}$$

Dabei handelt es sich für jede einzelne Mode um einen harmonischen Oszillator! Wir vergleichen:

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger) \text{ mit } [a, a^\dagger] = 1$$

H_{rad} stellt damit eine Summe harmonischer Oszillatoren dar. Die FOURIERkoeffizienten $a_r(\vec{k}, t)$ und $a_r^\dagger(\vec{k}, t)$ entsprechen a und a^\dagger des einfachen harmonischen Oszillators. Damit ist die Quantisierungsbedingung folgende:

$$\left[a_r(\vec{k}), a_{r'}^\dagger(\vec{k}') \right] = \delta_{rr'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$

$$\left[a_r(\vec{k}), a_{r'}(\vec{k}') \right] = 0 = \left[a_r^\dagger(\vec{k}), a_{r'}^\dagger(\vec{k}') \right]$$

Die HAMILTONfunktion des quantisierten Strahlungsfeldes hat die gleiche Funktion wie die von harmonischen Oszillatoren. Die einzelnen Moden, die durch r und \vec{k} gegeben sind, lassen sich durch unabhängige harmonische Oszillatoren beschreiben.

$$H = \sum_{\vec{k}, r} \hbar \omega_k a_r^\dagger(\vec{k}, t) a_r(\vec{k}, t)$$

Der zusätzliche Summand $+\frac{1}{2}$ taucht hier nicht auf; wir haben nämlich die Nullpunktenergie von jeder Mode subtrahiert. Wir messen die Energien also in Bezug auf den Grundzustand des harmonischen Oszillators. Sonst würde nämlich in H ein zusätzlicher unendlicher Summand auftauchen. Die Nullpunktenergie ist:

$$E_0 = \sum_{\vec{k}, r} \frac{\hbar \omega_k}{2} \sim \int d^3 \vec{k} \hbar c |\vec{k}|$$

Physikalisch macht $\hbar \omega_k > M_{\text{PLANCK}} c^2$ keinen Sinn. Die auftauchenden Unendlichkeiten darf man deshalb nicht allzu ernst nehmen. H_{rad} ist eine Approximation für $\hbar \omega_k \simeq m_z c^2$.

$$\sum_{\vec{k}, r} \frac{\hbar \omega_k}{2} \Bigg|_{\hbar \omega_k < M_{\text{PLANCK}} c^2} = \text{endlicher Ausdruck}$$

$M_{\text{PLANCK}} c^2 \approx 10^{19}$ GeV gibt eine Schranke an für die Kontinuumsbeschreibung der Raum-Zeit. $\Delta t < \frac{M_{\text{PLANCK}} c^2}{\hbar}$ verlangen Quantengravitation und mehr.

4.14 Hilbert-Raum für Strahlungsfeld

Wir gehen nun aus von:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k}, r} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V \omega_k}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \left[a_r(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)] + a_r^\dagger(\vec{k}) \exp[-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)] \right]$$

$$H_{rad} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int_{V=L^3} d^3 \vec{x} \left(\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2 \right) = \sum_{\vec{k}, r} \hbar \omega_k \left(a_r^\dagger(\vec{k}) a_r(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right)$$

Dies ist eine Summe von harmonischen Oszillatoren:

$$H = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \text{ mit } [a, a^\dagger] = 1$$

Die Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators erhält man durch Anwendung des Aufsteigeoperators aus dem Grundzustand:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \text{ mit } a|0\rangle = 0$$

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle \text{ mit } E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Der HILBERT-Raum ist also ein direktes Produkt der HILBERT-Räume der einzelnen Moden: $\mathcal{H}_{rad} = \bigotimes_{k,r} \mathcal{H}_{\vec{k},r}$.

$$\mathcal{H}_{\vec{k},r} = \text{HILBERT-Raum des harmonischen Oszillators} = \text{Span} \left\{ \frac{(a_r^\dagger(\vec{k}))^n}{n!} |0\rangle \mid n = 0, 1, 2, \dots \right\}$$

$\mathcal{H}_{\vec{k},r}$ wird also aufgespannt von den normierte Basisvektoren. Ein allgemeiner Zustand in \mathcal{H}_{rad} ist eine Linearkombination von:

$$|\dots n_r(\vec{k}) \dots\rangle = \prod_{\vec{k}_i, r_i} |n_{r_i}(\vec{k}_i)\rangle \text{ mit } |n_{r_i}(\vec{k}_i)\rangle = \frac{(a_{r_i}^\dagger(\vec{k}_i))^{n_{r_i}(\vec{k}_i)}}{\sqrt{n_{r_i}(\vec{k}_i)!}} |0\rangle$$

Wir haben also ein Produkt von unendlich dimensionalen Vektorräumen; dieses stellt einen Basisvektor dar. Mit einer Linearkombination solche Basiszustände lässt sich das Photonfeld zu beschreiben. In der Realität (Atomphysik, Teilchenphysik) liegen nur Zustände mit kleinen Besetzungszahlen vor, womit das ganze einfacher wird. Den Grundzustand des Gesamtsystems bezeichnen wir mit $|0\rangle$ (Vakuuzustand); es handelt sich dabei um den Grundzustand aller Moden.

$$a_r(\vec{k})|0\rangle = 0 \forall r, \vec{k} \text{ hat die Energie } E_0 = \sum_{\vec{k},r} \frac{\hbar\omega_k}{2}$$

Redefinition: Es sei $H_{rad} = H_{rad} - E_0$, neu ist also:

$$H_{rad} = \sum_{\vec{k},r} \hbar\omega_k a_r^\dagger(\vec{k}) a_r(\vec{k}) \text{ mit } H_{rad}|0\rangle \equiv 0$$

☞ Ein Photon:

Die Zustände $a_r^\dagger(\vec{k})|0\rangle$ bilden eine Basis:

$$|1\gamma\rangle = \sum_{r,\vec{k}} g(r,\vec{k}) a_r^\dagger(\vec{k}) |0\rangle$$

Man kann den Zustand also als Linearkombination von Ebenen-Wellen-Zuständen (Ein-Teilchen-Zuständen) beschreiben. Unser Zustand ist nach wie vor ein Ein-Teilchen-Zustand, wobei $a_r^\dagger(\vec{k})|0\rangle$ eine ebene Welle ist. (FOURIER-Zerlegung nach ebenen Wellen).

$$\psi(x) = \int d^3\vec{k} g(\vec{k}) |\vec{k}\rangle$$

Es ist außerdem $H_{rad}|r,\vec{k}\rangle = \hbar\omega_k |r,\vec{k}\rangle$.

☞ Zwei Photonen:

$$|(r_1, \vec{k}_1)(r_2, \vec{k}_2)\rangle = a_{r_1}^\dagger(\vec{k}_1) a_{r_2}^\dagger(\vec{k}_2) |0\rangle$$

Wendet man H_{rad} auf diesen Zustand an, so folgt:

$$H_{rad} |(r_1, \vec{k}_1)(r_2, \vec{k}_2)\rangle = \hbar(\omega_{k_1} + \omega_{k_2}) |(r_1, \vec{k}_1)(r_2, \vec{k}_2)\rangle$$

Da die Aufsteigeoperatoren verschiedener Photonen miteinander kommutieren, können wir diese vertauschen. Der Zustand ist damit symmetrisch bezüglich der beiden Photonen:

$$|(r_2, \vec{k}_2)(r_1, \vec{k}_1)\rangle = a_{r_2}^\dagger(\vec{k}_2) a_{r_1}^\dagger(\vec{k}_1) |0\rangle$$

Kommen wir nun zur „Wellenfunktion“. Der allgemeinste Zwei-Photonenzustand wird beschrieben durch:

$$|\gamma_1, \gamma_2\rangle = \sum_{\vec{k}_1, r_1} \sum_{\vec{k}_2, r_2} g(r_1, \vec{k}_1; r_2, \vec{k}_2) |(r_1, \vec{k}_1)(r_2, \vec{k}_2)\rangle$$

Da der Zustand symmetrisch bezüglich der Vertauschung zweier Photonen ist, können wir auch schreiben:

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}'_2, r'_2} \sum_{\vec{k}'_1, r'_1} g(r'_2, \vec{k}'_2; r'_1, \vec{k}'_1) |(r'_2, \vec{k}'_2)(r'_1, \vec{k}'_1)\rangle = \sum_{\vec{k}'_2, r'_2} \sum_{\vec{k}'_1, r'_1} g(r'_2, \vec{k}'_2; r'_1, \vec{k}'_1) |(r'_1, \vec{k}'_1)(r'_2, \vec{k}'_2)\rangle = \\ & = \sum_{\vec{k}_1, r_1} \sum_{\vec{k}_2, r_2} \frac{1}{2} (g(r_1, \vec{k}_1; r_2, \vec{k}_2) + g(r_2, \vec{k}_2; r_1, \vec{k}_1)) |(r_1, \vec{k}_1)(r_2, \vec{k}_2)\rangle \end{aligned}$$

Man kann die Wellenfunktion g o.B.d.A symmetrisch unter der Vertauschung von γ_1 und γ_2 ansehen. Man spricht auch von der BOSE-Symmetrie.

4.14.1 Teilchenzahloperator

Zum HAMILTON-Operator

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

ist $N = a^\dagger a$ der Teilchenzahloperator; es gilt also $N|n\rangle = n|n\rangle$.

$$\mathcal{N} = \sum_{\vec{k}, r} a_r^\dagger(\vec{k}) a_r(\vec{k})$$

Wenden wir \mathcal{N} auf verschiedene Zustände an:

☞ Vakuumzustand: $\mathcal{N}|0\rangle = 0$

☞ Ein-Photon-Zustand:

$$\mathcal{N} a_r^\dagger(\vec{k}) |0\rangle = \sum_{\vec{k}', r'} a_r^\dagger(\vec{k}') a_{r'}(\vec{k}') a_r^\dagger(\vec{k}) |0\rangle = \sum_{\vec{k}', r'} a_r^\dagger(\vec{k}') [a_r^\dagger(\vec{k}'), a_r^\dagger(\vec{k})] |0\rangle$$

Mit $[a_r^\dagger(\vec{k}'), a_r^\dagger(\vec{k})] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{r, r'}$ ergibt sich $a_r^\dagger(\vec{k}) |0\rangle$.

$$\mathcal{N} \sum_{\vec{k}, r} g(\vec{k}, r) a_r^\dagger(\vec{k}) |0\rangle = \sum_{\vec{k}, r} g(\vec{k}, r) a_r^\dagger(\vec{k}) |0\rangle$$

Eine Linearkombination von $a_r^\dagger(\vec{k}) |0\rangle$ beschreibt ein Photon.

4.14.2 Operator \Leftrightarrow Parameter

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{k}, r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V m_k} \right)^{\frac{1}{2}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \left[a_r(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] + a_r^\dagger(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] \right]$$

$a_r(\vec{k})$ und $a_r^\dagger(\vec{k})$ sind Operatoren und \vec{x} , t Parameter, die das operatorwertige Feld \vec{A} beschreiben. Dieses Hilfsmittel benötigt man, um relativistisch invariante Beschreibungen zu erhalten. Ort und Zeit werden somit gleichwertig behandelt (analog zum MINKOWSKI-Raum).

4.15 Grenzübergang zum unendlichen Volumen

Es ist $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3)$. Das Volumen für $1\vec{k}$ -Mode ist:

$$\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V} = \Delta k^3 \mapsto d^3 \vec{k}$$

Beim Übergang ins Kontinuum muss das KRONECKER-Delta $\delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$ übergehen in eine δ -Funktion:

$$c\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}')$$

c ist dabei eine Konstante, die wir bestimmen müssen:

$$\int d^3\vec{k} \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}') = 1 \Leftrightarrow \sum_{\vec{k}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \cdot c \cdot \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} = c \cdot \frac{(2\pi)^3}{V} \Rightarrow c = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

Damit ergibt sich:

$$\left[\sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} a_r(\vec{k}), \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} a_{r'}^\dagger(\vec{k}') \right] = \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{r, r'}$$

Dies wird benötigt für den Limes $L \mapsto \infty$:

$$b_r(\vec{k}) = \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} a_r(\vec{k}) \quad \text{und} \quad b_r^\dagger(\vec{k}) = \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} a_r^\dagger(\vec{k})$$

Für $L \mapsto \infty$ haben wir dann folgende Kommutatorrelationen:

$$[b_r(\vec{k}), b_{r'}^\dagger(\vec{k}')] = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{r, r'}$$

$$[b_r(\vec{k}), b_{r'}(\vec{k}')] = 0 = [b_r^\dagger(\vec{k}), b_{r'}^\dagger(\vec{k}')]$$

Für unseren Feldoperator \vec{A} gilt nun:

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{x}, t) &= \sum_{\vec{k}, r} \left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V m_k} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{V}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \left[\sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} a_r(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] + \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} a_r^\dagger(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] \right] = \\ &= \sum_{r=1}^2 \int d^3\vec{k} \sqrt{\frac{\hbar}{\varepsilon_0}} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_k}} \left[b_r(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] + b_r^\dagger(\vec{k}) \exp[-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)] \right] \end{aligned}$$

4.15.1 Wechselwirkung von Strahlung mit Materie

Wir betrachten Materie bestehend aus Punktteilchen der Masse m_i und Ladung q_i .

$$H_m = \sum_i \frac{1}{2} m_i \left(\frac{d\vec{r}_i}{dt} \right)^2 + H_C \quad \text{mit} \quad H_C = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j \\ i \neq j}} \frac{q_i q_j}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Kommen nun noch die elektromagnetischen Felder \vec{E} , \vec{B} mit $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} \neq 0$ hinzu, so gilt in COULOMB-Eichung (wegen $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$):

$$\vec{\nabla} \left(-\vec{\nabla} \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = -\vec{\nabla}^2 \phi = \vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{x}, t) = \frac{\varrho(\vec{x}, t)}{\varepsilon_0} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_i q_i \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{r}_i(t))$$

Zerlege \vec{E} nun in einen transversalen und longitudinalen Anteil:

$$\vec{E} = \vec{E}_T + \vec{E}_L = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi \Rightarrow \vec{E}_T = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{E}_L = -\vec{\nabla} \phi$$

Für den transversalen Anteil gilt $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_T = 0$ und für den longitudinalen $\vec{\nabla} \times \vec{E}_L = 0$.

$$H_{em} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\vec{x} \left(\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2 \right) = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\vec{x} \left(\vec{E}_T^2 + c^2 \vec{B}^2 + 2\vec{E}_T \cdot \vec{E}_L + \vec{E}_L^2 \right)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi = \vec{E}_T + \vec{E}_L$$

Unter Ausnutzung des GAUSSSchen Satzes und der COULOMB-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ergibt sich:

$$\int_V d^3\vec{x} \vec{E}_T \cdot \vec{E}_L = \int_V d^3\vec{x} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \cdot \vec{\nabla} \phi = \int_V d^3\vec{x} \left(\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \phi \right) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right) = \int_{\partial V} d^2\vec{S} \phi(\vec{x}) \frac{\partial \vec{A}(\vec{x})}{\partial t} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

Dies gilt, da $\phi(\vec{x}) \sim \frac{1}{r^2}$ und $\frac{\partial \vec{A}(\vec{x})}{\partial t} \sim \frac{1}{r}$.

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\vec{x} \vec{E}_L^2 = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\vec{x} \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} \phi = -\frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\vec{x} \phi(\vec{x}) \vec{\nabla}^2 \phi(\vec{x}) = \frac{1}{2} \int d^3\vec{x} \phi(\vec{x}) \rho(\vec{x}) = \frac{1}{2} \int d^3\vec{x} d^3\vec{x}' \frac{\rho(\vec{x}, t) \rho(\vec{x}', t)}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{x} - \vec{x}'|}$$

Speziell gilt

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_i e_i \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{r}_i(t))$$

womit sich ergibt:

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\vec{x} \vec{E}_L^2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{e_i e_j}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(t)|} = H_C$$

Der gesamte HAMILTON-Operator lautet damit:

$$H = \sum_i \frac{1}{2} m_i \left(\frac{d\vec{r}_i}{dt} \right)^2 + H_C + H_{rad} \quad \text{mit} \quad H_{rad} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int_V d^3\vec{x} \left[\left(\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right)^2 + c^2 (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right] = \sum_{r, \vec{k}} \hbar \omega_k a_r^\dagger(\vec{k}) a_r(\vec{k})$$

Der kanonische Impuls für das Teilchen i ist $\vec{p}_i = m_i \frac{d\vec{r}_i}{dt} + e_i \vec{A}(\vec{r}_i(t))$:

$$H = \sum_i \frac{(\vec{p}_i - e_i \vec{A}(\vec{r}_i(t)))^2}{2m_i} + H_C + H_{rad}$$

Weiterhin ergibt sich:

$$(\vec{p}_i - e_i \vec{A}_i)^2 = \vec{p}_i^2 - e_i (\vec{p}_i \cdot \vec{A}_i + \vec{A}_i \cdot \vec{p}_i) + e_i^2 \vec{A}_i^2 = \vec{p}_i^2 - e_i \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \cdot \vec{A}(\vec{r}_i) + \vec{A}(\vec{r}_i) \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{r_i} \right) + e_i^2 \vec{A}_i^2$$

Der erste Term in der Klammer verschwindet aufgrund der COULOMB-Eichung:

$$H = \underbrace{\left(\sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + H_C \right)}_{H_m} + \underbrace{H_{rad} - \sum_i \frac{e_i \vec{A}(\vec{r}_i(t)) \cdot \vec{p}_i}{m_i} + \sum_i \frac{e_i^2}{2m_i} (\vec{A}(\vec{r}_i(t)))^2}_{H_I}$$

Wir erkennen daran also:

$$\vec{A} \sim z a(\vec{k}) + z^* a^\dagger(\vec{k})$$

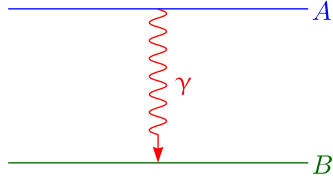
$a(\vec{k})$ vernichtet und $a^\dagger(\vec{k})$ erzeugt ein Photon. Der $\vec{A} \cdot \vec{p}$ -Term beschreibt die Emission bzw. Absorption eines Photons. Der \vec{A}^2 -Term beschreibt schließlich Streuprozesse und Multiphoton-Emission/-Absorption zusammen mit höheren Ordnungen von $\vec{A} \cdot \vec{p}$ in der Störungstheorie.

4.16 Störungstheorie

Wir gehen aus vom HAMILTON-Operator $H = H_0 + H_I$ mit $H_0 = H_m + H_{rad}$. Unser HILBERT-Raum ist ein direktes Produkt des Raumes, der die Materie beschreibt und des Raumes, der die Photonen beschreibt. Betrachten wir also einen Energie-Eigenzustand von H_0 :

$$|E\rangle = |A; \dots n_r(\vec{k}) \dots\rangle = |A\rangle | \dots n_r(\vec{k}) \dots\rangle$$

$|A\rangle$ kann beispielsweise die Wellenfunktion des Wasserstoffatoms sein und $n_r(\vec{k})$ sind die Besetzungszahlen der Photonzustände. Wir interessieren uns nun für die Übergangswahrscheinlichkeit für folgenden Übergang:



Die Energie des Photons ist $E_\gamma = E_A - E_B = \hbar\omega_k$. Wir machen wieder Gebrauch von FERMIS goldener Regel, um die Wahrscheinlichkeit p_r pro Zeiteinheit zu berechnen:

$$p_r = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle B; \dots n_r(\vec{k}) + 1 \dots | H_I | A; \dots n_r(\vec{k}) \dots \rangle \right|^2 \delta(E_A - (E_B + \hbar\omega_k))$$

Wir beschreiben also die Übergangswahrscheinlichkeit (und auch Zerfallsraten) von Übergängen in Atomen. Die Übergangsamplitude ergibt sich durch folgendes Matrixelement:

$$\mathcal{M} = \left\langle B; n_r(\vec{k}) + 1 \left| - \sum_i \frac{e_i}{m_i} \vec{A}(\vec{r}_i(t)) \cdot \vec{p}_i \right| A; n_r(\vec{k}) \right\rangle \quad \text{mit} \quad \vec{A}(\vec{r}_i) = \sum_{r', \vec{k}'} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V \omega_{k'}}} \vec{\varepsilon}_{r'}(\vec{k}') a_{r'}^\dagger(\vec{k}') \exp(-i(\vec{k}' \cdot \vec{r}_i - \omega t))$$

Der hermitesch konjugierte Anteil hat keinen Beitrag. Für einen harmonischen Oszillator gilt (hier $a^\dagger = a_r^\dagger(\vec{k})$)

$$\langle n | a^\dagger | n \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle n + 1 | a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n + 1}$$

Für die Photonen hat man die gleichen Regeln, weil man eine Summe von harmonischen Oszillatoren hat. Damit gilt für das Matrixelement:

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \langle n_r(\vec{k}) + 1 | a_r^\dagger(\vec{k}) | n_r(\vec{k}) \rangle \left\langle B \left| - \sum_i \frac{e_i}{m_i} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_k}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \exp(-i(\vec{k} \cdot \vec{r}_i)) \cdot \vec{p}_i \right| A \right\rangle = \\ &= \sqrt{n_r(\vec{k}) + 1} - \sqrt{\frac{\hbar}{\varepsilon_0}} \cdot \sqrt{\frac{(2\pi)^3}{V}} \cdot \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 \cdot 2\omega_k}} \cdot \frac{e}{m} \cdot \left\langle B \left| \frac{m}{e} \sum_i \frac{e_i}{m_i} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \cdot \vec{p}_i \right| A \right\rangle \cdot \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, r} p_r &= \sum_{\vec{k}, r} \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{M}|^2 \delta(E_A - (E_B + \hbar\omega_k)) = \\ &= \sum_{r, \vec{k}} \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{\varepsilon_0} \cdot \frac{(2\pi)^3}{V} \cdot \frac{n_r(\vec{k}) + 1}{(2\pi)^3 \cdot 2\omega_k} \cdot \frac{e^2}{m^2} \left| \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \cdot \left\langle B \left| \sum_i \frac{e_i}{m_i} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \vec{p}_i \right| A \right\rangle \right|^2 \delta(E_A - E_B - \hbar\omega_k) \end{aligned}$$

Wir machen nun den Grenzübergang von Summation nach Integration

$$\sum_{r, \vec{k}} \frac{(2\pi)^3}{V} \mapsto \sum_{r, \vec{k}} (\Delta \vec{k})^3 = \sum_r \int d^3 \vec{k}$$

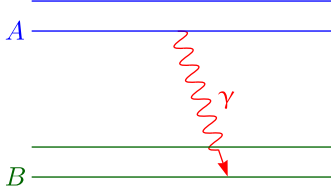
womit sich ergibt:

$$\begin{aligned} w_r &= \sum_r \int d^3 \vec{k} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \cdot \frac{\hbar c}{\pi \cdot 2\omega_k \cdot m^2} (n_r(\vec{k}) + 1) \left| \vec{\varepsilon}_r \cdot \left\langle B \left| \sum_i \frac{e_i}{m_i} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \vec{p}_i \right| A \right\rangle \right|^2 \delta(E_A - E_B - \hbar\omega_k) = \\ &= \frac{\hbar\omega_k = \hbar c |\vec{k}|}{\sum_r} \int d\Omega_k \frac{\alpha}{2\pi} \cdot \frac{\omega_k (n_r(\vec{k}) + 1)}{m^2 c^2} \left| \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \cdot \left\langle B \left| \frac{m}{e} \sum_i \frac{e_i}{m_i} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \cdot \vec{p}_i \right| A \right\rangle \right|^2 \end{aligned}$$

Was können wir aus diesem Ausdruck ablesen?

- 1.) Es ist $w_r \sim n_r(\vec{k}) + 1 \neq 0$ selbst für 0 Photonen im Eingangszustand. Dies entspricht gerade spontaner Emission. Klassisch passiert keine spontane Emission für den elektromagnetischen Grundzustand $\vec{E} = \vec{B} = \vec{0}$ ($\vec{A} = \vec{0}$). Dies ist also ein rein quantenmechanischer Effekt.
- 2.) Ist die Besetzungszahl $n_r(\vec{k})$ groß, wird die Übergangswahrscheinlichkeit verstärkt durch den Faktor $n_r(\vec{k}) + 1$ gegenüber der spontanen Emission (stimulierte Emission, LASER!).

4.17 Lebensdauer eines angeregten atomaren Zustands



Die Wellenlänge λ sei viel größer als atomare Dimensionen, womit wir die Exponentialfunktion entwickeln können:

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \approx 1 - i\vec{k} \cdot \vec{r} + \dots \approx 1$$

Um das Matrixelement $\langle B | \vec{p} | A \rangle$ zu berechnen, wobei $|A\rangle$ und $|B\rangle$ ja Eigenzustände von H sind, müssen wir \vec{p} irgendwie durch H ausdrücken. Dies tun wir wie folgt:

$$\vec{p} = \frac{m_i}{i\hbar} \left[\vec{x}_i, \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \right] = \frac{m_i}{i\hbar} \left[\vec{x}_i, \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V \right] = \frac{m_i}{i\hbar} [\vec{x}_i, H_m(0)]$$

Hieraus folgt also:

$$\begin{aligned} \langle B | \vec{p} | A \rangle &= \frac{m_i}{i\hbar} \langle B | \left[\vec{x}_i, H_m^{(0)} \right] | A \rangle = \frac{E_A - E_B}{i\hbar} m_i \langle B | \vec{x}_i | A \rangle \\ \frac{m}{e} \left\langle B \left| \sum_i \frac{e_i}{m_i} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \cdot \vec{p}_i \right| A \right\rangle &\stackrel{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \simeq 1}{=} \frac{m}{e} \left\langle B \left| \sum_i \frac{e_i \vec{x}_i}{m_i} \cdot m_i \cdot \frac{\omega}{i} \right| A \right\rangle \cdot \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) = \\ &= -\frac{im\omega}{e} \underbrace{\left\langle B \left| \sum_i e_i \vec{x}_i \right| A \right\rangle}_{\vec{x}_{BA}} \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) = -im\omega \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \cdot \vec{x}_{BA} \end{aligned}$$

Wir setzen dieses Zwischenergebnis in die Übergangswahrscheinlichkeit ein:

$$\omega_r = \frac{\alpha}{2\pi} \cdot \frac{\omega}{m^2 c^2} \int d\Omega \left(n_r(\vec{k}) + 1 \right) m^2 \omega^2 - \left| \vec{\varepsilon}_r(\vec{k}) \cdot \vec{x}_{BA} \right|^2$$

Wir betrachten den Spezialfall $n_r(\vec{k}) = 0$ (keine Polarisationsmessung):

$$\sum_r |\vec{\varepsilon}_r \cdot \vec{x}|^2 = \vec{x}^* \cdot \left[(\vec{\varepsilon}_1 \cdot \vec{\varepsilon}_1 \vec{x} + \vec{\varepsilon}_2 \cdot \vec{\varepsilon}_2 \vec{x}) + \hat{k} \cdot \hat{k} \vec{x} - \hat{k} \cdot \hat{k} \vec{x} \right] = \vec{x}^* \cdot \left[\vec{x} - \hat{k} |\vec{x}| \cos \theta \right] = |\vec{x}_{BA}|^2 (1 - \cos^2 \theta)$$

$$w_{A \rightarrow B} = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega^3}{c^2} |\vec{x}_{BA}|^2 \cdot \int d\Omega (1 - \cos^2 \theta)$$

Wir berechnen das Winkelintegral:

$$\int d\Omega (1 - \cos^2 \theta) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) (1 - \cos^2 \theta) = 4\pi \cdot \left(1 - \frac{1}{3} \right) = \frac{8\pi}{3}$$

Daraus folgt die partielle Zerfallsbreite:

$$\Gamma(A \mapsto B) = \frac{4\alpha}{3} \cdot \frac{\omega^3}{c^2} |\vec{x}_{BA}|^2 = w_{A \mapsto B}$$

$w_{A \mapsto B}$ ist die Wahrscheinlichkeit für einen unpolarisierten Zustand. Obiger Ausdruck beschreibt die spontane Emission in Dipolapproximation.

Außerdem ergibt sich die Lebensdauer des Niveaus $|A\rangle$, nämlich τ_A durch:

$$\frac{1}{\tau_A} = \sum_B w_{A \mapsto B} = \sum_B \Gamma(A \mapsto B) = \Gamma_{tot}$$

Γ_{tot} bezeichnet man als totale Zerfallsbreite.

4.17.1 Beispiel: Atomarer Wasserstoff

Wir betrachten die Zustände $|A\rangle = |2p\rangle$ und $|B\rangle = |1s\rangle$:

$$|A\rangle = R_{n=2, l=1}(r) Y_{l=1}^m(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) Y_1^m \cdot \frac{r}{a_0}$$

$$|B\rangle = R_{n=1, l=0}(r) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) Y_{l=0}^m$$

Das WIGNER-ECKART-Theorem besagt, dass $|\vec{x}_{BA}|^2$ nicht von m abhängt. Aus $j_1 = 1 \otimes j_2 = 1$ ergibt sich $j = 0$. Wir wählen nun $m = 0$ und damit trägt nur

$$\frac{1}{e} \sum_i e_i \vec{x}_i = z \hat{z}$$

bei.

$$\begin{aligned} |\vec{x}_{BA}| &= \int_0^\infty r^2 dr R_{n=2, l=1}(r) R_{n=1, l=0}^*(r) \int d\Omega Y_{l=1}^{m=0}(\vartheta, \varphi) z Y_{l=0}^{m=0}(\vartheta, \varphi) = \\ &= \int_0^\infty r^2 dr R_{n=2, l=1}(r) R_{n=1, l=0}^*(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\vartheta) \cdot r \cos \vartheta \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \\ &= \int_0^\infty r^2 dr R_{n=2, l=1}(r) R_{n=1, l=0}^*(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 dc \sqrt{\frac{3}{4\pi}} c \cdot r \cdot c \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \\ &= \int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{a_0^3} \cdot \frac{2}{\sqrt{24}} \cdot \exp\left(-\frac{3r}{2a_0}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{r}{a_0} \stackrel{y=\frac{3r}{2a_0}}{=} \int_0^\infty \left(\frac{2}{3}\right)^4 \cdot a_0^4 \cdot y^3 dy \frac{1}{a_0^3} \cdot \frac{2}{\sqrt{24}} \cdot \exp(-y) \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{2}{3} y = \\ &= \frac{1}{3\sqrt{2}} \cdot a_0 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot \int_0^\infty y^{5-1} \cdot \exp(-y) dy = a_0 \cdot \frac{2^8}{3^5 \cdot \sqrt{2}} \end{aligned}$$

Der Wert des Integrals lässt sich mit der Gamma-Funktion Γ angeben:

$$\int_0^\infty y^4 \exp(-y) dy = \Gamma(5) = 4! = 24 = 3 \cdot 8$$

Mit

$$\omega = \frac{E_A - E_B}{\hbar} = \frac{\alpha^2 \cdot mc^2}{\hbar} \cdot \left(-\frac{1}{8} + \frac{1}{2}\right) = \frac{\alpha^2 \cdot mc^2}{\hbar} \cdot \frac{3}{8}$$

und dem Kehrwert des BOHRschen Radius

$$\frac{1}{a_0} = \frac{mc}{\hbar} \cdot \alpha = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

ergibt sich die Zerfallsbreite:

$$\Gamma(A \mapsto B) = \alpha \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{\omega^3}{c^2} \cdot a_0^2 \cdot \frac{2^{16}}{3^{10} \cdot 2} = \alpha \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{\alpha^6 \cdot m^2 c^4}{\hbar^3} \cdot \frac{3^3}{2^0} \cdot a_0^2 \cdot \frac{2^{16}}{3^{10} \cdot 2} = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \cdot \alpha^4 \cdot \frac{c}{a_0^3} = \frac{1}{\tau_{2p \rightarrow 1s}}$$

Setzt man die Zahlenwerte ein, so ergibt sich $\tau_{2p \rightarrow 1s} = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ s}$.

4.18 Plancksche Strahlungsformel

Uns interessiert das thermische Gleichgewicht zwischen Strahlung und umgebener Materie $A \leftrightarrow B + \gamma$. Die Anzahl der Atome im Zustand A sei $N(A)$ und die Anzahl der Atome im Zustand B bezeichnen wir mit $N(B)$. Der Quotient der beiden Größen ergibt sich nach BOLTZMANN:

$$\frac{N(B)}{N(A)} = \frac{\exp\left(-\frac{E_B}{k_B T}\right)}{\exp\left(-\frac{E_A}{k_B T}\right)} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$$

Die Gleichgewichtsbedingung besagt $N(B) \cdot w_{abs} = N(A) \cdot w_{emi}$.

$$w_{emi} = \frac{\alpha \cdot \omega}{2\pi \cdot m^2 c^2} \cdot (n(\vec{k}) + 1) \cdot \left| \left\langle B \left| \sum_i \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{\varepsilon}_r \cdot \vec{p}_i \right| A \right\rangle \right|^2$$

$$w_{abs} = \frac{\alpha \cdot \omega}{2\pi \cdot m^2 c^2} \cdot n(\vec{k}) \cdot \left| \left\langle A \left| \sum_i \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{\varepsilon}_r \cdot \vec{p}_i \right| B \right\rangle \right|^2 = \frac{\alpha \cdot \omega}{2\pi \cdot m^2 c^2} n(\vec{k}) \cdot \left| \left\langle B \left| \sum_i \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \vec{\varepsilon}_r \cdot \vec{p}_i \right| A \right\rangle \right|^2$$

Hieraus ergibt sich also:

$$\frac{w_{emi}}{w_{abs}} = \frac{n(\vec{k}) + 1}{n(\vec{k})} = \frac{N(B)}{N(A)} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \Rightarrow \frac{1}{n(\vec{k})} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1$$

$$n(\vec{k}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$$

Bei der Schwarzkörperstrahlung sind alle ω erlaubt, es gibt keine diskreten Spektren. Gesucht ist nun noch die Energie der Photonen pro Volumen im Intervall $[\omega, \omega + d\omega]$:

$$\begin{aligned} \int u(\omega) d\omega &= \frac{1}{L^3} \sum_{r, \vec{k}} \hbar\omega_k n_r(\vec{k}) = 2 \cdot \frac{1}{L^3} \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} \cdot \int d^3\vec{k} \hbar\omega_k n_r(\vec{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \cdot \int k^2 dk \hbar\omega_k n_r(k) = \\ &= \frac{8\pi}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{c^3} \cdot \int \omega^2 d\omega \hbar\omega \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \stackrel{\omega=2\pi\nu}{=} \frac{1}{\pi^2} \cdot \frac{\hbar}{c^3} \cdot \int (2\pi)^4 \nu^3 d\nu \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\nu}{k_B T}\right) - 1} = \\ &= \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \int \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{\hbar\nu}{k_B T}\right) - 1} d\nu = \int u(\nu) d\nu \end{aligned}$$

$$u(\nu) = u(\omega) \frac{d\omega}{d\nu} = u(\omega) \cdot 2\pi = \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{\hbar\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

Wir sind also wieder zum Anfang der Quantenmechanik zurückgekehrt.