

Universität Konstanz

Skript zur Vorlesung Höhere Quantentheorie und Elektrodynamik

Prof. Dr. Wolfgang Belzig
Version vom 30. Januar 2012

Ursprünglichen Mitschrift von Birte Heinze im WS 09/10
Überarbeitet von Tobias Lohse im WS 11/12

Inhaltsverzeichnis

1	Nichtrelativistische Quantenmechanik	5
1.0	Wiederholung der Quantenmechanik	5
1.0.1	Zustand eines Systems	5
1.0.2	Zeitentwicklung und Schrödingergleichung	5
1.0.3	Physikalische Observablen	6
1.0.4	Messung und Projektionspostulat	7
1.0.5	Beispiel: freies Teilchen	7
1.0.6	Harmonischer Oszillator	8
1.0.7	Drehimpuls	9
1.1	Addition von Drehimpulsen	11
1.1.1	Addition von zwei Spin $\frac{1}{2}$ Operatoren	11
1.1.2	Addition von zwei allg. Drehimpulsoperatoren	13
1.2	Zeitabhängige Störungstheorie	15
1.2.1	Zeitabhängigkeit in der Schrödingertheorie	15
1.2.2	Zeitunabhängige Störungstheorie	15
1.2.3	Zeitabhängigkeiten in der Quantenmechanik	16
1.2.4	Übergangswahrscheinlichkeit	19
1.3	Streutheorie	22
1.3.1	Streuung eines Wellenpakets	22
1.3.2	Formale Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung	23
1.3.3	Streuquerschnitt und Wirkungsquerschnitt	24
1.3.4	Lösung des Radialteils der freien Schrödinger Gleichung	24
1.3.5	Partialwellen-Zerlegung	26
1.3.6	Bornsche Näherung	27
1.3.7	Streuung am Yukawa-Potential	28
1.3.8	Resonanzstreuung am Potentialtopf	29
1.4	Propagatoren und Quantendynamik	31
1.4.1	Propagatoren und die Greensche Funktion	31
1.4.2	Pfadintegralformilierung der Quantenmechanik	34
1.4.3	Eichtransformationen	37
1.4.4	Der Aharonov-Bohm-Effekt	39
1.5	Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Messprozess	41
1.5.1	Messungen und Projektionspostulat	41
1.5.2	Dichtematrix	42
1.5.3	Messprozess nach von Neumann	46
1.5.4	Bellsche Ungleichung	48
2	Relativistische Elektrodynamik	52
2.1	Spezielle Relativitätstheorie	52
2.1.1	Koordinatentransformation und Newtonsche Mechanik	52
2.1.2	Elektrodynamik	53
2.1.3	Lorentztransformationen	54
2.1.4	Vierervektoren / Tensorrechnung	56
2.1.5	Relativistische Mechanik	59

2.2	Kovariante Formulierung der Elektrodynamik	62
2.2.1	Viererstrom	62
2.2.2	Viererpotential	62
2.2.3	Feldstärketensor	63
2.2.4	Geladenes Teilchen	65
2.3	Lagrangeformalismus	67
2.3.1	Mechanik eines freien Teilchens	67
2.3.2	Mechanik mit elektromagnetischem Feld	67
2.3.3	Felder	69
2.3.4	Felder und Teilchen	70
2.3.5	Energie-Impuls- oder Spannungstensor	71
2.3.6	Energie-Impuls-Tensor des elektromagnetischen Feldes	73
2.4	Lösung der Wellengleichung in kovarianter Form	74
3	Relativistische Quantenmechanik	76
3.1	Klein-Gordon-Gleichung	77
3.2	Dirac-Gleichung	79
3.2.1	Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung	79
3.2.2	Konstruktion des Viererstroms	79
3.2.3	Konstruktion des Spinorraums, Dirac-Darstellung	80
3.2.4	Kovariante Form der Dirac- Gleichung	81
3.2.5	Nachweis der Kovarianz	82
3.3	Lösungen der Dirac-Gleichung und der nicht relativistische Grenzfall	87
3.3.1	Ruhende Teilchen $\partial_t \psi = 0$	87
3.3.2	Ebene Wellen	87
3.3.3	Ankopplung des elektromagnetischen Feldes	90
3.3.4	Nicht-relativistischer Grenzfall, Pauli-Gleichung	91
3.3.5	Spin, Helizität, Chiralität	92
3.3.6	Zitterbewegung	94
3.3.7	Löchertheorie	97
4	Quantenfeldtheorie	98
4.1	Teilchensysteme	98
4.1.1	Ein Teilchen	98
4.1.2	Zwei identische Teilchen	98
4.1.3	Viele Teilchen	99
4.1.4	Fockraum	100
4.2	Erzeuger und Vernichter	101
4.2.1	Bosonen:	101
4.2.2	Fermionen	102
4.3	Operatoren in zweiter Quantisierung	104
4.3.1	Einteilchenoperator	104
4.3.2	Zweiteilchenoperaor	104
4.3.3	Hamiltonoperator	105
4.4	Feldoperatoren	106
4.4.1	Basiswechsel	106
4.4.2	Ortsdarstellung	106
4.4.3	Bewegungsgleichung	107

4.4.4	Impulsdarstellung / Feynmandiagramme	107
4.4.5	Spin	108
4.5	Feldquantisierung der Diractheorie	110
4.5.1	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	110
4.5.2	Feldoperatoren	110
4.5.3	Hamiltonoperator	111
4.6	Quantisierung des Strahlungsfeldes	113
4.6.1	Normalmoden, Photonen	113
4.6.2	Feldoperatoren	114
4.6.3	Strahlungsübergänge, QED	114
4.6.4	Der Casimir-Effekt	115

Kapitel 1:

Nichtrelativistische Quantenmechanik

1.0 Wiederholung der Quantenmechanik

1.0.1 Zustand eines Systems

Statt einer Trajektorie in der Raumzeit werden Zustände im Hilbertraum verwendet.

Schrödingernotation:

Wellenfunktion

$$\psi(\vec{r}, t)$$

Diracnotation:

Zustandsvektor

$$| \psi \rangle$$

$$\leftarrow \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle \rightarrow$$

Wahrscheinlichkeitsinterpretation: $W = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\langle \vec{r} | \psi(t) \rangle|^2$ ist Wahrscheinlichkeit ein Teilchen am Ort \vec{r} zur Zeit t zu finden.

\Rightarrow Normierung für alle Zeiten t :

$$\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

$$|\langle \psi | \psi \rangle| = 1$$

Allgemein ist die Wahrscheinlichkeit, den Zustand $|n\rangle$ eines Systems zu finden: $P_n(t) = |\langle n | \psi(t) \rangle|^2$

1.0.2 Zeitentwicklung und Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{\mathcal{H}}(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Der Hamiltonoperator $\hat{\mathcal{H}}(\vec{r}, t)$ kann mit dem Korrespondenzprinzip aus der klassischen Hamiltonmechanik hergeleitet werden.

z.B. ein Teilchen im elektromagnetischen Feld:

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\vec{r}, t))^2 + q\phi(\vec{r}, t)$$

Mit dem skalaren Potential ϕ und dem Vektorpotential \vec{A} , die gemäß

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \dot{\vec{A}} \quad \text{bzw.} \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

das \vec{E} - bzw. das \vec{B} -Feld ergeben. \vec{p} und \vec{r} sind Operatoren, die wie folgt definiert sind.

$$\begin{array}{lll} \text{Ortsraum} & \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}} & = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}} \\ \text{Impulsraum} & \hat{\vec{r}} = +i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}} & = +i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}} \end{array}$$

Stationäre Zustände

Falls \hat{V} und \vec{A} zeitunabhängig sind, lässt sich der Ansatz

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \cdot \psi(\vec{r})$$

verwenden. In der Schrödingergleichung eingesetzt folgt daraus die stationäre Schrödingergleichung:

$$E\psi(\vec{r}) = \hat{\mathcal{H}}(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

Dies entspricht einem Eigenwertproblem.

1.0.3 Physikalische Observablen

Observablen sind mit hermiteschen Operatoren verknüpft. Sei \hat{A} eine Observable, so ist ihr Erwartungswert gegeben durch: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

Hermitizität : $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

Falls $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}] = 0$, so können $\hat{\mathcal{H}}$ und \hat{A} gleichzeitig diagonalisiert werden, d. h. es gibt Zustände $|E, a\rangle$ (E ist Eigenwert zu $\hat{\mathcal{H}}$ und a ist Eigenwert zu \hat{A}) für die gilt:

$$\hat{\mathcal{H}} |E, a\rangle = E |E, a\rangle \quad \text{und} \quad \hat{A} |E, a\rangle = a |E, a\rangle$$

$\Rightarrow \hat{A}$ entspricht einer **Erhaltungsgröße** :

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = 0$$

1.0.4 Messung und Projektionspostulat

Der **Mittelwert** vieler Messungen von \hat{A} ergibt $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$. Eine **einzelne Messung** jedoch ergibt immer einen **Eigenwert** (EW) von \hat{A} :

$$\begin{aligned}\hat{A} |a\rangle &= a |a\rangle \\ |a\rangle &= \text{Eigenzustand zu } \hat{A} \\ a &= \text{Eigenwert von } \hat{A} \text{ zu } |a\rangle\end{aligned}$$

Der Mittelwert ist in der Regel selbst kein Eigenwert. Der Erwartungswert einer Observable hat in diesem Sinne keine physikalische, sondern lediglich eine statistische Realität.

Projektionspostulat

Nach der Messung des Eigenwertes a von \hat{A} ist der Zustand $|a\rangle$ fest.

$$\begin{array}{ccc} |\psi\rangle & \longrightarrow & |a\rangle \\ \text{allgemeiner Zustand} & \text{Projektion} & \text{Eigenzustand} \end{array}$$

Der Zustand eines Systems wird durch die Messung in den Eigenzustand projiziert. Die Projektion ist eine nicht unitäre Zeitentwicklung, also unumkehrbar. Durch die Messung wird der Zustand des Systems geändert.

\implies Wiederholte Messung ergibt wieder den Eigenwert a .

\implies Informationen über den Zustand $|\psi\rangle$ vor der Messung sind verloren.

1.0.5 Beispiel: freies Teilchen

$$\hat{V} = 0 \quad \vec{A} = 0$$

Mit der Schrödingergleichung gilt:

$$\begin{aligned}i\hbar \partial_t \psi &= \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{\hat{\mathcal{H}}} \psi \\ \Rightarrow \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}] &= 0\end{aligned}$$

Hiermit gilt die Impulserhaltung. Eigenzustände sind z. B.:

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= c \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (\text{ebene Welle}) \\ \text{mit } \hat{p} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \underbrace{\hbar\vec{k}}_{\text{Impuls-EW}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ \hat{\mathcal{H}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \underbrace{\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}}_{\text{Energie-EW}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})\end{aligned}$$

Zeitentwicklung: $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = c \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)}$ mit $E_k = \hbar\omega_k$
 Allgemeines Wellenpaket:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= \int d^3k \, c(\vec{k}) \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(\vec{k})t)} \\ \omega(\vec{k}) &= \frac{E(k)}{\hbar}\end{aligned}$$

1.0.6 Harmonischer Oszillator

$\hat{V} = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ (eindimensional)
 zugehöriger Hamiltonoperator:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Definiere:

$$\begin{aligned}\hat{P} &:= \sqrt{\hbar m \omega} \hat{p} & \hat{X} &:= \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} \hat{x} \\ \Rightarrow \hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hbar \omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{X}^2) \quad \text{und} \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i\end{aligned}$$

Um die Energieeigenzustände zu bestimmen, werden die Auf- und Absteigeoperatoren definiert:

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1 \\ \Rightarrow \hat{\mathcal{H}} &= \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

$\hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a}$ ist der Anzahloperator. Er gibt an, in der wievielten Anregung n des Oszillators sich das System befindet:

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle$$

$$\begin{aligned}\hat{N}(\hat{a}^\dagger |n\rangle) &= (n+1)(\hat{a}^\dagger |n\rangle) & \text{d.h. } \hat{a}^\dagger &\text{bring das System in einen „höheren“ Zustand} \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle & &\text{„höherer Zustand“} \\ \hat{a} |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle & &\text{„niedriger Zustand“}\end{aligned}$$

Die Menge der Eigenwerte des Systems mit $\hat{\mathcal{H}} |n\rangle = E_n |n\rangle$ (Spektrum des Systems) ist:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \text{ mit } n = 0, 1, 2, \dots$$

Die möglichen Werte von n ergeben sich aus der Normierung.

1.0.7 Drehimpuls

Der Bahndrehimpuls ist definiert als $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$. Er spielt bspw. bei der Berechnung von Wasserstoffzuständen eine wichtige Rolle.

Es gilt im Zentralpotential $\hat{V}(|\vec{r}|)$:

$$[\hat{\vec{L}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$$

\Rightarrow Drehimpuls ist Erhaltungsgröße

Eigenschaften von Drehimpulsoperatoren:

Vertauschungsrelation (VR)

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (1)$$

Die obige Gleichung wird **Drehimpulsalgebra** genannt. Jeder Satz von drei Operatoren, für die die Drehimpulsalgebra gilt, wird als quantenmechanischer Drehimpuls behandelt, z. B. der Spin.

Eine äquivalente Schreibweise der Drehimpulsalgebra (1) ist

$$\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar \hat{\vec{L}} \quad (2)$$

Drehimpulsbetrag

Für den Operator des Drehimpulsbetrages gilt:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \\ [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_i] &= 0 \quad i \in [1, 2, 3] \end{aligned}$$

Spektrum

Mit dem Spektrum der Drehimpulsoperatoren sind die zugehörigen verschiedenen Eigenwerte gemeint.

Es gibt eine orthonormale Basis (ONB) : $\{|n, l\rangle\}$ (Basis von Vektoren im Hilbertraum, welche orthogonal zueinander und normiert sind.)

Für die $\{|n, l\rangle\}$ gilt:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}}^2 |n, l\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |n, l\rangle \\ \hat{L}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \end{aligned}$$

Aus der Algebra folgt: $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ (Erinnerung: der Bahndrehimpuls ist jedoch nur ganzzahlig)

\Rightarrow Drehimpuls ist quantisiert

Es folgt weiter für die magnetische Quantenzahl $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ und für jede Bahndrehimpulsquantenzahl (l) gibt es $2l + 1$ Eigenzustände von \hat{L}_z

Leiteroperator von \hat{L}^\pm

Man definiert den Leiteroperator $\hat{L}^\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$. Aus der Drehimpulsalgebra lässt sich folgern, dass

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}^\pm] &= \pm \hbar \hat{L}_\pm \\ [\hat{L}^+, \hat{L}^-] &= 2\hbar \hat{L}_z. \end{aligned}$$

Es ergeben sich aus den obigen Gleichungen und der Normierung folgende Eigenschaften für Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned} \hat{L}^\pm |l, m\rangle &= \hbar \underbrace{\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}}_{a_{l,m}^\pm} |l, m \pm 1\rangle \\ \longrightarrow \hat{L}^+ |l, l\rangle &= 0 \quad (|l, l\rangle \hat{=} \text{maximaler Zustand}) \\ \longrightarrow \hat{L}^- |l, -l\rangle &= 0 \quad (|l, -l\rangle \hat{=} \text{minimaler Zustand}) \end{aligned}$$

Bemerkungen:

- Der Eigendrehimpuls (Spin) erfüllt die Drehimpulsalgebra, kann aber auch halbzahlig sein.
- Der Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{J}}$ eines Teilchen ist die Summe aus Bahn- und Eigendrehimpuls:

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

1.1 Addition von Drehimpulsen

Z.B. Um Atom mit mehreren Elektronen zu Berechnen.

Hinweis: Im Folgenden werden die Operatoren Hütchen weggelassen!

Der Gesamtdrehimpuls ist gegeben durch $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ (\vec{J}_1 und \vec{J}_2 erfüllen die Drehimpulsalgebra).

\vec{J}_1 und \vec{J}_2 vertauschen komponentenweise untereinander ($[\vec{J}_{1i}, \vec{J}_{2j}] = 0$ für alle: $i \neq j$ und $i, j \in \{x, y, z\}$), jedoch vertauschen sie nicht mit dem Gesamtdrehimpulsquadrat:

$$\begin{aligned} [\vec{J}_{1i}, \vec{J}^2] &\neq 0 \neq [\vec{J}_{2i}, \vec{J}^2] \\ \text{mit } \vec{J}^2 &= \vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + 2\vec{J}_1 \vec{J}_2 \end{aligned}$$

d.h wir können keine ONB finden für z. B. $J_{1z}, J_{2z}, \vec{J}^2$

Relevant ist dies zum Beispiel für Mehrteilchensysteme:

- Spin-Bahn-Kopplung (relativistischer Effekt)
- Bandstruktur in Halbleitern und Festkörpern allgemein

1.1.1 Addition von zwei Spin $\frac{1}{2}$ Operatoren

Die Operatoren \vec{S}_1, \vec{S}_2 vertauschen miteinander $[S_{1i}, S_{2j}] = 0$. Die Zustände für jeden Spin $|s, m\rangle$ sind $s = \frac{1}{2}$ und $m = \pm\frac{1}{2}$.

Die abkürzende Schreibweise hierfür ist:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &=: |\uparrow\rangle \hat{=} \text{„spin up“} \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &=: |\downarrow\rangle \hat{=} \text{„spin down“} \end{aligned}$$

Der Produktraum vom Spin up und Spin down hat vier Zustände:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle_1 \oplus |\uparrow\rangle_2 &= |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\rangle_1 \oplus |\downarrow\rangle_2 &= |\uparrow\rangle |\downarrow\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\rangle_1 \oplus |\uparrow\rangle_2 &= |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle_1 \oplus |\downarrow\rangle_2 &= |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Der Gesamtspin $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ erfüllt die Drehimpulsalgebra \rightarrow Eigenzustände besitzen die Form $|s, m\rangle$. s und m sind zu bestimmen.

Hinweis: In diesem Kapitel wird \hbar auf 1 normiert ($\hbar = 1$)!

Produktzustände sind Eigenzustände von $S_z = S_{1z} + S_{2z}$:

$$\begin{aligned}
 S_z |\uparrow\uparrow\rangle &= (S_{1z} + S_{2z}) |\uparrow\uparrow\rangle = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) |\uparrow\uparrow\rangle = 1 \cdot |\uparrow\uparrow\rangle \quad \hat{=} \quad \text{ganzzahlig} \\
 S_z |\uparrow\downarrow\rangle &= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) |\uparrow\downarrow\rangle = 0 \cdot |\uparrow\downarrow\rangle \quad \hat{=} \quad \text{ganzzahlig} \\
 S_z |\downarrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) |\downarrow\uparrow\rangle = 0 \cdot |\downarrow\uparrow\rangle \quad \hat{=} \quad \text{ganzzahlig} \\
 S_z |\downarrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) |\downarrow\downarrow\rangle = -1 \cdot |\downarrow\downarrow\rangle \quad \hat{=} \quad \text{ganzzahlig}
 \end{aligned}$$

\Rightarrow Die Werte von m sind ganzzahlig $(-1, 0, 1)$.

Um die Eigenzustände und Eigenwerte von \vec{S}^2 zu bestimmen benutzen wir:

$$\begin{aligned}
 \vec{S}^2 &= (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1\vec{S}_2 \\
 &= \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + \underbrace{2S_{1x}S_{2x} + 2S_{1y}S_{2y}}_{S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+}
 \end{aligned}$$

Für den Spin $\frac{1}{2}$ gilt $\vec{S}_1^2 = \vec{S}_2^2 = \frac{3}{4}$. Hiermit lässt sich \vec{S}^2 ausrechnen:

$$\begin{aligned}
 \vec{S}^2 |\uparrow\uparrow\rangle &= \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + 0 + 0\right) |\uparrow\uparrow\rangle \\
 &= 2 \cdot |\uparrow\uparrow\rangle = s(s+1) |\uparrow\uparrow\rangle \\
 \Rightarrow s &= 1 \text{ für } |\uparrow\uparrow\rangle \text{ Zustand} \\
 \Rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle &= |s=1, m=1\rangle
 \end{aligned}$$

Für den Eigenzustand $|\downarrow\downarrow\rangle$ lässt sich ebenso berechnen, dass gilt:

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

Um $|s=1, m=0\rangle$ zu erhalten, verwenden wir:

$$\begin{aligned}
 S^- &= S_1^- + S_2^- \\
 S^- |\uparrow\uparrow\rangle &= (S_1^- + S_2^-) |\uparrow\uparrow\rangle \\
 &= |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle \\
 S^- |1, 1\rangle &= \sqrt{2} |1, 0\rangle \\
 \Rightarrow |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)
 \end{aligned}$$

Der letzte Zustand (orthogonal zu $|1, 0\rangle$) ist:

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

Somit sind die Eigenzustände von \vec{S}^2 und S_z :

$ 0, 0\rangle$	$= \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	„Singulett“ Zustand
$ 1, 1\rangle$	$= \uparrow\uparrow\rangle$	„Triplett“ Zustand
$ 1, 0\rangle$	$= \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	
$ 1, -1\rangle$	$= \downarrow\downarrow\rangle$	

1.1.2 Addition von zwei allg. Drehimpulsoperatoren

Seien \vec{J}_1, \vec{J}_2 zwei Drehimpulsoperatoren, die untereinander vertauschen ($[J_{1i}, J_{2j}] = 0$)
 Wähle eine Basis im Produktraum von \vec{J}_1, \vec{J}_2 :

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (3)$$

Der Gesamtdrehimpuls ergibt sich aus der Addition der einzelnen Drehimpulse ($\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$)
 und erfüllt die Drehimpulsalgebra (siehe 2):

$$\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$$

Gesucht: Eigenzustände $|j, m\rangle$ von \vec{J}^2 und J_z . Es gilt:

$$[\vec{J}^2, \vec{J}_1^2] = 0 = [\vec{J}^2, \vec{J}_2^2]$$

\Rightarrow Eine ONB ist gegeben durch

$$|j_1, j_2, j, m\rangle \quad (4)$$

Da gilt $[\vec{J}^2, J_{1z}] \neq 0 \neq [\vec{J}^2, J_{2z}]$ sind die Zustände (3) keine Eigenzustände von \vec{J}^2 .
 Im Folgenden werden die Zustände (1) nach der Basis (3) zerlegt:

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle}_{C_{m_1 m_2}^{jm}}$$

\rightarrow Wir summieren nicht über j_1 und j_2 , da sowohl $|j_1, j_2, j, m\rangle$ sowie $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ Eigenzustände von \vec{J}_1^2 und \vec{J}_2^2 sind und Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind.
 \rightarrow Die Koeffizienten $\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, m, j \rangle$ heißen Clebsch-Gordan-Koeffizienten
 \rightarrow Es gilt außerdem $m = m_1 + m_2$, da

$$\begin{aligned} J_z |j_1, j_2, j, m\rangle &= m |j_1, j_2, j, m\rangle \\ &= \underbrace{m_1 + m_2}_{\text{EW von } J_z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \end{aligned}$$

Da $m_1 + m_2$ Eigenzustände von J_j sind, ist die Summe beschränkt auf $(m_1 + m_2) = m$
Bemerkungen:

- Mögliche j -Werte bei gegebenen j_1 und j_2 sind (analog zur klassischen Addition):

$$\underbrace{|j_1 - j_2|}_{\text{min. Drehimpuls}} \leq j \leq \underbrace{|j_1 + j_2|}_{\text{max. Drehimpuls}}$$

- Anzahl der Zustände im j_1 - j_2 Unterraum zu festem $j_1 \geq j_2$ bei $2j_i + 1$ Zuständen pro j_i ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} \sum_{j=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|} 2j+1 &\stackrel{k=j-j_1}{=} \sum_{k=-j_2}^{+j_2} 2(j_1+k)+1 \\ &= (2j_1+1)(2j_2+1) \end{aligned}$$

- Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind aus Tabellen zu entnehmen.

Vorgehen zur Bestimmung der Clebsch-Gordan Koeffizienten

Der Ausgangszustand:

$$|j, m\rangle := |j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2, m_1=j_1, m_2=j_2\rangle \left(\equiv |j_1\rangle |j_2\rangle \right)$$

ist so gewählt, dass J_z maximal ist, dieser Zustand ist eindeutig.

1. Erzeuge Zustände mit gleichen $j = j_1 + j_1$ mit Hilfe von $J^- = J_1^- + J_2^-$:

$$\begin{aligned} J^- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= a_{j_1+j_2, j_1+j_2}^- |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ &= (J_1^- + J_2^-) |j_1\rangle |j_2\rangle = a_{j_1, j_1}^- |j_1 - 1\rangle |j_2\rangle + a_{j_2, j_2}^- |j_1\rangle |j_2 - 1\rangle \end{aligned}$$

Multipliziere $\langle j_1 - 1 | \langle j_2 |$ bzw. $\langle j_1 | \langle j_2 - 1 |$ an die Gleichung, sodass unter ausnutzen der Normierung und Orthogonalität die Gleichung nach den Clebsch-Gordan-Koeffizient umgestellt werden kann:

$$\begin{aligned} C_{j_1-1, j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2-1} &= \frac{a_{j_1 j_1}^-}{a_{j_1+j_2, j_1+j_2}^-} \\ \text{Bzw.} \\ C_{j_1, j_2-1}^{j_1+j_2, j_1+j_2-1} &= \frac{a_{j_2 j_2}^-}{a_{j_1+j_2, j_1+j_2}^-} \end{aligned}$$

2. Konstruiere $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$

Dieser Zustand ist orthogonal zu (5), somit ergibt sich:

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = C_{j_1, j_2-1}^{j_1+j_2, j_1+j_2-1} |j_1 - 1, j_2\rangle - C_{j_1-1, j_2}^{j_1+j_2, j_1+j_2-1} |j_1, j_2 - 1\rangle$$

Die J_z -Quantenzahl ist wiederum maximal, mit Schritt 1 lässt sich nun fortfahren. Durch rekursives Anwenden dieser Schritte können die restlichen Clebsch-Gordan-Koeffizienten berechnet werden.

1.2 Zeitabhängige Störungstheorie

1.2.1 Zeitabhängigkeit in der Schrödingertheorie

Gesucht ist eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung (SGL)

$$i\hbar \partial_t \psi(t) = \mathcal{H}(t) \psi(t)$$

$$\text{mit dem Hamiltonoperator } \mathcal{H}(t) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$$

Wenn das Potential $V(\vec{r}, t)$ zeitunabhängig ist, lässt sich der Ansatz

$$\psi(t) = e^{\frac{iEt}{\hbar}} \psi$$

verwenden:

$$\rightarrow E\psi = \mathcal{H}\psi$$

$$\rightarrow \text{EW ist } E_n \text{ zum EZ } \psi_n$$

Die Allgemeine Lösung ergibt sich aus dem Superpositionsprinzip:

$$\psi(t) = \sum_n c_n e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n$$

Die c_n sind komplexe Koeffizienten, die von den Anfangsbedingungen abhängen.

Häufig ist das Potential V separierbar in einen zeitunabhängigen und einen zeitabhängigen Anteil.

Die Hamiltonfunktion ergibt sich dann als:

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'(t)$$

Eine allgemeine Lösung ist $\psi(t) = \sum_n c_n(t) \psi_n$, wobei ψ_n die Eigenzustände von $\hat{\mathcal{H}}_0$ sind.

1.2.2 Zeitunabhängige Störungstheorie

Die Störung sei zeitunabhängig. So lässt sich der Hamiltonoperator in einen ungestörten und einen gestörten Anteil aufspalten:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}'$$

Hierbei ist λ ein dimensionsloser Entwicklungsparameter:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \end{aligned}$$

Für nicht entartete Eigenwerte folgt aus Gleichung (5):

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \psi_n^{(0)} | \mathcal{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle \\ |\psi_n^{(1)}\rangle &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \mathcal{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

Entartung: Zunächst wird \mathcal{H}' im Unterraum $E_n^{(0)}$ diagonalisiert

1.2.3 Zeitabhängigkeiten in der Quantenmechanik

Bisher haben wir uns nur mit dem **Schrödingerbild** befasst:

- Zustandsvektoren waren zeitabhängig $|\psi(t)\rangle$ gemäß der Schrödingergleichung

$$i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \mathcal{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

- Operatoren $A(t)$ können explizit von der Zeit abhängen. Z.B. kann ein Potential explizit von der Zeit abhängen: $V = V(\vec{r}, t)$

- Der Erwartungswert, gemittelte Messergebnisse der Observablen:

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle$$

- Für zeitunabhängigen Hamiltonoperator ist eine formale Lösung:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$$

- Der Operator $e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}$ wird häufig unitärer Zeitentwicklungsoperator U genannt.

Eine alternative Darstellung bei der die Zeitabhängigkeit in den Operatoren steckt, ist die **Heisenberg -Bild** Darstellung.

Definition:

- Zustand $|\psi\rangle_H := e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle$
- Operatoren $A_H(t) = e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} A(t) e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}$
(gilt nur bei zeitunabhängigen Hamiltonoperatoren)
- Erwartungswert bleibt unverändert:

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle &= \left\langle \psi \left| e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} A(t) e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \right| \psi \right\rangle \\ &=: {}_H \langle \psi | A_H(t) | \psi \rangle_H \end{aligned}$$

Die Zeitentwicklung ist bestimmt durch die Operatorengleichung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H(t) &= \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} A(t) e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \right) \\ &= e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \underbrace{\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} A(t) - \frac{i}{\hbar} A(t) \mathcal{H} + \frac{\partial}{\partial t} A(t) \right)}_{= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, A]} e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \\ &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, A_H(t)] + \left(\frac{\partial}{\partial t} A(t) \right)_H \end{aligned}$$

Die oben stehende Gleichung wird auch **Heisenberg Gleichung** genannt.

Für zeitabhängige Probleme wird im Folgenden eine gemischte Darstellung eingeführt.

Dirac- oder Wechselwirkungsbild

Es sei $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + V(t)$.

Definition:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle \\ A_I(t) &= e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} A(t) e^{-\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} \end{aligned}$$

Die Bewegungsgleichung ist:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle_I &= e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} (-\mathcal{H}_0 + i\hbar \partial_t) |\psi(t)\rangle \\ \text{durch Einsetzen der Schrödingergleichung} &= e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} \underbrace{(-\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}(t))}_{V(t)} |\psi\rangle \\ &=: V_I(t) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned}$$

Damit ist die Zeitentwicklung in Wechselwirkungsbild allein durch V_I bestimmt!

Das $_I$ steht für das englische Wort „Interaction“ für Wechselwirkung:

Allgemeine Lösung der Schrödingergleichung im Wechselwirkungs (I)-Bild

Anfangsbedingungen : $|\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$

Integriere Gleichung (5):

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_I(t') |\psi(t')\rangle_I$$

Einsetzen der linken Seite in die rechte führt auf:

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_I(t') |\psi_0\rangle + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') |\psi(t'')\rangle$$

Durch wiederholtes Einsetzen der linken Seite in die rechte, entsteht eine unendliche Summe:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \cdot V_I(t_1) V_I(t_2) \cdots V_I(t_n) |\psi_0\rangle \\ &=: U_I(t, 0) |\psi_0\rangle \end{aligned}$$

$U_I(t, 0)$ ist der Zeitentwicklungsoperator, in ihm stehen zeitabhängige Operatoren, die nach den Zeiten geordnet sind, sodass die Zeiten von rechts nach links zunehmen (folgt aus den Integralgrenzen).

Definition Zeitordnungsoperator:

$$T(A(t)B(t')) = \begin{cases} A(t)B(t') & t > t' \\ B(t')A(t) & t < t' \end{cases}$$

Der Zeitordnungsoperator kann zwei Operatoren einfach vertauschen, ohne dass ihr Kommutator null gleicht.

Mit den Zeitordnungsoperator lässt sich der Zeitentwicklungsoperator schreiben:

$$T \left(\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \cdot V_I(t_1) V_I(t_2) \cdots V_I(t_n) \right)$$

ergänze die Integrale:

$$\begin{aligned} &= T \left(\frac{1}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \cdot V_I(t_1) V_I(t_2) \cdots V_I(t_n) \right) \\ &= T \left(\frac{1}{n!} \left[\int_0^t dt' V_I(t') \right]^n \right) \end{aligned}$$

Die Richtigkeit des Faktors $\frac{1}{n!}$ lässt sich beweisen, indem die Gleichung nach t abgeleitet wird.

Aus Gleichung (5) ergibt sich somit für den Zeitentwicklungsoperator:

$$\begin{aligned} U_I(t, 0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n T \left(\left[\int_0^t dt' V_I(t') \right]^n \right) \frac{1}{n!} \\ &= T \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_I(t') \right] \right) \end{aligned}$$

Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperator:

- Erfüllt die Differentialgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, 0) = U_I(t, 0) V_I(t, 0)$$

- $U_I(0, 0) = 1$
- Zusammensetzregel $U_I(t, t') U_I(t', 0) = U_I(t, 0)$:
- Falls $[V_I(t), V_I(t')] = 0$, so wird der Zeitordnungsoperator überflüssig.

$$U_I(t, 0) = \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' V_I(t') \right]$$

- In niedrigster Ordnung ist der Zeitordnungsoperator ebenfalls überflüssig:

$$U_I(t, 0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_I(t')$$

- In niedrigster Ordnung lautet die Bewegungsgleichung: $|\psi(t)\rangle_I = |\psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' V_I(t') |\psi(0)\rangle$. Die Zeitordnung spielt somit keine Rolle.
- Außerdem gilt: $U_I(t, 0) - 1 = U_I^\dagger(t, 0) = U_I(0, t)$

1.2.4 Übergangswahrscheinlichkeit

Ein System sei in einem Ausgangszustand $|i\rangle$ (meist ist dies ein EZ von \mathcal{H}_0) zur Zeit $t = 0$ präpariert. Bei $t = 0$ wird eine Störung $V(t)$ zugeschaltet. Dann ist die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{i \rightarrow f}(t)$ in einem Endzustand $|f\rangle$ zum Zeitpunkt t gegeben durch:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \langle f | \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Zustand zur Zeit } t} \right|^2$$

Im Dirac-Bild kann dies geschrieben werden als:

$$= \left| \left\langle f \left| e^{\frac{-i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} \right| \psi(t) \right\rangle_I \right|^2$$

Wenn $\mathcal{H}_0 |f\rangle = E_f |f\rangle$ gilt, also $|f\rangle$ ein Eigenzustand ist, folgt:

$$= \left| \underbrace{e^{\frac{-iE_f t}{\hbar}}}_{|\oplus|=1} \langle f | \psi(t) \rangle_I \right|^2$$

In Näherung 1. Ordnung, also für kleine Störungen, ergibt sich dann:

$$\approx \left| \langle f | i \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle f | V_I(t') | i \rangle \right|^2 \quad (5)$$

Wenn $\langle i | f \rangle = 0$ und $|i\rangle \neq |f\rangle$ gilt, folgt:

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \left\langle f \left| e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t'}{\hbar}} V(t') e^{\frac{-i\mathcal{H}_0 t'}{\hbar}} \right| i \right\rangle \right|^2$$

Da H_0 hermitesch ist und $|f\rangle$ und $|i\rangle$ Eigenzustände sind, gilt:

$$= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \exp \left[\frac{i(E_f - E_i)}{\hbar} t' \right] \langle f | V(t') | i \rangle \right|^2$$

Für den Fall, dass V einmal eingeschaltet wird und ansonsten eine zeitunabhängige konstante Störung ist, gilt:

$$\begin{aligned} V(t) &= \begin{cases} 0 & t < 0 \\ V & t > 0 \end{cases} \\ \Rightarrow P_{i \rightarrow f}(t) &= \underbrace{\frac{1}{\hbar^2} |\langle f | V | i \rangle|^2}_{=: M_{fi}} \cdot \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi} t'} \right|^2 = M_{fi} \cdot \left| \frac{1}{i\omega_{fi}} (e^{i\omega_{fi} t} - 1) \right|^2 \\ &= M_{fi} \cdot \frac{\sin^2(\omega_{fi} \frac{t}{2})}{(\frac{\omega_{fi}}{2})^2} \end{aligned}$$

Dabei ist $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$.

Die hier ausgeführte Störtheorie verliert ihre Gültigkeit für den Fall, dass $P_{i \rightarrow f} \approx 1$ gilt. Im Grenzfall $t \ll \frac{2\pi}{\omega_{fi}}$ folgt:

$$\frac{\sin^2(\omega_{fi} \frac{t}{2})}{(\omega_{fi} \frac{1}{2})^2} \approx t^2 \Rightarrow P_{i \rightarrow f}(t) \approx \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | V | i \rangle|^2 t^2$$

Im Grenzfall $t \rightarrow \infty$ hingegen folgt:

$$\frac{\sin^2(\omega_{fi}t\frac{1}{2})}{(\omega_{fi}\frac{1}{2})^2} \approx 2\pi t \delta(\omega_{fi})$$

Damit lässt sich die Übergangswahrscheinlichkeit wie folgt schreiben:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{d}{dt} P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \cdot \delta(E_f - E_i)$$

Diese Gleichung wird auch als „Fermis Goldene Regel“ bezeichnet.

Übergang zum Kontinuum:

Man führt zunächst eine Zustandsdichten der Endzustände ρ_ε ein:

$$\rho(\varepsilon) := \sum_f \delta(\varepsilon - E_f)$$

Für eine beliebige Funktion g kann man dann schreiben:

$$\sum_f g(E_f) = \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) g(\varepsilon)$$

Damit ergibt sich die Übergangsrate von $|i\rangle$ in irgendeinen Endzustand zu:

$$\Gamma_i = \sum_f \Gamma_{i \rightarrow f}(E_f) = \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \varepsilon | V | i \rangle|^2 \delta(\varepsilon - E_i) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \rho(E_i)$$

Die Kontinuums-Näherung ist gültig, wenn der mittlere Niveauabstand δ_{ε_f} viel kleiner ist als das Intervall der betrachteten Zustände Δ_{ε_f} . Dabei kann das Inverse der Energie $\frac{2\pi\hbar}{\delta_f}$ als Zeit betrachtet werden. Das kleinste Energieintervall entspricht somit dem größten Zeitintervall. Je größer t wird, desto genauer wird somit die Messung:

$$\underbrace{\frac{2\pi\hbar}{\delta_{\varepsilon_f}}}_{\text{Kontinuumsnäherung}} \gg t \gg \underbrace{\frac{2\pi\hbar}{\Delta_{\varepsilon_f}}}_{\text{Energie-Zeit-Unschärfe}}$$

Periodische Störung:

Für ein Periodisches Potential folgender Form:

$$V(t) = F^+ \cdot e^{i\omega t} + F^- \cdot e^{-i\omega t}$$

folgt aus Gleichung (5) folgende Übergangswahrscheinlichkeit:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar} \left| \int_0^t dt' \left(e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'} \langle f | F^+ | j \rangle + e^{i(\omega_{fi}+\omega)t'} \langle f | F^- | i \rangle \right) \right|^2$$

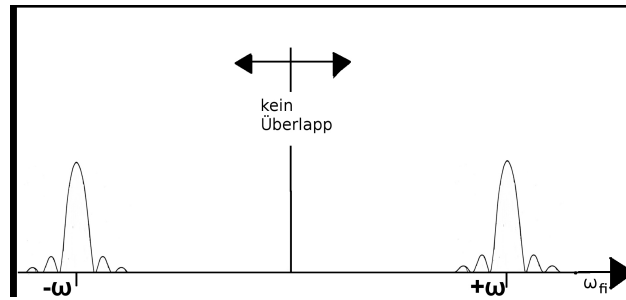


Abbildung 1

Für große Zeiten $\omega t \gg 1$ ergibt sich damit folgendes Bild für die Übergangswahrscheinlichkeiten:

Für die Übergangsrate ergibt sich:

$$\Rightarrow \Gamma_{i \rightarrow f} = \dot{P}_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left[|\langle f | F | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) + |\langle f | F^+ | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \right]$$

Damit unterscheiden sich Anfangs- und Endzustand um die Energie $\hbar\omega$. Die Energieerhaltung wird unter Absorption der Endzustandsenergiedifferenz erhalten:

$$\text{für Absorption:} \quad E_f = E_i + \hbar\omega \quad \text{für Emission:} \quad E_f = E_i - \hbar\omega$$

Die Quantenfeldtheorie ergibt einen Korrekturterm, der später behandelt wird.

1.3 Streutheorie

1.3.1 Streuung eines Wellenpakets

Es soll die Ablenkung eines Teilchens an einem lokalisierten Potential, welches beispielsweise durch ein Atom, einen Kern oder eine Störstelle hervorgerufen werden kann, untersucht werden.

Dazu stelle man sich ein ebenes Wellenpaket $\psi(\vec{r}, 0)$ mit Geschwindigkeit $\frac{\hbar \vec{k}_0}{m}$ vor, welches sich auf ein lokalisiertes Potential zubewegt. In dessen Wechselwirkungsbereich ist das Potential ungleich Null ($V(\vec{r}) \neq 0$). Ein Teil des Wellenpakets $\psi(\vec{r}, 0)$ läuft mit geringerer Intensität als ebene Welle weiter, während ein anderer Teil $\psi(\vec{r}, t \rightarrow \infty)$ als Kugelwelle aus dem Wechselwirkungspotential austritt.

Zu dem Wellenpaket gehört der Hamiltonoperator $\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$. Das einfallende Wellenpaket zur Zeit t lässt sich wie folgt beschreiben:

$$\psi(\vec{r}, t = 0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}}$$

Dabei ist $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ein Eigenzustand des ungestörten Hamiltonoperators $\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$ mit dem Eigenwert $E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Der Eigenzustand des vollständigen Hamiltonoperators mit Energie $E_{\vec{k}}$ ist dann gegeben als:

$$\left(\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + E_{\vec{k}} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

Die Entwicklung des Eigenzustands $\psi(\vec{r}, 0)$ nach $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ liefert dann:

$$\psi(\vec{r}, 0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) a_{\vec{k}}$$

Wegen der asymptotischen Form $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ der $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ sind die $a_{\vec{k}}$ die selben wie in Gleichung (6). Das heißt es kommen keine gebundenen Zustände vor, denn diese würden per Definition für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ verschwinden.

Die Zustände zu beliebiger späteren Zeiten $t > 0$ ergeben sich zu:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) a_{\vec{k}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\vec{k}} t}$$

Die Koeffizienten $a_{\vec{k}}$ sind dabei näherungsweise dieselben, wenn $\psi(\vec{r}, 0)$ vollständig außerhalb des Potentials liegt und $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}\vec{r}}$ gilt.

Die Zeitentwicklung ist dann mit der obigen Gleichung berechenbar, soll hier jedoch nur qualitativ erläutert werden: Nach der Streuung wird einerseits das Wellenpaket mit geringerer Intensität weiterlaufen und andererseits wird eine gestreute Kugelwelle auslaufen, die jedoch eine winkelabhängige Amplitude besitzt.

1.3.2 Formale Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

Bestimmung der $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ ist mit Hilfe der **Greenschen Funktion** möglich:

$$\underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_{\vec{k}}\right)}_{\text{Stationäre Wellengleichung}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \underbrace{V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})}_{\text{Inhomogenität}} \quad (6)$$

Die Greensche Funktion $G_{\vec{k}}(\vec{r})$ der freien (homogenen) Schrödingergleichung ist definiert als:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_{\vec{k}}\right) G_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Die Lösung dieser Eigenwertgleichung erfolgt über Fourier-Transformation, es folgt die explizite Darstellung:

$$G_{\vec{k}}(r) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot \frac{e^{ikr}}{r}$$

Die Greensche Funktion hat wie vermutet die Form einer auslaufenden Kugelwelle. Damit wird aus Gleichung (6) eine Integralgleichung:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}')$$

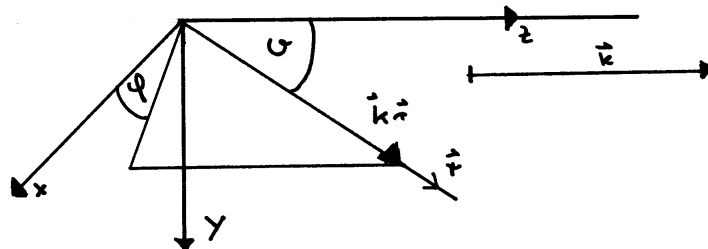
Der Term $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ist die Lösung der homogenen Gleichung, er muss auftauchen, damit die Anschlussbedingungen für asymptotisches Verhalten, also weit vom Potential entfernte Orte $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$, erfüllt ist. In der Asymptotik gilt:

$$k \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| = k \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec{r}\vec{r}'} \approx kr \underbrace{\sqrt{1 - \frac{2\vec{r}\vec{r}'}{r^2}}}_{\ll 1} \approx kr - \vec{k}_{\vec{r}}\vec{r}' \quad \text{mit: } \vec{k}_{\vec{r}} = k \cdot \frac{\vec{r}}{r}$$

Damit wird aus der Welle:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + e^{ikr} \frac{1}{r} f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi) \quad \text{mit: } f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k}_{\vec{r}}\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}') \quad (7)$$

Ebene Welle wird hinter Streupotential mit geringerer Intensität weiterlaufen und die gestreute Welle wird als Kugelwelle auslaufen, wobei die winkelabhängige Streuamplitude $f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi)$, die Information über das Potential enthält. Die Streuamplitude hängt dabei von der Richtung $\frac{\vec{r}}{r}$ der Beobachtung sowie von der Wellenlänge ab. Sie wird zusätzlich durch die exakten Lösung $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ der Schrödingergleichung bestimmt. Ihre Dimension ist die einer Länge.



1.3.3 Streuquerschnitt und Wirkungsquerschnitt

Der **differentieller Streuquerschnitt** ist definiert als:

$$d\sigma = \frac{\text{Strom der nach } d\Omega \text{ gestreuten Teilchen}}{\text{Stromdichte der einfallenden Teilchen}} = \frac{dI(\Omega)}{j_{\text{ein}}} = \frac{j_r r^2 d\Omega}{j_{\text{ein}}}$$



Wobei j_{ein} der Betrag der Stromdichte der einfallenden Welle $\psi_{\vec{k}}(0)$ ist:

$$\vec{j}_{\text{ein}} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi_{\vec{k}}^*(0) \nabla \psi_{\vec{k}}(0) - \psi_{\vec{k}}(0) \nabla \psi_{\vec{k}}^*(0)) = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

j_r ist der Betrag der Stromdichte der Radial auslaufenden Kugelwelle $\psi_{\vec{k}} \propto 1/r \cdot e^{ikr}$ und ergibt sich als:

$$j_r = -\frac{i\hbar}{2m} |\psi_{\vec{k}}^* \nabla \psi_{\vec{k}} - \psi_{\vec{k}} \nabla \psi_{\vec{k}}^*| = \frac{\hbar}{m} \cdot \frac{k}{r^2} |f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{|\vec{j}_{\text{ein}}|}{r^2} \cdot |f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi)|^2$$

Damit lässt sich ein differentieller Streuquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ definieren als:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi)|^2$$

Wenn wir die Asymptotik betrachten, kann die gesamte „Wahrscheinlichkeit“, einer Streuung durch den **totalen Streuquerschnitt** ausgedrückt werden. Dieser ergibt sich wie folgt:

$$\sigma(\vec{k}) = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d\Omega |f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi)|^2$$

Dabei hat σ die Einheit einer Fläche und kann als „Querschnitt“ des Potentials vorgestellt werden.

1.3.4 Lösung des Radialteils der freien Schrödinger Gleichung

Die Eigenfunktionen der freien Schrödinger Gleichung in Kugelkoordinaten besteht aus zwei Teilen: $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sind dabei die gut bekannten Kugelflächenfunktionen. Uns soll im folgenden der Radialteil $R_l(r)$ interessieren.

Der Radialteil der freien Schrödingergleichung hat folgende Form:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \cdot \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R_l(r) = E \cdot R_l(r)$$

Man definiert nun ein $\varrho = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} r = kr$, damit man schreiben kann:

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} + \frac{2}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} + 1 + \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \right) R_l(\varrho) = 0$$

Die Radialgleichung wird durch die spärlichen Bessel und Neumannfunktionen gelöst. Die spärlichen Besselfunktionen $j_l(\varrho)$ haben folgende Eigenschaften:

- Die Integraldarstellung der Besselfunktion ist folgende:

$$j_l(\varrho) = \frac{\varrho^l}{2^{l+1}l!} \cdot \int_{-1}^1 du \, e^{i\varrho u} (1-u^2)^l = \frac{1}{2i^l} \cdot \int_{-1}^1 du \, e^{i\varrho u} P_l(u)$$

Dabei sind $P_l(u)$ die Legendre Polynome.

- Die Besselfunktion ist am Ursprung regulär, für kleine ϱ gilt also $j_l(\varrho) \propto \varrho^l$.
- Das Asymptotische Verhalten ($\varrho \gg l$) der Besselfunktion ist gegeben durch:

$$j_l(\varrho) \approx \frac{1}{\varrho} \cdot \sin\left(\varrho - \frac{\pi}{2} \cdot l\right)$$

Die spärlichen Neumannfunktionen $n_l(\varrho)$ haben folgende Eigenschaften:

- Die Integraldarstellung der Neumannfunktion ist folgende:

$$n_l(\varrho) = j_{-(l+1)}(\varrho) = \frac{1}{2i^{-(l+1)}} \cdot \int_{-1}^1 du \, e^{i\varrho u} P_{-(l+1)}(u)$$

- Die Neumannfunktion ist am Ursprung regulär, für kleine ϱ gilt also $n_l(\varrho) \propto \varrho^{-(l+1)}$.
- Das Asymptotische Verhalten ($\varrho \gg l$) der Besselfunktion ist gegeben durch:

$$n_l(\varrho) \approx -\frac{1}{\varrho} \cdot \cos\left(\varrho - \frac{\pi}{2} \cdot l\right)$$

Die Allgemeine Lösung der Radialgleichung ist eine Überlagerung der spärlichen Bessel- und Neumannfunktionen:

$$R_{l,k}(r) = A_l \cdot j_l(kr) + B_l \cdot n_l(kr)$$

Jede Lösung der Schrödingergleichung muss sich also in Bessel- und Neumannfunktionen zerlegen lassen. Dies soll am Beispiel einer ebenen Welle gezeigt werden. Dazu wählen wir eine zur \vec{z} -Achse rotationssymmetrische ebene Welle: $\vec{k} \parallel \vec{z}$. Für diese kommen nur Kugelflächenfunktionen mit $m = 0$ in Frage, welche die Form von Legendre Polynomen haben: $Y_{l0} = P_l(\cos \vartheta)$. Wir entwickeln die ebene Welle unter Verwendung der Definition. Dazu definieren wir zunächst $\varrho := kr$ und $u := \cos \vartheta$ in Legendre Polynomen:

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{ikr \cos \vartheta} = e^{i\varrho u} = \sum_{l=0}^{\infty} b_l(\varrho) \cdot P_l(u)$$

Wir suchen also die Koeffizienten $b_l(\varrho)$. Aus der Orthogonalität der Legendre Polynome folgt:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 du \, P_l(u) P_{l'}(u) &= \frac{2}{2l+1} \cdot \delta_{ll'} \Rightarrow b_l(\varrho) = (2l+1) i^l \cdot j_l(\varrho) \\ \Rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}} &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \cdot j_l(\varrho) P_l(u) \end{aligned}$$

1.3.5 Partialwellen-Zerlegung

Falls $V(\vec{r})$ nur von $|\vec{r}|$ abhängig ist, also ein Zentralpotential ist, so folgt aus der Rotationssymmetrie um die Einfallssachse, dass $f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi)$ nicht von φ abhängt, sonder nur von ϑ .

Wir zerlegen zunächst die Streuamplitude $f_{\vec{k}}(\vartheta)$ nach Kugelflächenfunktionen $Y_{l0} = P_l(\cos \vartheta)$:

$$f_{\vec{k}}(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \cdot f_l(k) \cdot P_l(\cos \vartheta)$$

Die Koeffizienten $f_l(k)$ werden Partialwellenamplituden genannt. Wir betrachten nun die asymptotischen Streuzustände außerhalb des Potentials und entwickeln diese ebenfalls nach den Kugelflächenfunktionen Y_{l0} :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) R_l(r) P_l(\cos \vartheta)$$

Dabei sind $R_l(r)$ sind Lösungen der radialen Schrödingergleichung mit dem Potential $V(r)$

Die Streuzustände können aber asymptotisch ebenfalls wie in Gleichung (7) als Überlagerung von ebener Welle und Kugelwelle mit Streuamplitude $f_{\vec{k}}(\vartheta)$ geschrieben werden. Wenn wir nun die ebenen Wellen und die Streuamplituden entwickeln und die Asymptotik der Besselfunktion benutzen, folgt aus dem Vergleich der beiden Darstellungen folgende asymptotische Form der $R_l(r)$:

$$R_l(r) \approx i^l j_l(kr) + \frac{e^{ikr}}{r} f_l(k) \approx \frac{1}{2ik} \left((1 + 2ik f_l(k)) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right)$$

Der Effekt des Potentials ist somit eine Änderung des Vorfaktors der auslaufenden Kugelpartialwellen um den Vorfaktor $1 + 2ik f_l(k) =: S_l(k)$, der als S-Matrix bezeichnet wird.

Aus der Unitarität folgt, dass Stromerhaltung gilt, die einlaufende ist also gleich der auslaufenden Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Mit dem Noethertheorem folgt aus der Rotationssymmetrie die Drehimpulserhaltung. Damit ist für jede Partialwelle der Betrag der einlaufenden Welle gleich dem der auslaufenden: $|S_l(k)| = 1$. Der Effekt der Streuung ist somit eine reine Phasenverschiebung der auslaufenden Kugelwelle um eine sogenannte **Streuphase** $\delta_l(k)$:

$$S_l = e^{2i\delta_l(k)} \Rightarrow R_l(r) \approx \frac{1}{2kr} \left(e^{i(kr+2\delta_l(k))} - e^{-i(kr-l\pi)} \right)$$

Damit können wir nun die Partialwellenamplituden und somit auch die Streuamplitude in Abhängigkeit der Streuphase schreiben:

$$\begin{aligned} f_l(k) &= \frac{1}{2ik} (e^{i2\delta_l(k)} - 1) = \frac{1}{k} \cdot e^{i\delta_l(k)} \sin(\delta_l(k)) \approx \frac{\delta_l(k)}{k} \\ \Rightarrow f_k(\vartheta) &= \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin(\delta_l(k)) P_l(\cos \vartheta) \end{aligned}$$

Der Streuquerschnitt $\sigma(\vec{k})$ ergibt sich somit zu:

$$\sigma(k, \vartheta) = \int d\Omega |f_k(\vartheta)|^2 = \int d\Omega \sum_{ll'} (2l+1)(2l'+1) f_l f_{l'} P_l(\cos \vartheta) P_{l'}(\cos \vartheta)$$

Unter Ausnutzung der Orthogonalität der Legendre Polynome folgt dann:

$$= 4\pi \sum_l (2l+1) |f_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k)) \quad (8)$$

Optisches Theorem:

Für den Imaginärteil der Partialwellenamplitude gilt:

$$\text{Im}(f_l(k)) = \frac{1}{k} \sin^2(\delta_l(k)) \Rightarrow \text{Im}(f_k(\vartheta)) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{k} \sin^2(\delta_l(k)) P_l(\cos \vartheta)$$

Für den Anteil der Welle, die das Potential auf gradem Weg durchläuft, aber trotzdem von diesem abgelenkt wird, ist $\vartheta = 0$. Damit gilt für das Legendre Polynom $P_l(1) = 1$ und somit folgt aus Gleichung (8) folgende Darstellung für den Streuquerschnitt:

$$\sigma(k, 0) = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f_k(0)) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k))$$

Diese Gleichung wird als optisches Theorem bezeichnet. Wir sehen also, dass die gesamte Amplitude des gestreuten Anteils der Abschwächung der Amplitude der durchgehenden Welle ($\vartheta = 0$) entspricht. Die Streuung hat ihr Maximum bei $\delta_l(k) = \frac{\pi}{2} + n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$, wo der Streuquerschnitt einen Wert von $\sigma_l(k, 0) = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}$ annimmt. $\sigma_l(k, 0)$ hängt nicht mehr vom Potential, daher gilt das optische Theorem im Allgemeinen nicht nur für Zentralpotentiale.

1.3.6 Bornsche Näherung

Die Bestimmungsgleichung für die Streuamplitude lautet:

$$f_{\vec{k}}(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k}\vec{r}} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}')$$

Dabei kann für schwache Potentiale $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}\vec{r}}$ genähert werden.

Für ein Zentralpotential $V(r)$ ergibt sich durch Entwicklung nach Legendre Polynomen P_l und Besselfunktionen j_l :

$$f_k(\vartheta) = - \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) \cdot \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr \, r^2 \cdot V(r) \cdot j_l^2(kr)}_{=-f_l(k)}$$

Für die Näherung $\delta_l(k) \ll 1$ ergibt sich dann die Streuphase $\delta_l(k)$ zu:

$$\delta_l(k) \approx k f_l = -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr \, r^2 \cdot V(r) \cdot j_l^2(kr)$$

Diese Näherung wird als Bornsche Näherung bezeichnet.

Für ein allgemeines Potential $V(\vec{r})$ ist die Streuamplitude in erster Näherung durch die Fourier-transformierte des Potentials $\tilde{V}(\vec{k})$ gegeben:

$$f_k(\vartheta, \varphi) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\vec{k}_{\vec{r}} - \vec{k})\vec{r}'} V(\vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{k}_{\vec{r}} - \vec{k})$$

1.3.7 Streuung am Yukawa-Potential

Wir betrachten die Streuung an einem abgeschirmten Coulombpotential:

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$$

Eine Fouriertransformation des kugelsymmetrischen Potentials ergibt:

$$\begin{aligned} \text{FT}[V(\vec{r})](\vec{q}) = \tilde{V}(\vec{q}) &= \frac{V_0}{2} \int d^3r \, e^{-i\vec{q}\vec{r}} \frac{e^{-\mu r}}{r} = \dots = \frac{4\pi}{q} \cdot \frac{V_0}{\mu} \int_0^{\infty} dr e^{-\mu r} \sin(qr) \\ &\dots = \frac{4\pi}{\mu^2 + q^2} \cdot \frac{V_0}{\mu} \\ \Rightarrow V(q) &= \frac{4\pi V_0/\mu}{q^2 + \mu^2} \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \vec{q} = \vec{k}_{\vec{r}} - \vec{k} &\Rightarrow q^2 = \vec{k}_{\vec{r}}^2 + k^2 - 2\vec{k}_{\vec{r}}\vec{k} = 2k^2(1 - \cos \vartheta) \\ &= 4k^2 \sin^2(\vartheta/2) \\ \Rightarrow |f_{\vec{k}(\vartheta)}| &= -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot V_0 \cdot \frac{1}{4k^2 \sin^2(\vartheta/2) + \mu^2} \end{aligned}$$

Im Grenzfall $\mu \rightarrow 0$ ergibt sich ein Coulombpotential mit $\frac{V_0}{\alpha} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}$ und es folgt die sogenannte **Rutherfordformel**:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(q_1 q_2 / 4\pi\epsilon_0)^2}{16E_k^2 \cdot \sin^4(\vartheta/2)}}$$

1.3.8 Resonanzstreuung am Potentialtopf

Jenseits der Bornschen Näherung gilt radialen Schrödingergleichung für Partialwelle l :

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2m(E - V(\rho))}{\hbar^2 k^2} \right) R_l(\rho) = 0$$

Mit der Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und der dimensionslosen Koordinate $\rho = kr$ ergeben sich für konstanter Potential $V(r)$, die sphärischen Bessel und Neumann Funktionen als linear unabhängige Lösungen:

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= (-\rho)^l \cdot \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \cdot \frac{\sin(\rho)}{\rho} & n_l(\rho) &= -(-\rho)^l \cdot \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \cdot \frac{\cos(\rho)}{\rho} \\ l=0 \quad \Rightarrow \quad j_0(\rho) &= \frac{\sin(\rho)}{\rho} & n_0(\rho) &= -\frac{\cos(\rho)}{\rho} \end{aligned}$$

Wir wollen nun die Streuung an einem Potentialtopf $V(r)$ betrachten:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases}$$

Für $r < a$ und $k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)} \cdot V_0$ ist die Lösung:

$$R_l(r) = A \cdot j_l(k'r)$$

Dabei ist $R(0)$ regulär und $R_l(a)$ und $R'_l(a)$ sind stetig.

Für $r \geq a$ verhält sich die Lösung asymptotisch, also für $r \rightarrow \infty$, wie folgt:

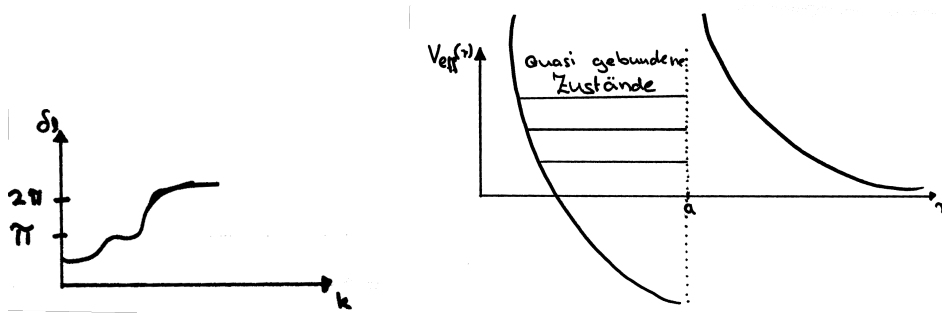
$$\begin{aligned} R_l(r) &= B \cdot j_l(kr) + C \cdot n_l(kr) \\ &\stackrel{l=0}{\approx} \frac{B}{kr} \left(\sin(kr) - \frac{C}{B} \cos(kr) \right) = \frac{B}{kr} \cdot \frac{\sin(kr + \delta_0)}{\cos(\delta_0)} \quad \text{mit: } \tan(\delta_0) = -\frac{C}{B} \end{aligned}$$

Diese Gleichung bestimmt die Streuphase für $l=0$ δ_0 und die asymptotische Entwicklung.

Im allgemeinen $l \neq 0$ kann die Streuphase beliebige Werte annehmen. Ein Maximum nimmt der partielle Streuquerschnitt nach dem optischen Theorem für Werte $\delta_l \approx \frac{\pi}{2} + n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$ an, hier gilt:

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

Die Ursache hierfür ist die sogenannte **Resonanz-Streuung**, das heißt es treten „quasi“ gebundene Zustände auf:



In der Nähe der Resonanz gilt für die Energieabhängigkeit in linearer Näherung $\cot(\delta_0) \approx E - \frac{E_r}{\Gamma}$. Damit folgt die sogenannte **Breit-Wigner-Formel**:

$$\sigma_l(E) = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \cdot \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

Der Streuquerschnitt ergibt sich dann als Summe über die partiellen Streuquerschnitte: $\sigma = \sum_l \sigma_l$.

1.4 Propagatoren und Quantendynamik

1.4.1 Propagatoren und die Greensche Funktion

Propagatoren

Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle &= \hat{\mathcal{H}} |\psi(t)\rangle \\ \text{Ortsdarstellung } \psi(x, t) &= \langle x | \psi(t) \rangle \\ \text{mit } \langle x | x' \rangle &= \delta(x - x') \quad \int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1} \end{aligned} \quad (9)$$

Der Hamiltonoperator sei zeitunabhängig, somit ergibt sich die Lösung der Schrödingergleichung zu

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}\frac{t-t'}{\hbar}} |\psi(t')\rangle.$$

Füge eine $\mathbb{1}$ aus Gleichung (9) ein und multipliziere $\langle x|$ von links dran:

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle x | \psi(t) \rangle}_{\psi(x,t)} &= \int dx' \underbrace{\langle x | e^{-i\hat{\mathcal{H}}\frac{t-t'}{\hbar}} | x' \rangle}_{K(x,t;x',t')} \cdot \underbrace{\langle x' | \psi(t') \rangle}_{\psi(x',t')} \\ K &\hat{=} \text{Propagator} \\ \Rightarrow \psi(x, t) &= \int dx' K(x, t; x', t') \psi(x', t') \end{aligned}$$

Die Kenntnis der Funktion $K(x, t; x', t')$ ist äquivalent zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung. K beschreibt die Amplitude an Ort x zur Zeit t , die von der Ausgangsamplitude bei x' zur Zeit t' verursacht wurde. Der Endzustand ergibt sich als Superposition der Anfangszustände mit Amplitudengewichtung K .

K erfüllt die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t; x', t') = \hat{\mathcal{H}}(x) K(x, t; x', t')$$

mit den Anfangsbedingungen

$$K(x, t; x', t) = \delta(x - x').$$

Greensche Funktion

Wir führen eine **retardierte** Greensche Funktion $G_R(x, t; x', t')$ und eine **avancierte** Greensche Funktion $G_A(x, t; x', t')$ ein:

$$\begin{aligned} G_R(x, t; x', t') &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \cdot K(x, t; x', t') \\ G_A(x, t; x', t') &= \frac{i}{\hbar} \Theta(t' - t) K(x, t; x', t') \end{aligned}$$

Die Theta-Funktion in der retardierten bzw. avancierten Greenschen Funktion sorgt dafür, dass der Operator nur für kausale Zusammenhänge ungleich 0 ist, bzw. für Antikausale. Als kausale

Zusammenhänge werden solche Zusammenhänge bezeichnet, in denen die zeitliche Propagation positiv bestimmt ist.

Setzt man diese Gleichungen in die Bewegungsgleichung ein, so folgt

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t G_R(x, t; x', t') &= i\hbar\frac{-i}{\hbar}\left(K(x, t; x', t')\underbrace{\partial_t\Theta(t-t') + \Theta(t-t')\partial_t}_{\delta(t-t')}K(x, t; x', t')\right) \\ \Rightarrow K(x, t; x', t') \cdot \delta(t-t') &= K(x, t'; x', t) = \delta(x-x') \end{aligned}$$

Somit ergibt sich für die Bewegungsgleichung

$$(i\hbar\partial_t - \hat{\mathcal{H}})G_R(x, t; x', t') = \delta(x-x')\delta(t-t').$$

Für die avancierte Greensche Funktion G_A verläuft die Rechnung analog, das Ergebnis ist identisch. Daher ist diese Differentialgleichung nicht hinreichend für die Unterscheidung zwischen retardierter und avancierter Greenscher Funktion.

Da die Greensche Funktion eine inhomogenen Differentialgleichung erfüllt, ist sie im Fourierraum sehr leicht lösbar.

Beispiel:

Die Greensche Funktion eines freien Teilchens mit der Hamiltonfunktion $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\nabla^2}{2m}$

$$\begin{aligned} G(x, t; 0, 0) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{dk}{2\pi} e^{i(kx - \omega t)} G(\omega, k) \\ G(\omega, k) &= \frac{\frac{1}{\hbar}}{\omega - \omega(k)} \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \end{aligned}$$

Problem:

Diese Greensche Funktion ist singulär für $\omega = \omega(k)$, sodass die Kausalität in diesem Fall unklar ist.

Lösung:

$$\begin{aligned} G_R(\omega, k) &= G(\omega + i\delta, k) \\ G_A(\omega, k) & \end{aligned}$$

Der Limes $\lim_{\delta \rightarrow 0}$ soll in der Übung nachvollzogen werden.

Die Fouriertransformation führt zu:

$$G_R(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\delta - \omega(k)}$$

Das Wegintegral ist über das Residuenkalkül berechenbar.

$$\oint f(z)dz = 2\pi i \sum_n \text{Res}(f(z), z_n)$$

1. Fall $t < 0$, Weg a

$$\int_{\curvearrowright} \rightarrow e^{|\omega_c|t} \xrightarrow{\lim(\omega_c \rightarrow \infty)} \infty$$

2. Fall $t > 0$ Weg b

$$\int_{\curvearrowleft} \rightarrow e^{-|\omega_c|t} \xrightarrow{\lim(\omega_c \rightarrow \infty)} 0$$

Für uns ist nur der Pol bei $\omega = \omega(k) - i\delta$ relevant. Das Residuum für $t > 0$ ergibt sich zu:

$$I = \oint_b f(z)dz = -2\pi i \text{Res}(f(z), z_0) \quad z_0 = \omega(k) - i\delta$$

$$\text{Res}(f(z), z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) f(z)$$

$$\Rightarrow I = \lim_{\omega \rightarrow \omega(k) - i\delta} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\delta - \omega(k)} = e^{-i\omega(k)t}$$

$$\Rightarrow \boxed{G_R(t, k) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) e^{i\omega(k)t}} \quad t > 0$$

$$\text{analog ergibt sich: } G_A(t, k) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) e^{-i\omega(k)t} \quad t < 0$$

Hierdurch ist die Kausalität bewahrt.

$$\int \frac{dk}{2\pi} e^{i(kx - \omega(k)t)} = \int \frac{dk}{2\pi} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}$$

Der Exponent der e-Funktion ergibt sich zu

$$i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t) = -i\frac{\hbar}{2m}t(k - \frac{mx}{\hbar t})^2 + i\frac{\hbar t}{2m} \frac{m^2 x^2}{\hbar^2 t^2}$$

$$\Rightarrow \int dx e^{ix^2} \quad \text{Fresnelintegral}$$

Die Fouriertransformation der Greenschen Funktion ergibt eine dem mit t zerlaufenden Gauß-sches Wellenpaket ähnliche Funktion:

$$= \boxed{\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}}}$$

$$\Rightarrow K(x, t; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')}} \exp\left(\frac{im(x - x')^2}{2\hbar(t - t')}\right)$$

$$\text{allg. Lösung } \psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int dx' \exp\left(\frac{im(x - x')^2}{2\hbar(t - t')}\right) \psi(x', x, 0)$$

In drei Dimensionen lässt sich die Koordinate x einfach durch den Ortsvektor \vec{r} ersetzen ($\rightarrow \psi(\vec{r}, t)$). Und der Vorfaktor des Propagator erhält einen kubischen Exponenten.

Der Propagator kann durch die Eigenfunktion des Hamiltonoperators ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} K(x, t; x', t') &= \sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') e^{-iE_n \frac{(t-t')}{\hbar}} = \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | x' \rangle e^{-iE_n \frac{(t-t')}{\hbar}} \\ &= \sum_n \langle x | e^{-i\hat{H} \frac{t}{\hbar}} | n \rangle \langle n | e^{i\hat{H} \frac{t'}{\hbar}} | x' \rangle = \langle x, t | x', t' \rangle \end{aligned}$$

Physikalische Bedeutung des Propagators

K = Wahrscheinlichkeitsamplitude für

$$\begin{aligned} (x', t') &\longrightarrow (x, t) \quad t > t' \\ K(x, t; x', t') &= \langle x | e^{-i\hat{H} \frac{(t-t')}{\hbar}} | x' \rangle. \end{aligned}$$

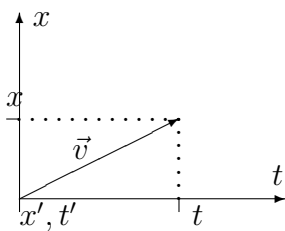
- Propagator K besitzt dieselbe Information wie die Schrödingergleichung
- K hängt direkt mit der Greenschen Funktion und der Schrödingergleichung zusammen
- Kenntnis von K entspricht der allgemeinen Lösung der Schrödingergleichung
- K ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude

1.4.2 Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik

Zum Beispiel ein freies Teilchen

$$K(x, x') \sim \exp \frac{im(x - x')^2}{2\hbar(t - t')}.$$

Vergleiche den Propagator mit der klassischen Wirkung S .



$$x_{kl}(t'') = x' + (x - x') \frac{t'' - t'}{t - t'}$$

$$S_{kl}(x, t; x', t') = \int_{t'}^t dt'' \frac{-m}{2} \dot{x}^2(t'')$$

$$K \sim \exp \left(i \frac{S}{\hbar} \right)$$

\longrightarrow Quantenmechanischer Propagator hängt mit der klassischen Wirkung zusammen!

Betrachte

$$e^{-i\hat{H} \frac{t}{\hbar}} = \left(e^{-i\hat{H} \frac{\Delta t}{\hbar}} \right)^N \quad \text{mit } \Delta t = \frac{t}{N}$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad e^{-i(\hat{T} + \hat{V}) \frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-i\hat{T} \frac{\Delta t}{\hbar}} \cdot e^{-i\hat{V} \frac{\Delta t}{\hbar}} + O(\Delta t^2)$$

Für die obige Umformung wurde die Hausdorff-Formel ($e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \cdot e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{12}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]-\frac{1}{12}[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]+\dots}$) verwendet. Die Eigenzustände von \hat{T} und \hat{V} seien bekannt. So ergibt sich:

$$\langle x | \underbrace{e^{-i\hat{H}\frac{\Delta t}{\hbar}} \cdot e^{-i\hat{H}\frac{\Delta t}{\hbar}} \dots e^{-i\hat{H}\frac{\Delta t}{\hbar}}}_{N\text{-mal}} | x' \rangle = \langle x | \underbrace{e^{-i\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{\hbar}}}_{N\text{-mal}} | x' \rangle \quad (10)$$

Fügen zwischen den N $e^{-i\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{\hbar}}$ jeweils die Identität ($\mathbb{1} = \int dx_n \int dp_n |x_n\rangle \langle x_n| p_n\rangle \langle p_n|$) ein. Die Identität lässt sich wie folgt umformen.

$$\mathbb{1} = \int dx_n \int dp_n |x_n\rangle \underbrace{\langle x_n | p_n\rangle \langle p_n |}_{\frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{ix_n p_n}{\hbar}}} = \int dx_n \int dp_n |x_n\rangle \langle p_n| \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{ix_n p_n}{\hbar}}$$

Gleichung (10) lässt sich nun umschreiben zu:

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \langle x | e^{-i\hat{H}\frac{t}{\hbar}} | x' \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^{N-1} dx_n \int \prod_{n=1}^N dp_n \cdot \exp \left[-i \frac{\Delta t}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \left(T(p_{n+1}) - V(x_n) - p_{n+1} \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} \right) \right] \\ & \quad (x_0=x', x_N=x) \end{aligned}$$

Der Propagator ist komplett berechnet und auf klassische Integrale zurückgeführt! Es wurde folgende Nebenrechnung benutzt:

$$\begin{aligned} & \langle x_{n+1} | p_{n+1} \rangle \langle p_{n+1} | e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}T(\hat{p})} e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}V(\hat{x})} | x_n \rangle \\ &= e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}(T(p_{n+1})+V(x_n))} \cdot \underbrace{\langle p_{n+1} | x_n \rangle \langle x_{n+1} | p_{n+1} \rangle}_{\exp(-i\frac{p_{n+1}x_n}{\hbar} + i\frac{p_{n+1}x_{n+1}}{\hbar})} \\ &= \exp \left[-i \frac{\Delta t}{\hbar} \cdot \left(T(p_{n+1}) + V(x_n) + \frac{p_{n+1}(x_n - x_{n+1})}{\Delta t} \right) \right] \end{aligned}$$

Falls die kinetische Energie quadratisch in p ist, also $T(p) = \frac{p^2}{2m}$, so können alle Integrale über p_n ausgeführt werden.

$$\begin{aligned} & \int dp \exp \left[-i \frac{\Delta t}{2m\hbar} p^2 + ip \frac{\Delta x}{\hbar} \right] = \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{i\Delta t}} \exp \left[i \frac{\Delta t m \Delta x^2}{2\hbar \Delta t^2} \right] \\ \Rightarrow & K = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t}} \right)^N \int \prod_{n=1}^{N-1} dx_n \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\Delta t^2} - V(x_n) \right) \right] \\ & \quad (x_0=x', x_N=x) \end{aligned}$$

Grenzübergang $N \rightarrow \infty$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \Delta t \sum_{n=0}^{N-1} \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\Delta t^2} - V(x_n) = \int_t^{t'} dt'' \underbrace{\left(\frac{m}{2} \dot{x}^2(t'') - V(x(t'')) \right)}_{\text{klass. Form der Wirkung}} = S[x]$$

Führe eine abkürzende Schreibweise ein:

$$\int_{x(t')=x', x(t)=x} \mathcal{D}x := \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar m}{i\Delta t}}^N \int \prod_{n=0}^{N-1} dx'_{(x_0=x', x_N=x)}$$

$$\Rightarrow \left\langle x \left| e^{-\hat{H} \frac{t}{\hbar}} \right| x' \right\rangle = \int_{x(t')=x', x(t)=x} \mathcal{D}x \quad e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt'' \mathcal{L}(x, \dot{x})}$$

Bemerkungen:

- Quantenmechanischer Propagator ist durch klassische Integrale ausgedrückt (jedoch unendlich viele) \rightarrow Quantenmechanik ohne Operatoren (Feynman, 1948).
- Physikalischer Inhalt
Die Übergangswahrscheinlichkeit ist gegeben durch die Summe über alle mögliche Pfade mit gegebenen Anfangs- und Endpunkten. Gewichtungsfaktor ist der Phasenfaktor mit der klassischen Wirkung in Einheiten von \hbar . Pfade mit einer größeren Abweichung von der klassischen Wirkung besitzen eine große Phase.
- Für die meisten Pfade ist der Phasenfaktor stark oszillierend und sie tragen nicht zum Integral bei. Die Ausnahme sind die klassischen Pfade, die durch eine stationäre Wirkung

$$S[x_{cl.}] \quad \text{mit} \quad \delta[x_{cl.}] = 0$$

gekennzeichnet sind.

- Die Pfadintegralformulierung ist eine elegante alternative zur Operator basierten Quantenmechanik. Die Gewichtung zeigt wie die klassische Wirkung in der Quantenmechanik auftaucht. In der Quantenfeldtheorie, in der Statistischen Mechanik und in der Finanzphysik wird die Pfadintegralmethode benutzt.

Beispiel: Tunneln aus metastabilem Zustand

Wir betrachten einen eindimensionalen Tunnelprozess in x -Richtung vom Punkt 0 zum Punkt a an einem Potentialtopf $V(x)$. Der Pfad extremaler Wirkung ergibt sich in diesem Fall für imaginäre Zeiten: $t \rightarrow i\tau$. Die Bewegungsgleichung kann somit in Abhängigkeit von τ geschrieben werden als:

$$m\partial_t^2 x = -\partial_x V(x) \xrightarrow{t \rightarrow i\tau} m\partial_\tau x = \partial_x V(x)$$

Dies entspricht der Bewegung im Potential mit umgedrehten Vorzeichen. Wir können ohne Beschränkung der Allgemeinheit $T - V = \text{const.} =: 0$ setzen, so dass sich $\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 = V(x)$ ergibt. Damit folgt für $S_{\text{inst.}}$:

$$S_{\text{inst.}} = \int_0^\tau d\tau' \underbrace{\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau'}\right)^2}_{=m\left(\frac{dx}{d\tau'}\right)^2} + V(x) = \int_0^\tau d\tau' \frac{dx}{d\tau'} \sqrt{2mV(x)} = \int_0^a dx \sqrt{2mV(x)}$$

Der führende Ausdruck im Propagator ist damit der Näherungsausdruck für die Tunnelamplitude, wie er sich aus der Wentzel–Kramers–Brillouin (WKB) Methode ergibt:

$$K(a, \tau, 0, 0) \approx e^{-\frac{S_{\text{inst.}}}{\hbar}} = e^{\int_0^a dx \frac{\sqrt{2mV(x)}}{\hbar}}$$

Beispiel: Statistische Mechanik eines Teilchens

Die Zustandssumme Z eines Teilchens im Potential $V(x)$ ist in der statistischen Mechanik gegeben durch:

$$Z = \text{Sp}(e^{-\beta\mathcal{H}}) = \int dx \langle x | e^{-\beta\mathcal{H}} | x \rangle \quad \text{mit: } \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Dies entspricht grade dem quantenmechanischen Propagator $\langle x | e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} | x \rangle$ in imaginärer Zeit: $t \rightarrow i\hbar\beta$. Somit können wir ihn durch folgendes Pfadintegral ausdrücken:

$$\langle x | e^{-\beta\mathcal{H}} | x \rangle = \int_{x(0)=x, x(\beta)=x} \mathcal{D}x \quad e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x)}$$

Dies entspricht der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im thermischen Gleichgewicht.

Das Pfadintegral berücksichtigt dabei die quantenmechanischen Fluktuationen, welche proportional zu Δx sind. Es gilt:

$$\Delta x \propto \frac{\hbar}{\sqrt{mk_B T}} =: \lambda_{\text{therm}}$$

λ_{therm} wird als thermodynamische De-Broglie-Wellenlänge bezeichnet.

Im klassischen Grenzfall, dass sich $V(x)$ auf der Scala von λ_{therm} nur wenig ändert ergibt sich dann die klassische Zustandssumme mit dem richtigen Vorfaktor:

$$\langle x | e^{-\beta\mathcal{H}} | x \rangle \approx e^{-\beta V(x)} \cdot \underbrace{\int_{x(0)=x, x(\beta)=x} \mathcal{D}x \quad e^{-\frac{m}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2}}_{=K_{\text{frei}}(x, -i\hbar\beta; x, 0) = \sqrt{\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}}} \approx \frac{1}{\lambda_{\text{therm}}} \cdot e^{-\beta V(x)}$$

1.4.3 Eichtransformationen

Hamiltonoperator eines Teilchens in einem elektromagnetischen Feld:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi \\ \text{mit } \vec{A}(\vec{r}, t) &\hat{=} \text{Vektorpotential} \\ \phi(\vec{r}, t) &\hat{=} \text{skalares Potential} \end{aligned}$$

Definition

Geschwindigkeitsoperator (im Heisenbergbild)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\vec{r} &= -\frac{i}{\hbar} [\vec{r}, \hat{\mathcal{H}}] = -\frac{i}{2m\hbar} [\vec{r}, \vec{p}^2 - q\vec{p}\vec{A} - q\vec{A}\vec{p}] \\
&= -\frac{1}{m}(\vec{p} - q\vec{A}) =: \vec{v}
\end{aligned}$$

Die Komponenten der Geschwindigkeit vertauschen nicht untereinander.

$$\begin{aligned}
[v_i, v_j] &= -\frac{q}{m^2} ([p_i, A_j] + [A_i, p_j]) = \frac{i\hbar q}{m^2} (\partial_i A_j - \partial_j A_i) \\
&= \frac{i\hbar q}{m^2} \varepsilon_{ijk} B_k \quad \vec{B} = \text{rot} \vec{A}
\end{aligned}$$

$$\implies \vec{v} \times \vec{v} = \frac{iq\hbar}{m^2} \vec{B}$$

Damit folgt für den Hamiltonoperator:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 + q\phi(\vec{r}, t)$$

Die **Stromdichte** ist mit der Transformation

$$\underbrace{-i\hbar\nabla}_{\vec{p}} \rightarrow \underbrace{-i\hbar\nabla - q\vec{A}}_{m\vec{v}}$$

wie folgt angegeben.

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= \frac{1}{2m} \left[\psi^* (-i\hbar\nabla + q\vec{A})\psi - ((i\hbar\nabla - q\vec{A})\psi^*)\psi \right] \\
&= \frac{-i\hbar}{2m} \left(\psi^* (\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi \right) - \frac{q}{m} \cdot |\psi|^2 \vec{A}
\end{aligned}$$

Die Stromdichte erfüllt die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_t |\psi|^2 + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

Führen Eichtransformationen an den Potentialen durch:

$$\begin{aligned}
\vec{A} \rightarrow \vec{A}' &= \vec{A} + \nabla \Lambda \\
\phi \rightarrow \phi' &= \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}
\end{aligned}$$

Diese Eichtransformationen ändern das \vec{E} - und \vec{B} -Feld nicht, aber verändern den Hamiltonoperator.Behauptung: Durch eine lokale Phasentransformation wird die Eichinvarianz der Theorie erreicht

$$\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi'(\vec{r}, t) = \underbrace{e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda(\vec{r}, t)}}_{U(\vec{r}, t)} \psi(\vec{r}, t)$$

Wobei U ein unitären Operator $U^\dagger = U^{-1}$ ist. Die Eichtransformation der Operatoren folgt aus den Erwartungswerten:

$$\begin{aligned} [\vec{r}, U] = 0 &\Rightarrow U \hat{\vec{r}} U^{-1} = \hat{\vec{r}} &\Rightarrow \hat{\vec{r}} \text{ ist invariant} \\ [\hat{\vec{p}}, U] = -i\hbar \nabla U = q(\nabla \Lambda) U &\Rightarrow \hat{\vec{p}} \text{ ist nicht invariant} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} mU^{-1} \vec{v} U &= U^{-1}(\vec{p} - q\vec{A})U = \vec{p} - q(\nabla \Lambda) - q\vec{A} \\ &= \vec{p} - q\vec{A}' = \vec{v}' &\Rightarrow \vec{v} \text{ ist invariant} \end{aligned}$$

Die Schrödingergleichung $i\hbar \partial_t \psi = \mathcal{H} \psi$ ist invariant, wenn für die Transformation des Hamiltonoperators gilt:

$$\mathcal{H}' = U \mathcal{H} U^{-1} + i\hbar (\partial_t U) U^{-1} \Rightarrow i\hbar \partial_t \psi' = \mathcal{H}' \psi'$$

Wegen $\partial_t U = (\partial_t \Lambda) \cdot U \frac{iq}{\hbar}$ gilt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m U \vec{v}^2 U^{-1} &= \frac{1}{2} m \underbrace{U \vec{v} U^{-1}}_{\vec{v}'} \underbrace{U \vec{v} U^{-1}}_{\vec{v}'} = \frac{1}{2} m \vec{v}'^2 \\ q\phi + i\hbar (\partial_t U) U^{-1} &= q\phi - q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} = q\phi' \end{aligned}$$

Fazit

Die Quantenmechanik ist Eichinvariant, wenn wir eine **lokale Eichtransformation** $\psi' = U \psi$ mit $U = \exp(i\Lambda \frac{q}{\hbar})$ durchführen.

Eine solche Transformation ist lokal, da das Λ lokal gewählt wird ($\Lambda = \Lambda(\vec{r}, t)$).

1.4.4 Der Aharonov-Bohm-Effekt

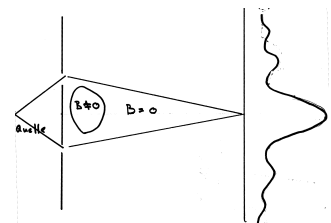
Gedankenexperiment: Im Außenraum ist $\vec{B} = 0$, jedoch gilt für das Vektorpotential $\vec{A} \neq 0$. Nach dem Satz von Stokes gilt:

$$\phi_B = \int_A \vec{B} d\vec{A} = \oint_{\partial A} \vec{A} d\vec{s} \neq 0$$

Da im Außenraum $\vec{B} = \text{rot} \vec{A} = 0$ gelten soll kann das Vektorpotential als reines Gradientenfeld geschrieben werden: $\vec{A} = \nabla \Lambda$.

Wenn wir beispielsweise ein zylindrisches Magnetfeld \vec{B} in Zylinderkoordinaten $(\vec{e}_\varphi, \vec{e}_\rho, \vec{e}_z)$ betrachten gilt:

$$\begin{aligned} \phi_B &= \pi R^2 B \quad \text{ein mögliches } \Lambda \\ \Lambda &= \frac{\phi_B}{2\pi} \varphi \quad \text{bzw.} \quad \vec{A} = \frac{\phi_B}{2\pi \rho} \vec{e}_\varphi \end{aligned}$$



Was passiert mit dem Interferenzbild?

Betrachte einen Propagator von der Quelle \vec{r}_1 zu einem Punkt auf dem Schirm bei \vec{r}_2 :

$$\begin{aligned} & \int_{\vec{r}(t_1)=\vec{r}_1}^{\vec{r}(t_2)=\vec{r}_2} D\vec{r} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \\ \text{Wirkung } S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) + q\vec{r}\vec{A} \right) \\ &= S_{B=0} + q \int_{t_1}^{t_2} dt \vec{r} \vec{A} = S_{B=0} + q \underbrace{\int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{A} d\vec{s}}_{=\Lambda(\vec{r}_2) - \Lambda(\vec{r}_1)} \end{aligned}$$

$\int \vec{A} d\vec{s}$ hängt nur vom Anfangs- und Endpunkt ab, wenn der Weg keinen magnetischen Fluss einschließt. Hieraus folgt, dass der Faktor S_B für alle Wege oberhalb, bzw. unterhalb der Spule gleich ist.

Für die Amplitude gilt:

$$\int_{\text{oben}} D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} S} + \int_{\text{unten}} D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} S} = \int_{\text{oben}} D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \exp\left[i \frac{q}{\hbar} \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{A} d\vec{s}|_{\text{oben}}\right] + \int_{\text{unten}} D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \exp\left[i \frac{q}{\hbar} \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{A} d\vec{s}|_{\text{unten}}\right]$$

Der magnetfeldabhängige **Phasenunterschied** ist

$$\frac{q}{\hbar} \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{A} d\vec{s}|_{\text{oben}} - \frac{q}{\hbar} \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{A} d\vec{s}|_{\text{unten}} = \frac{q}{\hbar} \oint \vec{A} d\vec{s} = \frac{q\phi_B}{\hbar} = 2\pi \frac{\phi_B}{\phi_0}$$

Mit dem Flussquantum

$$\phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{q} = \frac{h}{e}$$

Die Position der Interferenzmaxima hängt vom magnetischen Fluss in der Spule ab.

- Einfluss von \vec{B} obwohl das Teilchen keine Lorentzkraft erfährt. \Rightarrow Rein quantenmechanischer Effekt.
- Interpretationsmöglichkeit
 - In der Quantenmechanik sind \vec{A} und ϕ physikalische Größen, anstelle von \vec{E} und \vec{B} (jedoch muss Eichfreiheit beachtet werden).
 - Behalten \vec{E} und \vec{B} als physikalische Größen bei, aber akzeptieren eine nicht-lokale Wechselwirkung.

1.5 Wahrscheinlichkeitsinterpretation und Messprozess

1.5.1 Messungen und Projektionspostulat

Der quantenmechanische Messprozess ist im Gegensatz zur durch die Schrödingergleichung beschriebenen Zeitentwicklung zwischen den Messungen inhärent nicht deterministisch. Damit der Zustand nach der Messung trotzdem eindeutig festgelegt ist, wird das Projektionspostulat eingeführt. Dieses besagt:

Die Messungen einer Observablen \hat{A} ergeben immer einen der Eigenwerte $\{a_n\}$ mit $\hat{A} |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle$. Der allgemeine Zustand geht beim Messen in den Zustand $|a_n\rangle$ über. Die Wahrscheinlichkeit a_n im Zustand $|\psi\rangle$ zu finden ist $p_n = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$. Der Mittelwert von einer Observablen \hat{A} ist:

$$\begin{aligned}\sum_n a_n p_n &= \sum_n \langle \psi | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle a_n \\ &= \sum_n \langle \psi | \hat{A} | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle\end{aligned}$$

Das Projektionspostulat (PP) ist der zentrale Unterschied zur klassischen Wellenphysik, da jede Messung den Zustand massiv ändert und die weitere Zeitentwicklung vom Messergebnis abhängt, also nicht deterministisch ist.

Definition: Projektionsoperator

$$\hat{P}^2 = \hat{P} \quad \hat{P}^\dagger = \hat{P}$$

Zum Beispiel sei $\hat{P}_a = |a\rangle \langle a|$, für einen normierten Zustand $|a\rangle$. Dann sind die obigen Bedingungen für den Projektionsoperator erfüllt.

$$\hat{P}^2 = |a\rangle \underbrace{\langle a | a \rangle}_{=1} \langle a|.$$

Die möglichen Eigenwerte ergeben sich zu

$$\begin{aligned}\hat{P}_a |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle &\Rightarrow \hat{P}_a^2 |\psi\rangle = \hat{P}_a |\psi\rangle = \lambda \hat{P}_a |\psi\rangle \\ &\Rightarrow ||\hat{P}_a |\psi\rangle|| \neq 0 &\Rightarrow \lambda = 1 \\ &\Rightarrow \hat{P}_a |\psi\rangle = 0 &\Rightarrow \lambda = 0\end{aligned}$$

Wenn $\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a$, dann ist $\hat{Q}_a = \mathbb{1} - \hat{P}_a$ ebenfalls ein Projektionsoperator.

$$\begin{aligned}\hat{Q}_a^2 &= \mathbb{1} - 2\hat{P}_a + \hat{P}_a^2 = \mathbb{1} - \hat{P}_a = \hat{Q}_a \\ &\text{es gilt } \hat{P}_a \hat{Q}_a = 0\end{aligned}$$

Der Zustand sei $|\psi\rangle = \sum_a c_a |a\rangle$. Damit gilt:

$$\langle \psi | \hat{P}_a | \psi \rangle = \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle = |c_a|^2$$

$|c_a|^2$ ist der Erwartungswert des Projektionsoperators.

Außerdem gilt:

$$\begin{aligned}\hat{P}_{a_n} |\psi\rangle &= |a_n\rangle \Rightarrow \sum_{a_n} \hat{P}_{a_n} |\psi\rangle = |\psi\rangle \\ \sum_n \hat{P}_n &= \mathbb{1} \Rightarrow \sum_n p_n = 1 \\ \hat{P}_n \hat{P}_m &= \delta_{mn} \hat{P}_n\end{aligned}$$

Dabei ist $p_n = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle$ die Wahrscheinlichkeit der Messung von $|a_n\rangle$. Nach der Messung befindet sich laut dem Projektionspostulat dann das System in folgendem Zustand:

$$|\psi\rangle \mapsto \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}}$$

Zum Beispiel: Spin $\frac{1}{2}$ Projektion auf $\hat{\sigma}_z$ Eigenzustand.

$$P_+ = \frac{1}{2}(1 + \hat{\sigma}_z) \quad P_- = \frac{1}{2}(1 - \hat{\sigma}_z) = 1 - P_+$$

Für allgemeine Spinrichtung \vec{m}

$$\begin{aligned}P_+(\vec{m}) &= \frac{1}{2} (1 + \vec{m} \hat{\sigma}) = \frac{1}{2} \left(1 + \sum_{i=1}^3 m_i \hat{\sigma}_i \right) \\ P_-(\vec{m}) &= \frac{1}{2} (1 - \vec{m} \hat{\sigma}) = \frac{1}{2} \left(1 - \sum_{i=1}^3 m_i \hat{\sigma}_i \right)\end{aligned}$$

1.5.2 Dichtematrix

Reine und gemischte Gesamtheiten

Statistische Aussagen benötigen häufige Wiederholung eines Experimentes mit identischen Anfangsbedingungen (reine Gesamtheit).

Zum Beispiel $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$

Anzahl der Messungen mit Ergebnis a_n sei N_n :

$$|c_n|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N}$$

Mittelwert:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_n N_n a_n}{N}$$

Ist der Anfangszustand nur statistisch bestimmt (gemischte Gesamtheit).

→ Konzept der Dichtematrix.

Wahrscheinlichkeit für einen Zustand $|n\rangle$ sei p_n mit $\sum_n p_n = 1$: Der Mittelwert einer Observablen ist dann:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle p_n \stackrel{!}{=} \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}) \\ \text{mit: } \text{Sp}(\hat{\sigma}) &= \sum_n \langle n | \hat{\sigma} | n \rangle \\ \text{Dichtematrix: } \hat{\rho} &= \sum_n p_n |n\rangle \langle n| \\ \text{Es gilt: } \text{Sp}(\hat{\rho}) &= 1 \quad \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}\end{aligned}$$

Eine weitere wichtige generelle Eigenschaft der Spur ist ihre Invarianz unter zyklischer Vertauschung:

$$\text{Sp}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Sp}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \text{Sp}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$$

Die Dichtematrix für einen reinen Zustand entspricht dem Projektionsoperator:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| \Rightarrow \hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$$

Für gemischte Zustände hingegen gilt:

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{i,j} p_i p_j |\psi_i\rangle \langle \psi_i| |\psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad \left\{ \begin{array}{l} = \hat{\rho} \quad \forall p_i = 0 \vee 1 \\ \neq \hat{\rho} \quad \forall p_i \neq 0 \vee 1 \end{array} \right.$$

Die Überprüfung der Gleichung $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ ist somit ein Test für die Reinheit.

Von Neumann-Gleichung

Die Bewegungsgleichung der Dichtematrix ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}i\hbar \partial_t |\psi\rangle &= \hat{\mathcal{H}} |\psi\rangle & -i\hbar \partial_t \langle \psi| &= \langle \psi| \hat{\mathcal{H}} \\ \partial_t \hat{\rho} &= \sum_n p_n \{ (\partial_t |n\rangle) \langle n| + |n\rangle (\partial_t \langle n|) \} \\ &= -\frac{1}{\hbar} \sum_n p_n \underbrace{(\hat{\mathcal{H}} |n\rangle \langle n| - |n\rangle \langle n| \hat{\mathcal{H}})}_{=[\hat{\mathcal{H}}, |n\rangle \langle n|]} \\ \Rightarrow &\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}]}\end{aligned}$$

Die umrahmte Gleichung wird die Von Neumann-Gleichung genannt.

Bemerkungen:

- Die Von Neumann-Gleichung gilt für zeitabhängige Hamiltonoperatoren $\partial_t \hat{\mathcal{H}} \neq 0$.

- Sie ist, nicht mit der Heisenberg-Gleichung identisch, in der die Zustände und damit die Dichtematrix zeitunabhängig sind.

Formale Lösung:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(t) &= \underbrace{\hat{U}(t, t_0)}_{\text{Zeitentwicklungsoperator}} \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \\ \Rightarrow \text{Sp}(\hat{\rho}(t)) &= \text{Sp}(U \rho U^\dagger) = \text{Sp}(U^\dagger U \rho) = \text{Sp}(U^{-1} U \rho) \\ &= \text{Sp}(\rho) = 1\end{aligned}$$

In den obigen Umformungen haben wir benutzt, dass man unter der Spur zyklisch vertauschen kann und dass der Zeitentwicklungsoperator eine unitäre Matrix ist. Somit wurde gezeigt, dass die Spur des Dichteoperators zeitunabhängig und gleich eins ist.

Die reine Dichtematrix hat nur in einer Basis die Form $\hat{\rho} = |n\rangle\langle n|$. Ein Basiswechsel, durch den unitären Operator \hat{U} beschrieben, führt auch auf eine andere Dichtematrix:

$$\begin{aligned}|n\rangle &= \hat{U} |m\rangle = \sum_m c_{nm} |m\rangle \\ \Rightarrow \hat{\rho} &= \sum_{m, m'} c_{nm} c_{nm'}^* |m\rangle\langle m'|\end{aligned}$$

Die Eigenschaft $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ bleibt jedoch auch bei Basiswechsel erhalten.

Beispiel Spin $\frac{1}{2}$
Basis sei in „z - Richtung“

$$\begin{aligned}|\uparrow\rangle_z &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & |\downarrow\rangle_z &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \text{EZ von } \sigma_x, \sigma_y & & & & & \\ |\uparrow\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} & |\downarrow\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ |\uparrow\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} & |\downarrow\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Beispiel: Dichtematrix

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{2} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

beschreibt gemischte, unpol. Zustände

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_1^2 &= \frac{1}{4} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{4} |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \frac{1}{2} \hat{\rho}_1 \\ &\longrightarrow \hat{\rho}_1^2 \neq \hat{\rho}_1\end{aligned}$$

vergleiche mit reinen Zustand $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + e^{i\alpha} |\downarrow\rangle)$

$$\hat{\rho}_\alpha = \frac{1}{2} \left(|\uparrow\rangle \langle\uparrow| + |\downarrow\rangle \langle\downarrow| + \underbrace{e^{i\alpha} |\downarrow\rangle \langle\uparrow| + e^{-i\alpha} |\uparrow\rangle \langle\downarrow|}_{\text{Kohärenzen}} \right)$$

Die Kohärenzen sind die Außerdiagonalterme der Dichtematrix $\hat{\rho}_\alpha$. Die Matrixdarstellung sieht dementsprechend wie folgt aus:

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{\rho}_\alpha = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix}$$

Unterschiede in den Mittelwerten:

$$\begin{aligned} \langle\sigma_z\rangle &= \text{Sp}(\hat{\rho}\sigma_z) = 0 && \text{für } \hat{\rho}_1 \text{ und } \hat{\rho}_\alpha \\ \langle\sigma_x\rangle &= \text{Sp}(\hat{\rho}\sigma_x) = \begin{cases} 0 & \text{für } \hat{\rho}_1 \\ \cos(\alpha) & \text{für } \hat{\rho}_\alpha \end{cases} \end{aligned}$$

Dichtematrix von zusammengesetzten Systemen:

Eine reine Dichtematrix hat nur in einer bestimmten Basis die Form

$$\hat{\rho} = |n\rangle \langle n|.$$

Ein Basiswechsel

$$|n\rangle = \hat{U} |n'\rangle = \sum_{n'} c_{nn'} |n'\rangle$$

mit $U^\dagger = U^{-1}$

führt auf die Dichtematrix

$$\hat{\rho} = |n\rangle \langle n| = \sum_{n'n''} c_{nn'} c_{nn''}^* |n'\rangle \langle n''|.$$

Damit besitzt $\hat{\rho}$ nicht nur Diagonalen Elemente.

In einem zusammengesetzten System hat die Dichtematrix die allgemeine Form

$$\hat{\rho} = \sum_{nm,n'm'} \rho_{nm,n'm'} |n\rangle_{\text{I}} |m\rangle_{\text{II}} \langle n'|_{\text{I}} \langle m'|_{\text{II}}$$

Dabei ist $|n\rangle_{\text{I}}$ ein Zustand des Systems I und $|m\rangle_{\text{II}}$ ein Zustand des Systems II.

Dies gilt mit den Einschränkungen

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\hat{\rho}) = 1 &\Rightarrow \sum_{nm} \rho_{nm,nm} = 1 && \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \\ &&& \Rightarrow \rho_{nm,n'm'} = \rho_{n'm',nm}^* \end{aligned}$$

Für reine Zustände im Produktraum $|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} |n\rangle_I |m\rangle_{II}$ gilt ebenfalls $\rho_{nm,n'm'} = c_{nm} c_{n'm'}^*$.

Die partielle Spur über System II ist definiert für einen allgemeinen Operator $A_{nm,n'm'}$ als:

$$\hat{A}_{\text{red}} = \text{Sp}_{II} \hat{A} = \sum_m {}_{II}\langle m | \hat{A} | m \rangle_{II} = \sum_{n,n',m} A_{nm,n'm} |n\rangle_I \langle n'|$$

\hat{A}_{red} ist noch ein Operator im Teilraum I.

Die Messung einer Observablen mit einem bestimmten Wert im System II erfolgt durch den Projektionsoperator $|m\rangle \langle m|$. Die Wahrscheinlichkeit p_m für m ergibt sich über die Spur.

$$p_m = \text{Sp}(|m\rangle \langle m| \hat{\rho}) = \sum_n \rho_{nm,nm}$$

(Durch die Projektion geht die Summe nur noch über die n .)

Die Dichtematrix $\hat{\rho}_f(m)$ ist nach der Messung von m abhängig.

$$\hat{\rho}_f(m) = \frac{1}{P_m} \underbrace{|m\rangle \langle m| \hat{\rho} |m\rangle \langle m|}_{= \langle m | \hat{\rho} | m \rangle |m\rangle \langle m|} = \frac{1}{\sum_n \rho_{nm,nm}} \sum_{nn'} \rho_{nm,n'm} |n\rangle \langle m| \langle m| \langle n'|$$

Der Vorfaktor $\frac{1}{P_m}$ ist zur Normierung, sodass nach der Messung $\text{Sp}(\hat{\rho}_f(m)) = 1$ gilt.

1.5.3 Messprozess nach von Neumann

Der Erwartungswert einer Messung an System I ist:

$$\begin{aligned} \langle \hat{P}_n \rangle_{\hat{\rho}} &= \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{P}_n) = {}_I \langle n | \hat{\rho} | n \rangle_I \\ \text{für den Fall: } \hat{\rho} &= \sum_n p_n |n\rangle_I \langle n| \Rightarrow \langle \hat{P}_n \rangle_{\hat{\rho}} = p_n \end{aligned}$$

Nach dem Projektionspostulat ist der Zustand nach der Messung beschrieben durch folgende Dichtematrix:

$$\hat{\rho} \mapsto \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\text{Sp}(\hat{P}_n \hat{\rho})}$$

Die Messung an System I soll nun durch einen Detektor ausgeführt werden, welcher durch das System II beschrieben wird. Der Zustand im gekoppelten System sei gegeben durch:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} |n\rangle_I |m\rangle_{II}$$

Die Dichtematrix des reinen Zustands ist dann: $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$.

Die Messung einer Observablen mit Wert m im System II ist beschrieben durch den Projektionsoperator $\hat{P}_m = |m\rangle_{II} \langle m|$ und hat die Wahrscheinlichkeit $p_m = \text{Sp}(\hat{P}_m \hat{\rho}) = \sum_n \rho_{nmnm}$. Das

System befindet sich nach der Messung in einem durch folgende Dichtematrix beschriebenen Zustand:

$$\frac{1}{p_m} |m\rangle_{\text{II}} \langle m| \hat{\rho} |m\rangle_{\text{II}} \langle m| = \frac{1}{\sum_n \rho_{nmnm}} \sum_{n,n'} \rho_{nmn'm} |n\rangle_{\text{I}} |m\rangle_{\text{II}} \langle m|_{\text{I}} \langle n|$$

Wir betrachten ein System, welches sich vor der Messung zum Zeitpunkt $t = 0$ in einem Produktzustand befindet:

$$|\psi(0)\rangle = \left(\sum_n c_n |n\rangle_{\text{I}} \right) |0\rangle_{\text{II}}$$

Nach der Wechselwirkung zwischen System I und Detektor II zum Zeitpunkt t befindet sich der (makroskopische) Detektor in einem Überlagerungszustand:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle_{\text{I}} |m(n)\rangle_{\text{II}}$$

Für einen idealen Detektor sollen dabei alle Zustände des Systems I unterschiedbar sein:

$${}_{\text{II}} \langle m(n) | m(n') \rangle_{\text{II}} = \delta_{nn'}$$

Wenn wir nun die Dichtematrix des Systems I betrachten, so ergibt sich für den Fall ohne Messung folgender Zustand:

$$\hat{\rho}_{\text{I}} = \text{Sp}_{\text{II}} \hat{\rho} = \sum_m {}_{\text{II}} \left\langle m \left| \sum_{n,n'} c_n c_{n'}^* |n\rangle_{\text{I}} |m(n)\rangle_{\text{II}} \langle m(n')|_{\text{II}} \langle n'| \right| m \right\rangle_{\text{II}} = \sum_n |c_n|^2 |n\rangle_{\text{I}} \langle n|$$

Die Wechselwirkung mit der Umgebung führt zu einem gemischten Zustand des Systems und die Kohärenzen verschwinden.

Findet hingegen eine Messung durch den Detektor II mit dem Ergebnis $m(n)$ statt, so ist der Zustand nach der Messung in System I ein reiner Zustand der Form:

$$\hat{\rho} \mapsto |n\rangle_{\text{I}} \langle n|$$

Der Zustand des Systems I wird durch eine Messung am Detektor II projiziert. Man spricht auch von der Reduktion des Zustandes bzw. dem Kollaps der Wellenfunktion.

Es lässt sich folgendes Fazit ziehen:

- Die Wechselwirkung mit der Umgebung führt zu Dekohärenzen und ist die Ursache dafür, dass keine makroskopischen Überlagerungen beobachtet werden.
- Die Messung des makroskopischen Messapparats führt ebenfalls zur Reduktion des Systemzustands.
- Bei Hintereinanderschaltung von Messapparaten ist es egal an welcher Stelle die Projektion stattfindet. Dieser Umstand wird auch als sogenannte von Neumann Kette bezeichnet.

Gedanken-Experiment Schrödingers Katze

Ein Spin im Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ wechselwirkt mit einer Katze im Anfangszustand $|\text{leb}\rangle$. Je nach dem Zustand des Spins wird der Zustand der Katze lebendig bleiben $|\text{leb}\rangle$ für $|\downarrow\rangle$ oder tot $|\text{tot}\rangle$ für $|\uparrow\rangle$. Der Gesamtzustand ist

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle |\text{tot}\rangle + |\downarrow\rangle |\text{leb}\rangle)$$

und die Katze ist gleichzeitig tot und lebendig!

1. Es findet Wechselwirkung mit der Umgebung statt, sodass die Kohärenzen verschwinden, die Dichtematrix wird zu

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle |\text{tot}\rangle \langle \text{tot}| \langle \uparrow| + \frac{1}{2} |\downarrow\rangle |\text{leb}\rangle \langle \text{leb}| \langle \downarrow|$$

\implies gemischter Zustand

(Die Katze ist entweder tot oder lebendig.)

2. Nach der Messung (z.B. $|\uparrow\rangle$) kollabiert der Zustand in z.B.

$$\hat{\rho}_f = |\uparrow\rangle |\text{tot}\rangle \langle \text{tot}| \langle \uparrow|$$

3. Der juristische Unterschied der beiden Fälle:

Im ersten Fall ist die Katze schon tot vor der Messung (in 50% der Fälle) und im zweiten Fall wird die Katze durch die Messung getötet (in 50% der Fälle).

1.5.4 Bellsche Ungleichung

Betrachten eine Quelle, die paarweise 2 Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen in einem Spin-Singlett-Zustand aussendet

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle).$$

Die Teilchen fliegen in entgegengesetzten Richtungen. Sie werden von zwei Stern-Gerlach-Detektoren weit voneinander entfernt und weit weg von der Quelle gemessen. Der Detektor I misst bezüglich der Quantisierungsachse \vec{a} , während der Detektor II bezüglich der Quantisierungsachse \vec{b} misst.

Die Messwerte der Spins multipliziert mit $\frac{2}{\hbar}$ sind 1 oder -1. Die Messung bezüglich einer Achse wird als $A_{\vec{a}}$ bzw. $B_{\vec{b}}$ beschrieben.

1. Quantenmechanische Beschreibung

Berechnen die kombinierte Wahrscheinlichkeit $P_{\vec{a}\vec{b}}^{[s]}$ der Messung von $A_{\vec{a}}$ und $B_{\vec{b}}$, mit der Bedingung, dass sich die Teilchen vor der Messung in $|s\rangle$ befindet.

Zu zeigen:

Die Wahrscheinlichkeit $P_{\vec{a}\vec{b}}$ ist von der Reihenfolge unabhängig.

2. Klassische Theorie mit sog. „versteckte Parametern“.

Annahme: In der Quelle werden die Teilchen eins und zwei mit diesem versteckten/verborgenen Parametern λ ausgestattet, die jedes mögliche spätere Messresultat bereits vorherbestimmen.

$A_{\vec{a}} \longrightarrow$ Messergebnis an Teilchen A entlang der Achse \vec{a}

$B_{\vec{b}} \longrightarrow$ Messergebnis an Teilchen B entlang der Achse \vec{b}

Beide Messungen können nur Werte 1 oder -1 annehmen.

A ist unabhängig von \vec{b}

B ist unabhängig von \vec{a}

λ ist unabhängig von \vec{a} und \vec{b}

\implies Lokalitätsannahme

$\rho(\lambda)$ ist eine unbekannte Wahrscheinlichkeitsverteilung der λ s:

$$\int d\lambda \rho(\lambda) = 1$$

Der klassische gemeinsame Erwartungswert für eine Messung von A an I und B an II ist gegeben durch

$$\underbrace{C_{\vec{a}\vec{b}}}_{\text{Korrelator}} = \int d\lambda \rho(\lambda) A_{\vec{a}}(\lambda) B_{\vec{b}}(\lambda)$$

Bedingung:

Die Messungen werden weit weg voneinander durchgeführt, da sonst die Lokalitätsbedingung nicht erfüllt wäre.

Zur Messung an I wird jeweils zufällig eine der beiden Achsen \vec{a} und \vec{a}' gewählt werden und zur Messung II \vec{b} und \vec{b}' . Die Wahl findet in so kurzer Zeit statt, dass keine Kommunikation zwischen Detektor eins und Detektor zwei oder den Detektoren und der Quelle stattfinden kann.

Viele Messungen unter diesen Bedingungen ermöglichen es möglichst viele Werte von λ „auszutesten“.

\implies 4 Erwartungswerte: $C_{\vec{a}\vec{b}}, C_{\vec{a}\vec{b}'}, C_{\vec{a}'\vec{b}}$ und $C_{\vec{a}'\vec{b}'}$.

$$\implies \boxed{-2 \leq C_{\vec{a}\vec{b}} - C_{\vec{a}\vec{b}'} + C_{\vec{a}'\vec{b}} + C_{\vec{a}'\vec{b}'} \leq 2}$$

Die oben umrahmte Ungleichung ist die **Bellsche Ungleichung** in der Form von Clauser, Horne, Shimony und Holt. \Rightarrow CHSH- Ungleichung

3. Zur Berechnung von $C^{(s)} = C_{\vec{a}\vec{b}}^{(s)} - C_{\vec{a}\vec{b}'}^{(s)} + C_{\vec{a}'\vec{b}}^{(s)} + C_{\vec{a}'\vec{b}'}^{(s)}$

Man kann zeigen, dass es Werte für die 4-Richtungen gibt, für die die Bellsche Ungleichung $|C^{(s)}| \leq 2$ verletzt wird. \Rightarrow Bedeutung ?

4. Rechnung zu Punkt 1)

Rotation: allgemeine Rotationsmatrix U .

$$U = e^{-i\frac{\alpha}{2}\vec{n}\vec{\sigma}} = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\vec{n}\vec{\sigma}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

ist eine Drehung um die Achse in \vec{n} um den Winkel α . U ist unitär. Der Singlett Zustand $|s\rangle$ ist Rotationsinvariant.

z.B:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Wir können o.B.d.A. die z-Achse als \vec{a} -Achse wählen. $\vec{b} \rightarrow$ x-y Ebene. θ ist der polare Winkel zwischen \vec{a} und \vec{b} .

Eine Messung von $A_{\vec{a}}$ an $\vec{a} \rightarrow$ kann 1 oder -1 mit der Wahrscheinlichkeit von jeweils $\frac{1}{2}$ ergeben oder falls $B_{\vec{b}}$ an \vec{b} zuerst gemessen wurde \rightarrow 1 oder -1 mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$.

Man misst den Wert 1 \rightarrow Zustand nach der Messung $\frac{|\uparrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ oder man misst den Wert -1 \rightarrow Zustand nach der Messung $-\frac{|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$.

Wir rotieren den Spin des Teilchens zwei um die y-Achse mit der Rotationsmatrix

$$U = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}.$$

Wir führen die Eigenvektoren $|\uparrow\rangle_{\vec{b}}$ und $|\downarrow\rangle_{\vec{b}}$ bezüglich der Achse \vec{b} ein.

\Rightarrow man bekommt in dem 1. Fall: $|\uparrow\rangle \cdot \left(-\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|\uparrow\rangle_{\vec{b}} + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|\downarrow\rangle_{\vec{b}}\right)$

und im 2. Fall $-\left|\downarrow\rangle \cdot \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|\uparrow\rangle_{\vec{b}} + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|\downarrow\rangle_{\vec{b}}\right)$.

$A_{\vec{a}}/B_{\vec{b}}$	1	-1
1	$\frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$	$\frac{1}{2}\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$
-1	$\frac{1}{2}\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$	$\frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$

$$\Rightarrow P = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \text{für} \quad A_{\vec{a}}B_{\vec{b}} = 1$$

$$P = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \text{für} \quad A_{\vec{a}}B_{\vec{b}} = -1$$

Wir messen zuerst $B_{\vec{b}} \Rightarrow$ das Ergebnis ist dasselbe ($\theta = 0$).

Zum Beispiel:

$$\theta = 0 \rightarrow \vec{a} \uparrow \uparrow \vec{b} \rightarrow \text{man erhält } A_{\vec{a}}B_{\vec{b}} = -1$$

$$\theta = \pi \rightarrow \vec{a} \uparrow \downarrow \vec{b} \rightarrow \text{man erhält } A_{\vec{a}}B_{\vec{b}} = 1$$

$$\theta = \frac{\pi}{2} \rightarrow \vec{a} \perp \vec{b} \rightarrow \text{Kombinierte W. sind gleich} = \frac{1}{2}$$

\Rightarrow Die Messergebnisse sind unkorreliert

5. Rechnung zu Teil 2 siehe Übung

6. Rechnung zu Teil 3

Der Erwartungswert für $A_{\vec{a}}B_{\vec{b}}$ ist:

$$\begin{aligned}
 \langle s | (\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{b}\vec{\sigma}) | s \rangle &= \frac{1}{2} (\langle \uparrow\downarrow | - \langle \downarrow\uparrow |) (\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{b}\vec{\sigma}) (\langle \uparrow\downarrow | - \langle \downarrow\uparrow |)^T \\
 &= \dots = \frac{1}{2} (-a_z b_z - (a_x - i a_y)(b_x + i b_y) - (a_x + i a_y)(b_x - i b_y) - a_z b_z) \\
 &= -\vec{a}\vec{b} \rightarrow \langle s | (\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{b}\vec{\sigma}) | s \rangle = -\cos(\theta_{\vec{a}} - \theta_{\vec{b}}) \\
 C^{|s\rangle} &= -\cos(\theta_{\vec{a}} - \theta_{\vec{b}}) + \cos(\theta_{\vec{a}} - \theta_{\vec{b}'}) - \cos(\theta_{\vec{a}'} - \theta_{\vec{b}}) - \cos(\theta_{\vec{a}'} - \theta_{\vec{b}'}) \\
 \text{Z.B.} \quad \theta_{\vec{a}} &= 0, \quad \theta_{\vec{b}} = -\frac{3}{4}\pi, \quad \theta_{\vec{a}'} = \frac{\pi}{2}, \quad \theta_{\vec{b}'} = \frac{-\pi}{4} \\
 \Rightarrow \quad &\boxed{C^{|s\rangle} = 2\sqrt{2} > 2}
 \end{aligned}$$

→ Die Quantenmechanik ist inkonsistent mit der Annahme von Lokalität und versteckte Variablen.

Experimentell wurde dies 1982 von A.Aspect überprüft.

Kapitel 2:

Relativistische Elektrodynamik

2.1 Spezielle Relativitätstheorie

2.1.1 Koordinatentransformation und Newtonsche Mechanik

Newtonsches Gesetz für N- Teilchen ist

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i(t) = \vec{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}_i}$$

mit $V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i < j} V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$

Wir betrachten die Koordinatentransformationen der Form

$$\vec{r}' = \underbrace{\overleftrightarrow{D} \vec{r}}_{\text{Drehung}} + \underbrace{\vec{v}t}_{\text{gleichförmige Bewegung}} + \underbrace{\vec{a}}_{\text{Translation}}$$

Für die Drehmatrix muss gelten $\overleftrightarrow{D}^{-1} = \overleftrightarrow{D}^T$. Die Geschwindigkeit \vec{v} ist bei einer Galileotransformation konstant.

Koordinatensysteme, die durch Galileotransformationen verbunden sind, heißen **Inertialsysteme (IS)**.

Zu zeigen ist: Das Newtonsche Gesetz ist unter den obigen Transformationen forminvariant. Einziger nicht trivialer Fall ist die Drehtransformation, bei der gilt

$$\begin{aligned} \ddot{\vec{r}}'_i &= \overleftrightarrow{D} \ddot{\vec{r}}_i & |\vec{r}'_i - \vec{r}'_j|^2 &= \left(\overleftrightarrow{D} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right)^T \left(\overleftrightarrow{D} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right) \\ (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T \overleftrightarrow{D}^T &= (\vec{r}_i - \vec{r}_j)^T \overleftrightarrow{D}^{-1} \longrightarrow |\vec{r}'_i - \vec{r}'_j|^2 &= |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{F}'_i &= -\frac{\partial}{\partial \vec{r}'_i} V = -\overleftrightarrow{D} \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_i} = \overleftrightarrow{D} \vec{F}_i \\ m_i \ddot{\vec{r}}'_i &= m_i \overleftrightarrow{D} \ddot{\vec{r}}_i = \overleftrightarrow{D} \vec{F}_i = \vec{F}'_i\end{aligned}$$

⇒ Das Newtonsche Gesetz ist forminvariant.

Bemerkung:

- Äquivalente Formulierung:
Die Abstände zweier Punkte sind in allen Inertialsystemen gleich (d.h. $\Delta r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = |\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2| = \Delta r'$).
- Relativitätsprinzip:
In allen Inertialsystemen sind die physikalischen Gesetze gleich.

2.1.2 Elektrodynamik

Wellengleichung im Vakuum:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \vec{E} = 0$$

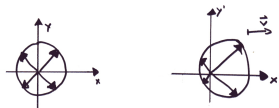
Die Wellengleichung ist forminvariant unter Drehung und Translation, wie beispielsweise $\vec{r}' = \overleftrightarrow{D} \vec{r} + \vec{a}$ oder $E'(\vec{r}', t) = \overleftrightarrow{D} E(\vec{r}, t)$. Eine mögliche Lösung ist: Kugelwelle, definiert durch eine Wellenfront

$$\vec{r}^2 - c^2 t^2 = \text{const.} = 0$$

Was passiert unter $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}t$?

$$(\vec{r}' + \vec{v}t)^2 - c^2 t^2 = \text{const.}$$

→ Die Ausbreitungsgeschwindigkeit hängt von der Richtung ab!
Dies steht im Widerspruch zu der aus den Maxwellgleichungen gefolgerten Wellengleichung. Eine der beiden Theorien muss also falsch sein.



Dies ist im Widerspruch zum Experiment von Michelson und Morley (1887), welches zeigt, dass die Lichtgeschwindigkeit in allen Inertialsystemen gleich ist.

Lösung: Einstein (1905) postuliert, dass die Lichtgeschwindigkeit in allen Inertialsystemen gleich ist.

Konsequenzen:

- Die Galilei-Transformationen sind nicht mehr die korrekte Koordinatentransformation.

- Die Newtonsche Mechanik ist nicht mehr gültig.
- Die Zeitmessung hängt vom Inertialsystem ab. Die Zeit ist nicht mehr absolut.

Beispielsweise sind die Maxwell-Gleichungen nicht invariant unter der Galilei-Transformationen.

→ Einstein ersetzt die Galilei-Transformation durch die Lorentztransformation.

2.1.3 Lorentztransformationen

Gesucht ist die Transformation, die einen Lichtkegel invariant lässt:

$$\vec{r}'^2 - c^2 t'^2 = \vec{r}^2 - c^2 t^2$$

Wir wählen den Ansatz einer linearen Transformation $(\vec{r}, t \rightarrow \vec{r}', t')$ zwischen Inertialsystemen, die sich in x-Richtung mit einer Geschwindigkeit \vec{v} gegeneinander bewegen.

$$\begin{array}{lll} \text{Annahme:} & y' = y & z' = z \\ & t' = \gamma t - \gamma \beta \frac{x}{c} & x' = \gamma x - \gamma \beta t \cdot c \end{array}$$

Der Ursprung sei bei $x' = 0$

$$\begin{aligned} \longrightarrow x = \beta c t = v t &\Rightarrow \boxed{\beta = \frac{v}{c}} \\ \vec{r}'^2 - c^2 t'^2 = \vec{r}^2 - c^2 t^2 &\Rightarrow \dots \Rightarrow \\ \boxed{\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}} \end{aligned}$$

Dies sind die Lorentztransformationen („Boosts“):

$$\begin{aligned} x' &= \frac{x}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{v t}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ t' &= \frac{t}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{v \frac{x}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \end{aligned}$$

Im Grenzfall $v \ll c$ wird aus den Lorentztransformationen die Galileitransformation und aus t' wird t .

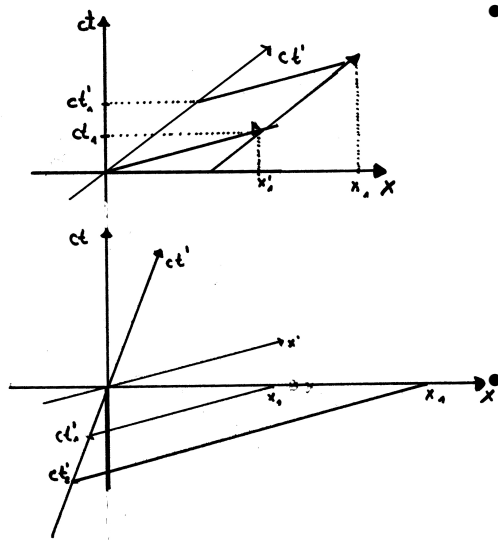
Transformationen im Minkowskidiagramm

Die Rücktransformation ist gegeben durch:

$$x = \gamma x' + \gamma \beta c t'$$

$$t = \gamma t' + \gamma \frac{\beta}{c} x'$$

Dies hat folgende physikalische Folgen:



- Relativität der Gleichzeitigkeit:

Zwei Ereignisse an verschiedenen Orten x_1 und x_2 zur Zeit $t = 0$ im IS sind nicht gleichzeitig im IS'.

$$t'_2 - t'_1 = -\beta \gamma \cdot \frac{(x_2 - x_1)}{c} \neq 0$$

$$x'_2 - x'_1 = \gamma(x_2 - x_1)$$

$$\Rightarrow (t'_2 - t'_1) = \frac{-\beta}{c}(x'_2 - x'_1)$$

Zeitdilatation:

Bei $x = 0$ ist im IS' die Zeitdifferenz größer als im IS.

$$t'_2 - t'_1 = \gamma(t_2 - t_1) \geq t_2 - t_1$$

- Längenkontraktion:

Der Wegunterschied $x_2 - x_1$ ist zur Zeit $t'_2 = t'_1$ im IS' geringer als im IS, d.h.

$$x'_2 - x'_1 < x_2 - x_1.$$

Abbildung 2: Minkowskidiagramm, unten: Relativität der Gleichzeitigkeit

$$x'_2 - x'_1 = \gamma(x_2 - x_1) - \beta \gamma(t_2 - t_1)c$$

$$t'_2 - t'_1 = 0 = \gamma(t_2 - t_1) - \beta \gamma(x_2 - x_1) \frac{1}{c}$$

$$\rightarrow t_2 - t_1 = \beta \frac{(x_2 - x_1)}{c}$$

$$\Rightarrow x'_2 - x'_1 = \gamma(1 - \beta^2)(x_2 - x_1) = \frac{(x_2 - x_1)}{\gamma}$$

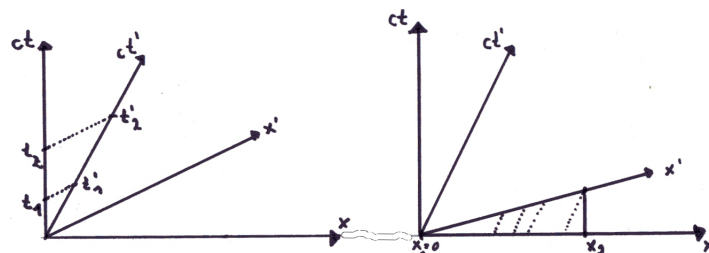


Abbildung 3: links: Zeitdilatation; rechts : Längenkontraktion

- Kausalität bezüglich einem dem Ereignis im Ursprung
 Maximale Verschiebung liegt bei $ct = |\vec{r}| \rightarrow 45^\circ$ Verschiebung
 \Rightarrow Lichtkegeloberfläche ist bei $|\vec{r}| = ct$
 Ereignisse mit $|\vec{r}|^2 < c^2 t^2$ befinden sich im Lichtkegel.

- Ereignisse mit $|\vec{r}|^2 < c^2 t^2$ heißen **zeitartig** und können mit $v < c$ erreicht werden.
- Ereignisse mit $|\vec{r}|^2 > c^2 t^2$ heißen **raumartig** und können nicht erreicht werden.
- Ereignisse mit $|\vec{r}|^2 = c^2 t^2$ heißen **lichtartig** und können mit $v = c$ erreicht werden.

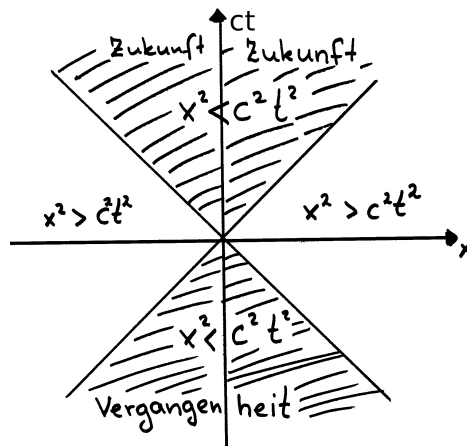


Abbildung 4: links: Zeitdilatation; rechts : Längenkontraktion

Für Lorentztransformationen gilt:

$$|\vec{r}'|^2 - c^2 t'^2 = |\vec{r}|^2 - c^2 t^2$$

\Rightarrow Die Kausalität bleibt erhalten.

2.1.4 Vierervektoren / Tensorrechnung

Wir fassen Zeit und Raum zu einem sog. Vierervektor zusammen:

$$x = (ct, x, y, z) = (x_0, x_1, x_2, x_3)$$

$$x^\mu = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ \vec{r} \end{pmatrix}$$

Mit den Konventionen:

$$x^0 = c \cdot t \quad x^1 = x \quad x^2 = y \quad x^3 = z$$

Lorentztransformationen lassen die Größe $c^2 t^2 - \vec{r}^2$ invariant.
Definiere entsprechendes Skalarprodukt:

$$x_\nu^2 = \sum_{\mu=0}^3 x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu = c^2 t^2 - \vec{r}^2$$

mit dem metrischen Tensor (Metrik):

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$g_{00} = 1 \quad g_{ii} = -1 \quad g_{\mu\nu} = 0 \text{ für } \mu \neq \nu$$

Definiere den kovarianten Vektor:

$$x_\nu = \sum_{\mu} g_{\mu\nu} x^\mu = (ct, -x, -y, -z) \quad \Rightarrow \quad x^2 = \sum_{\nu} x_\nu x^\nu$$

Einsteinsche Summenkonvention Über wiederholt auftretende Indizes wird summiert.
Meist ist ein Index oben und einer unten gesetzt.

Lorentztransformation:

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$$

mit z.B. $\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu}$

Das Skalarprodukt ist invariant unter einer Lorentztransformation.

$$\begin{aligned} x'^2 &= x'^\mu g_{\mu\nu} x'^\nu = x^\lambda \Lambda^\mu{}_\lambda g_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\kappa x^\kappa \\ &= x^\lambda g_{\lambda\kappa} x^\kappa \end{aligned}$$

\Rightarrow Die Metrik ist in beiden Inertialsystemen die gleiche. (Dies folgt aus der Form der Lorentztransformation.)

- Es gilt ebenfalls:

$$\begin{aligned} x \cdot y &= x^\mu g_{\mu\nu} y^\nu \\ &= x_0 y_0 - x_1 y_1 - x_2 y_2 - x_3 y_3 \end{aligned}$$

- Abstandsquadrat ds^2

$$ds^2 = dx^\mu g_{\mu\nu} dx^\nu = c^2 dt^2 - d\vec{r}^2$$

Hieraus folgt, dass das Abstandsquadrat größer null, gleich null und kleiner null sein kann.
 \rightarrow „pseudoeuklidischer Raum“

Verallgemeinerung der Vektoren auf **Tensoren**.

- **Skalare (Tensoren 0. Stufe)**

Skalare ändern sich nicht unter einer Lorentztransformation ($s'(x') = s(x)$).
(Zum Beispiel : Skalarprodukt, Lichtgeschwindigkeit c , Ruhemasse,...)

- **Vektoren (Tensoren 1. Stufe)** Vektoren werden mit der Lorentztransformation transformiert.

Unterscheide zwischen:

- **Kontravariante Vektoren**

$$A'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} A^{\nu} \quad \left(x'^{\mu} = \underbrace{\frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\nu}}}_{\Lambda^{\mu}_{\nu}} x^{\nu} \right)$$

- **Kovariante Vektoren**

$$B'_{\mu} = \Lambda^{\nu}_{\mu} B_{\nu} \quad \left(x'_{\mu} = \underbrace{\frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}}}_{\Lambda^{\nu}_{\mu}} x_{\nu} \right)$$

Diese Vektoren können mit dem metrischen Tensor ineinander umgerechnet werden:

$$B^{\mu} = g^{\mu\nu} B_{\nu}$$

Für das Skalarprodukt ergibt sich:

$$AB = A^{\mu} B_{\mu} = A^{\mu} g_{\mu\nu} B^{\nu}$$

Als Beispiel kann der Vierervektor x betrachtet werden:

$$\begin{aligned} x^{\mu} &= (ct, x, y, z) \\ x_{\mu} &= g_{\mu\nu} B^{\nu} = (ct, -x, -y, -z) \end{aligned}$$

Jedoch gilt für die Ableitungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} &= \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \partial_{\mu} \quad \rightarrow \quad \text{Kovariant} \\ \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} &= \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \frac{-\partial}{\partial x}, \frac{-\partial}{\partial y}, \frac{-\partial}{\partial z} \right) = \partial^{\mu} \quad \rightarrow \quad \text{Kontravariant} \end{aligned}$$

Die obigen Gleichungen folgen aus der Umformung

$$\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} = \underbrace{\frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}}}_{\Lambda^{\nu}_{\mu}} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}}$$

Die Divergenz ist wiederum ein Skalar $\partial_{\mu} A^{\mu} = \frac{\partial A^0}{\partial ct} + \nabla \vec{A}$

• **Tensoren höherer Stufe**

Tensoren der Stufe k sind über ihr Transformationsverhalten unter k Lorentztransformationen definiert.

$$T'^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_k} = \Lambda^{\mu_1}_{\nu_1} \Lambda^{\mu_2}_{\nu_2} \dots \Lambda^{\mu_k}_{\nu_k} T^{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_k}$$

→ Kontravariante Tensoren der k -ten Stufe (kovariant analog).

Für gemischte Terme gilt:

$$T'^{\lambda_1 \dots \lambda_p}_{\mu_1 \dots \mu_k} = \Lambda^{\nu_1}_{\mu_1} \dots \Lambda^{\nu_k}_{\mu_k} \Lambda^{\lambda_1}_{\kappa_1} \dots \Lambda^{\lambda_p}_{\kappa_p} T^{\kappa_1 \dots \kappa_p}_{\nu_1 \dots \nu_k}$$

Beispiele:

–

$$T_{\mu\nu}{}^{\lambda\delta} = x_\mu A_\nu x^\lambda B^\delta$$

– Verjüngung eines Tensors

$$T^{\nu_1 \dots \nu_{p-1} \mu_k}_{\mu_1 \dots \mu_k}$$

Dies ist ein Tensor (mit $k - 1$ kontra- und $p - 1$ kovariante).

$$\rightarrow T_\mu^\mu = g_{\mu\nu} T^{\mu\nu} \text{ skalar}$$

$$\rightarrow x_\mu y^\mu = g_{\mu\nu} x^\mu y^\nu$$

• **D'Alembertoperator**

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \hat{=} \text{skalare Größe}$$

• **Invarianz vom Skalarprodukt**

$$A'_\mu B'^\mu = \underbrace{\frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\gamma}}_{=\frac{\partial x^\nu}{\partial x^\gamma}} A_\nu B^\gamma = A_\nu B^\nu \quad \text{mit} \quad \frac{\partial x^\nu}{\partial x^\gamma} = \delta_\gamma^\nu = \delta_{\nu,\gamma}$$

•

$$g_{\mu\nu} g^{\nu\kappa} = g_\mu^\kappa = \delta_\mu^\kappa = \underbrace{\delta(\kappa\mu)}_{\text{Kronecker-}\delta}$$

2.1.5 Relativistische Mechanik

Die Newtonsche Mechanik ist nicht Lorentzkovariant, da Ableitungen nach der Zeit in der Newtonschen Mechanik auftreten, welche nicht kovariant sind.

$$\frac{dx^\mu}{dt} = (c, \dot{\vec{r}})$$

Die Konstruktion einer relativistischen Mechanik wird mit Hilfe der sog. **Eigenzeit** τ entwickelt. Diese Eigenzeit ist gleich der Zeit, die in einem mitbewegten Koordinatensystem vergeht:

$$\begin{aligned} c^2 d\tau^2 &= c^2 dt'^2 - \underbrace{dr'^2}_{=0} = c^2 dt^2 - d\vec{r}^2 \\ &= c^2 dt^2 \left(1 - \frac{\vec{v}(t)^2}{c^2}\right) \quad \text{mit } \vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} \\ &\rightarrow \boxed{d\tau = \frac{1}{\gamma(t)} dt} \end{aligned}$$

Beachte: In obiger Gleichung ist γ von der Geschwindigkeit des Teilchens abhängig! Definitionen:

- **Vierergeschwindigkeit**

$$\begin{aligned} \frac{dx^\mu}{d\tau} &= u^\mu = \frac{d}{d\tau}(ct, \vec{r}) = \gamma \frac{d}{dt}(ct, \vec{r}) \\ &= \gamma(c, \vec{v}) \end{aligned}$$

Der Betrag dieser Vierergeschwindigkeit u_μ ist gegeben durch

$$u_\mu u^\mu = \gamma^2 c^2 - \gamma^2 v^2 = c^2.$$

- **Viererimpuls**

$$p^\mu = m u^\mu$$

Modifiziertes Newtonsches Gesetz

$$\frac{d}{d\tau} p^\mu = m \frac{du^\mu}{d\tau} =: K^\mu$$

Bestimmung der sog. **Minkowskikraft** K^μ

Betrachte die drei Raumkomponenten:

$$m \frac{du^i}{d\tau} = \frac{dp^i}{d\tau} = \gamma \frac{dp^i}{dt} = \gamma F^i = K^i$$

und die Zeitkomponente:

$$\begin{aligned} \underbrace{m u_\mu \frac{du_\mu}{d\tau}}_{= u_\mu K^\mu = u_0 K^0 - \gamma \vec{v} \vec{K}} &= \frac{m}{2} \frac{d}{d\tau} u_\mu u^\mu = \frac{m}{2} \frac{d}{d\tau} c^2 = 0 \\ \Rightarrow K^0 &= \underbrace{\frac{1}{\gamma c}}_{= \frac{1}{u_0}} \gamma \vec{v} \vec{K} = \gamma \frac{\vec{v} \vec{F}}{c}. \end{aligned}$$

Mit der Forderung der Invarianz der Lorentztransformation lässt sich die Minkowskikraft mit K^0 bestimmen.

$$\implies K^\mu = \gamma \left(\frac{\vec{v} \vec{F}}{c}, \vec{F} \right)$$

Betrag des Viererimpulses $p_\mu p^\mu = m^2 c^2$

$$\begin{aligned} cp^0 &= m\gamma c^2 = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} && \text{Entwickle nach } v \text{ für } v \ll c \\ &= \underbrace{mc^2}_{E_{\text{ruhe}}} + \underbrace{\frac{1}{2}mv^2}_{\text{nicht relat. } E_{\text{kin}}} + \frac{3}{8}m\frac{v^4}{c^2} + \dots \end{aligned}$$

→ Identifiziere cp^0 mit der Energie E .

→ Relativistischer Energie-Impuls Zusammenhang:

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

Für ein Teilchen in Ruhe reduziert sich die Gleichung auf

$$E = mc^2$$

und zeigt die Äquivalenz von Masse und Energie.

2.2 Kovariante Formulierung der Elektrodynamik

Bisher wurde die Invarianz des Lichtkegels zur Herleitung der relativistischen Mechanik benutzt.

→ Lorentztransformation, Minkowskikraft.

→ Lichtwellenausbreitung bleibt invariant.

Frage: Wie sind die Transformationseigenschaften der Maxwellgleichungen ?

2.2.1 Viererstrom

- Wir gehen davon aus, dass die Ladung eines Punktteilchens ein Lorentzskalar ist.
- Dies gilt jedoch nicht für die Ladungsdichte ρ , da das 3-dimensionale Volumen nicht Lorentzinvariant ist (Längenkontraktion).

Die Ladungsdichte und die Stromdichte hängen über die **Kontinuitätsgleichung** zusammen.

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

Definition: **Viererstrom** $j^\mu = (c\rho, \vec{j})$

Daraus folgt

$$\partial_\mu j^\mu = 0.$$

Die Kontinuitätsgleichung ist Lorentzinvariant. Anschaulich lässt es sich so betrachten, dass die ruhende Ladung im Inertialsystem IS der Stromdichte im Inertialsystem IS' entspricht.

2.2.2 Viererpotential

$$\begin{aligned} A^\mu &= \left(\frac{\phi}{c}, \vec{A} \right) \\ \phi &= \text{skalares Potential} \\ \vec{A} &= \text{Vektorpotential} \end{aligned}$$

Das Viererpotential kann aus den Maxwellgleichungen hergeleitet werden.

$$\vec{E} = -\text{grad}(\phi) - \dot{\vec{A}} \quad \vec{B} = \text{rot}(\vec{A}) \quad (1)$$

Schreibe die inhomogenen Maxwell-Gleichungen mit den Potentialen (1) anstelle der \vec{E} - und \vec{B} -Felder.

$$\begin{aligned} \text{div} \vec{E} &= -\Delta \phi - \text{div} \dot{\vec{A}} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \\ \text{rot} \vec{B} - \frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}} &= \text{grad} \text{div} \vec{A} - \Delta \vec{A} + \frac{1}{c^2} \text{grad} \dot{\phi} + \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{A}} = \mu_0 \vec{j} \end{aligned}$$

Zur Vereinfachung wird die folgende Eichtransformation durchgeführt.

$$\begin{aligned}\text{wähle } \frac{1}{c^2} \dot{\phi} + \operatorname{div} \vec{A} &= 0 \text{ (Lorentzbedingung)} \\ \Rightarrow -\Delta \phi + \frac{1}{c^2} \ddot{\phi} &= \frac{\rho}{\varepsilon_0} = \mu_0 c^2 \rho \\ \Rightarrow -\Delta \vec{A} + \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{A}} &= \mu_0 \vec{j}\end{aligned}$$

Die obigen Gleichungen haben die Form von Wellengleichungen, daher benutzen wir den D'Alembertoperator um diese auszudrücken.

$$\begin{aligned}\square &= \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \Delta \quad \text{ist Lorentzskalar} \\ \Rightarrow \text{Viererpotential: } A^\mu &= \left(\frac{\phi}{c}, \vec{A} \right)\end{aligned}$$

Die inhomogenen Maxwellgleichungen sind explizit kovariant:

$$\begin{aligned}\square A^\mu &= \mu_0 j^\mu \\ \partial_\mu A^\mu &= 0 \quad \hat{=} \text{Lorenzbedingung}\end{aligned}$$

2.2.3 Feldstärketensor

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \nabla \times \vec{A} & \vec{E} &= -\nabla \phi - \dot{\vec{A}} \\ B_x &= \partial_y A_z - \partial_z A_y & E_x &= -\partial_x \phi - \partial_t A_x \\ &= -\partial^2 A^3 + \partial^3 A^2 & &= \partial^1 A^0 c - \partial^0 A^1 c\end{aligned}$$

Die rechte Seite hat die Form eines zweistufigen Tensors:

$$\boxed{F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu} \quad \hat{=} \quad \mathbf{Feldstärketensor}$$

Ein antisymmetrischer Tensor 2. Stufe besitzt 6 freie Komponenten:

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-E_x}{c} & \frac{-E_y}{c} & \frac{-E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ \frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

Der kovariante Feldstärketensor ergibt sich zu:

$$F_{\mu\nu} = g_{\mu\lambda} g_{\nu\kappa} F^{\lambda\kappa} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{E_x}{c} & \frac{E_y}{c} & \frac{E_z}{c} \\ \frac{-E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ \frac{-E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{-E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

Die Vorzeichen ergeben sich durch die Regeln

$\lambda\kappa$	sind beide raumartig	\rightarrow	$(-1) \cdot (-1)$	\rightarrow	$+1$
$\lambda\kappa$	sind beide zeitartig	\rightarrow	$(+1) \cdot (+1)$	\rightarrow	$+1$
$\lambda\kappa$	eines ist zeit-, das andre raumartig	\rightarrow	$(-1) \cdot (+1)$	\rightarrow	-1

Definitionen

- **Total asymmetrischer Tensor 4. Stufe**

$$\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = \begin{cases} +1 & \text{für } \alpha = 0, \beta = 1, \gamma = 2, \delta = 3 \\ & \text{und gerade Permutationen} \\ -1 & \text{für ungerade Permutationen} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

- **Dualer Feldstärketensor**

$$\tilde{F}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} F_{\gamma\delta}$$

Explizit ist der duale Feldstärketensor:

$$\tilde{F}^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & -B_x & -B_y & -B_z \\ B_x & 0 & \frac{E_z}{c} & -\frac{E_y}{c} \\ B_y & -\frac{E_z}{c} & 0 & \frac{E_x}{c} \\ B_z & \frac{E_y}{c} & -\frac{E_x}{c} & 0 \end{pmatrix}$$

Maxwellgleichungen:

- Inhomogen

$$\underbrace{\nabla \vec{E}}_{\partial_\mu F^{\mu 0} c} = \underbrace{\frac{\rho}{\varepsilon_0}}_{\mu_0 j^0 c} \quad \underbrace{\nabla \times \vec{B}}_{\partial_i F^{ij}} - \underbrace{\frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}}}_{-\partial_0 F^{0j}} = \underbrace{\mu_0 \vec{j}}_{\mu_0 j^j}$$

$$\Rightarrow \boxed{\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu}$$

- homogen

$$\nabla \times \vec{E} + \dot{\vec{B}} = 0 \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0$$

Mit Hilfe des dualen Feldstärketensors lassen sich die homogenen Maxwellgleichungen in einer Gleichung zusammenfassen.

$$\boxed{\partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} = 0}$$

Eine äquivalente Formulierung ist:

$$\partial^\lambda F^{\mu\nu} + \partial^\mu F^{\nu\lambda} + \partial^\nu F^{\lambda\mu} = 0$$

\Rightarrow Explizite kovariante Form der Maxwellgleichungen.

Transformationsverhalten der Felder

Feldstärketensor: $F'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\kappa \Lambda^\nu_\delta F^{\kappa\delta}$

Für einen Boost in x -Richtung ergibt sich

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

Es gilt:

$$\begin{aligned} E'_x &= E_x & B'_x &= B_x \\ E'_y &= \gamma E_y - \beta\gamma B_z c \\ B'_y &= \gamma B_y + \beta\gamma \frac{E_z}{c} \\ E'_z &= \gamma E_z + \beta\gamma B_y c \\ B'_z &= \gamma B_z - \beta\gamma \frac{E_y}{c} \end{aligned}$$

—→ Felder in x -Richtung bleiben unverändert.

Felder senkrecht zur x -Richtung: \vec{E} - und \vec{B} -Feld Komponenten werden gemischt.

Beispiel: Statisches Feld E_y (sonst in Komponenten = 0)

$$\begin{aligned} \rightarrow E'_y &= \gamma E_y & B'_z &= -\beta\gamma \frac{E_y}{c} = -\beta \frac{E'_y}{c} \\ & & \rightarrow \vec{B} &\perp \vec{E} \text{ und } \perp \vec{v} \end{aligned}$$

Das \vec{B} -, \vec{E} -Feld und der Geschwindigkeitsvektor \vec{v} stehen allgemein immer senkrecht zueinander in der Elektrostatik.

Es gilt:

$$\vec{B}' = \vec{v} \times \frac{\vec{E}'}{c^2}$$

2.2.4 Geladenes Teilchen

Lorentzkraft ist $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$.

Die Minkowskikraft ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} K^\mu &= \gamma q \left(\vec{v} \frac{\vec{E}}{c}, \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \\ &= q \left(\vec{u} \frac{\vec{E}}{c}, u_0 \frac{\vec{E}}{c} + \vec{u} \times \vec{B} \right) \\ &\text{mit } u^\mu = \gamma(c, \vec{v}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{d.h. } \frac{dp_0}{d\tau} &= \frac{q}{c} \vec{u} \cdot \vec{E} && \text{Energieänderung} \\ \frac{d\vec{p}}{d\tau} &= q \left(u_0 \frac{\vec{E}}{c} + \vec{u} \times \vec{B} \right) \end{aligned}$$

Die rechte Seite kann geschrieben werden als:

$$\boxed{\frac{dp^\mu}{d\tau} = q F^{\mu\nu} u_\nu}$$

→ Das Gleichungssystem ist kovariant geschlossen.

$$\begin{aligned} \partial_\mu F^{\mu\nu} &= \mu_0 j^\nu \\ \partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} &= 0 \\ m \frac{du^\mu}{d\tau} &= q F^{\mu\nu} u_\nu \\ &\longrightarrow u^\mu \text{ bestimmt } j^\mu \end{aligned}$$

2.3 Lagrangeformalismus

2.3.1 Mechanik eines freien Teilchens

Die Wirkung ist $S = \int \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt$.

Problem: dt ist nicht kovariant.

Lösung: Wir führen die Eigenzeit $d\tau = \frac{dt}{\gamma}$ ein.

$$\longrightarrow S_{\text{frei}} = \int \gamma \mathcal{L}_{\text{frei}} d\tau$$

Damit das Prinzip der kleinsten Wirkung gilt, muss S (und damit $\delta S = 0$) ein Skalar sein! Da ein freies Teilchen orts- und richtungsunabhängig ist, ist der einzige geschwindigkeitsabhängige Skalar der Geschwindigkeitsbetrag:

$$\begin{aligned} \text{mit } u_\mu u^\mu &= c^2 \\ \implies S &= - \int mc^2 d\tau \\ \text{bzw. } S &= \int \underbrace{-mc^2 \sqrt{1 - \frac{\vec{v}^2}{c^2}}}_{\mathcal{L}_{\text{frei}} = \sqrt{u_\mu u^\mu} mc} dt \end{aligned}$$

Beachte: $u_\mu u^\mu$ darf erst nach Variation verwendet werden, da $u^0(\tau) = \frac{dt}{d\tau}$ erst als unabhängige Funktion ausgerechnet werden muss. Dies ergibt:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_i} = \frac{d}{dt} m \gamma \vec{v} = 0 \quad \hat{=} \text{ konst. Geschwindigkeit}$$

2.3.2 Mechanik mit elektromagnetischem Feld

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{frei}} + \mathcal{L}_{\text{int}} \quad \text{mit } \gamma \mathcal{L} \hat{=} \text{ Skalar}$$

Forderungen an \mathcal{L}_{int} (neben der Kovarianz)

- Linear in der Ladung q
- Linear in dem Potential A^μ
- Translationsinvariant (explizit unabhängig von x^μ)
- Möglichst Funktionen 1. Ableitung

$$\begin{aligned} \longrightarrow \mathcal{L}_{\text{int}} &= -q u_\mu \frac{A^\mu}{\gamma} \\ &= -q\phi + q\vec{v}\vec{A} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{L} = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{\vec{v}^2}{c^2}} + q\vec{v}\vec{A} - q\phi}$$

Kanonische Impulse:

$$\begin{aligned}\vec{p}_{\text{kan}} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}} = m\gamma \vec{v} + q\vec{A} \\ \Rightarrow \vec{v} &= c^2 \frac{\vec{p} - q\vec{A}}{\sqrt{m^2 c^4 + c^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2}}\end{aligned}$$

Hamiltonfunktion:

$$\mathcal{H} = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2} + e\phi$$

Bemerkung:

Der Hamiltonformalismus kann nicht mehr mit der Energie identifiziert werden, da die Hamiltonfunktion nun ein Lorentzskalar ist und die Energie die Zeit-Komponente eines Vierervektors sein sollte.

Kovariante Form der Lagrangefunktion

Mit Hilfe der Vierer-Geschwindigkeit

$$\sqrt{1 - \frac{\vec{v}^2}{c^2}} = \frac{1}{\gamma} \frac{u_\mu u^\mu}{c^2}$$

und der Eigenzeit $d\tau = \gamma dt$ lässt sich die Wirkung umschreiben:

$$\begin{aligned}S_{\text{frei}} &= -mc \int \sqrt{u_\mu u^\mu} d\tau \\ \text{mit Zwangsbedingung } u_\mu u^\mu &= c^2 \\ \Rightarrow S_{\text{frei}} &= \text{const.}\end{aligned}$$

Ausweg:

Wir führen ein Bahnparameter (s) ein, der nach der Variation nach $ds = cd\tau$ mit der Eigenzeit identifiziert wird.

(D.h. $\frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx_\mu}{ds} \neq 1$.)

$$\Rightarrow S_{\text{frei}} = -mc \int \sqrt{g_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{ds} \frac{dx^\nu}{ds}} ds$$

Für die Ww. Mit dem e.m-Feld gilt:

$$S_{\text{int}} = -q \int \frac{dx^\mu}{ds} A_\mu(x) ds$$

die Variation von $S_{\text{frei}} + S_{\text{int}}$ mit $ds = cd\tau$ und $u_\mu u^\mu = c^2$ ergibt:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} + q \underbrace{\frac{dA^\mu}{d\tau}}_{= \frac{dx_\nu}{d\tau} \partial^\nu A^\mu} - q \frac{dx_\nu}{d\tau} \partial^\mu A^\nu &= 0 \\ \text{mit} \quad (\partial^\nu A^\mu - \partial^\mu A^\nu) &= F^{\nu\mu} \\ = m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} + q \frac{dx_\nu}{d\tau} F^{\nu\mu} &= 0 \end{aligned}$$

2.3.3 Felder

Behandlung von Feldern im Lagrangeformalismus: Fasse die Felder $\phi_k(x)$ als „k-te Koordinate eines Freiheitsgrades bei x^μ auf. Hierbei ist x der Viererortsvektor.

In 4-Dimensionen ergibt dies:

		Hier	Klassisch
Kontinuierlicher Index/Indizes	\longrightarrow	x^μ	t
Auslenkung	\longrightarrow	$\phi_k(x)$	$x(t)$
Geschwindigkeit	\longrightarrow	$\partial^\mu \phi_k(x)$	$\partial_t x(t)$

Die Wirkung ist

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(\phi_k, \partial^\mu \phi_k)$$

Die Euler-Lagrangegleichung ergibt sich zu:

$$\partial^\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial^\mu \phi_k)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_k} = 0$$

- k partielle Differentialgleichungen für $\phi_k(x)$.
- $\mathcal{L} \hat{=}$ Lagrangedichte.
- dx^4 ist ein Lorentzskalar $\longrightarrow \mathcal{L}$ muss ebenfalls ein Lorentzskalar sein.

Anwendung auf die Elektrodynamik:

- Freie Felder (Felder ohne Quellen) betrachten vier Potentiale (A^μ)
 $\longrightarrow \mathcal{L}$ hängt nur von den Ableitungen ab.
- Die Kopplung an der Materie ist linear in A^μ .

Ansatz:

$$\mathcal{L} = \frac{-1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - j_\mu A^\mu$$

Es gilt die Euler-Lagrangegleichung:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A^\mu} &= -j_\mu \\
 \rightarrow -4\mu_0 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial^\nu A^\mu)} &= \frac{\partial}{\partial(\partial^\nu A^\mu)} g_{\alpha\beta} g_{\gamma\delta} F^{\alpha\gamma} F^{\beta\delta} \\
 &= g_{\alpha\beta} g_{\gamma\delta} \frac{\partial}{\partial(\partial^\nu A^\mu)} \left[\underbrace{(\partial^\alpha A^\gamma - \partial^\gamma A^\alpha)}_{=F^{\alpha\gamma}} \underbrace{(\partial^\beta A^\delta - \partial^\delta A^\beta)}_{=F^{\beta\delta}} \right] \\
 \text{mit } \frac{\partial(\partial^\alpha A^\gamma)}{\partial(\partial^\nu A^\mu)} &= \delta_\nu^\alpha \delta_\mu^\gamma \\
 &= g_{\alpha\beta} g_{\gamma\delta} \left[(\delta_\nu^\alpha \delta_\mu^\gamma - \delta_\nu^\gamma \delta_\mu^\alpha) F^{\beta\delta} + (\delta_\nu^\beta \delta_\mu^\delta - \delta_\nu^\delta \delta_\mu^\beta) F^{\alpha\gamma} \right] \\
 &= F_{\nu\mu} - F_{\mu\nu} + F_{\nu\mu} - F_{\mu\nu} = 4F_{\nu\mu} \\
 \Rightarrow \quad &\boxed{\partial^\mu F_{\mu\nu} = \mu_0 j_\nu}
 \end{aligned}$$

Die obige Gleichung ist die inhomogene Maxwellgleichung.

Die homogenen Maxwellgleichungen sind durch den Ansatz $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ automatisch erfüllt.

Es gilt ebenfalls:

$$\underbrace{\partial^\nu \partial^\mu F_{\mu\nu}}_{\partial^\nu \partial^\mu = \partial^\mu \partial^\nu \text{ aber } F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}} = -\mu_0 \partial^\nu j_\nu$$

$\Rightarrow \partial^\nu j_\nu = 0$ Die Kontinuitätsgleichung ist erfüllt.

2.3.4 Felder und Teilchen

Für ein Teilchen i mit $\{x_{(i)}^\mu(\tau)\}$ und Felder $F^{\mu\nu}(x^\mu)$ gibt es eine Lagrangefunktion mit dem Wechselwirkungsterm

$$\int ds \, q \frac{dx^\mu}{ds} A_\mu(x(s)) \leftrightarrow \int d^4x \, j_\mu(x) A^\mu(x).$$

Die Stromdichte für ein Teilchen ist

$$j^\mu(x) = \sum_i \int ds \, q_i \frac{dx^\mu}{ds} \delta^{(4)}(x - x_i(s)).$$

Einsetzen ergibt den obigen Wechselwirkungsterm, wobei s mit τ identifiziert werden kann. Ebenso ist die Lagrangefunktion für ein freies Teilchen

$$\mathcal{L}_{\text{frei}}\left(\frac{dx}{ds}\right) = \int d^4x' \mathcal{L}\left(\frac{dx'}{ds}\right) \delta^{(4)}(x' - x(s)).$$

Die gesamte relativistische Mechanik und Elektrodynamik ist bestimmt durch:

$$\begin{aligned}
S &= \int d^4x \mathcal{L} \left(\{x_i, \partial^\mu x_i\}, A^\mu(x), \partial^\mu A^\nu(x) \right) \\
\mathcal{L} &= \sum_i -m_i c \int d\tau \delta^{(4)}(x - x_i(\tau)) \sqrt{u_i^\mu u_{i\mu}} \\
&\quad - \sum_i q_i \int d\tau \frac{dx_i^\mu(\tau)}{d\tau} \delta^{(4)}(x - x_i(\tau)) A_\mu(x) \\
&\quad - \frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}
\end{aligned}$$

- Variation von S nach $x_i(s_i)$ und $A_\mu(x)$ ergibt die Bewegungsgleichung der Teilchen und die Maxwellgleichungen.
- Die Beschreibung der effektiven Wechselwirkung zwischen den Teilchen wird nicht einfach sein, da die Potentiale von dem Ort der Teilchen zu retardierten Zeiten abhängen. \longrightarrow nicht instantane Wechselwirkung.
- In niedrigster relativistischer Ordnung \longrightarrow Darwin Terme (siehe Übung).

2.3.5 Energie-Impuls- oder Spannungstensor

Für eine allgemeine Feldtheorie gilt:

$$\mathcal{L}(\varphi, \partial^\mu \varphi).$$

\mathcal{L} ist die **Lagrangedichte** und ist explizit unabhängig von x^μ .

Die Euler-Lagrangegleichung ist somit:

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = 0$$

Wir betrachten die Erhaltungsgrößen:

$$\begin{aligned}
\partial_\mu \mathcal{L} &= (\partial_\mu \varphi) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} + (\partial_\mu \partial_\nu \varphi) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu \varphi)} \\
\text{mit} \quad \partial_\nu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu \varphi)} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \quad \text{Euler-Lagrange} \\
\longrightarrow 0 &= \partial_\nu \left(\underbrace{(\partial_\mu \varphi) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu \varphi)}}_{T^\nu{}_\mu - \delta_\mu{}^\nu} \right) \\
\implies &\quad \boxed{\partial_\nu T^\nu{}_\mu = 0}
\end{aligned}$$

$T^\nu{}_\mu$ ist somit eine kovariante Erhaltungsgröße analog zur Energie-Impulserhaltung in der klassischen Mechanik.

Physikalische Bedeutung von $T^{\mu\nu}$

Die Erhaltung ist eine Folge der Translationsinvarianz (unabhängig von x^μ) und gilt zu allen Zeiten und im ganzen Raum.

$$T^{00} = \dot{\varphi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} - \mathcal{L}$$

Diese Gleichung entspricht genau der **Energiedichte** W des Feldes (analog einer Hamiltondichte).

Aus der Ableitung Gleichung (2) folgt:

$$\partial_\nu T^{\nu 0} = \frac{1}{c} \partial_t T^{00} + \partial_i T^{i0} = 0$$

Dies ist die Kontinuitätsgleichung für die Energiedichte.

$$\Rightarrow T^{i0} = \frac{1}{c} S^i \quad \hat{=} \text{Energiestromdichte}$$

Integriere Gleichung (2) über das 3 dimensionale Volumen:

$$\begin{aligned} \partial_0 \int T^{0\mu} d^3x + \underbrace{\int \partial_k T^{k\mu} d^3x}_{=0, *} &= 0 \\ \Rightarrow P^\mu &= \int T^{0\mu} d^3x \end{aligned}$$

ist zeitlich erhalten und entspricht dem Viererimpuls des Feldes.

Zu *) Diese Beziehung gilt nur für lokalisierte Felder, hier ist nur ein endlicher Raum betroffen und der Satz von Gauss ist über das Volumen des Raumes anwendbar.

Achtung:

$T^{\mu\nu}$ ist i.Allg. nicht symmetrisch definiert.

Kann aber symmetrisiert werden, ohne dass sich die Erhaltungssätze ändern.

→ Die symmetrische Wahl wird wegen der Drehinvarianz bevorzugt.

Die weiteren Komponenten werden in der **Impulsstromdichte** T^{ik} zusammengefasst:
z.B.

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} T^{i0} + \frac{\partial}{\partial x^j} T^{ij} = 0$$

Die Gleichung (5) hat die Form der Kontinuitätsgleichung einer Impulsdichte T^{i0}

„Anschaulich“ : BILD

Konkret : Energie-Impuls-Tensor (symmetrisiert).

$$T^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} W & \frac{S_x}{c} & \frac{S_y}{c} & \frac{S_z}{c} \\ \frac{S_x}{c} & T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ \frac{S_y}{c} & T_{xy} & T_{yy} & T_{yz} \\ \frac{S_z}{c} & T_{xz} & T_{yz} & T_{zz} \end{pmatrix}$$

2.3.6 Energie-Impuls-Tensor des elektromagnetischen Feldes

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \frac{-1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad \text{mit } F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \\
T^{\mu\nu} &= \frac{\partial A_\kappa}{\partial x_\mu} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial A_\kappa}{\partial x_\nu}\right)} - g^{\mu\nu} \mathcal{L} \\
&= -\frac{1}{\mu_0} (\partial^\mu A^\kappa) F^\nu{}_\kappa + \frac{1}{4\mu_0} g^{\mu\nu} F_{\kappa\lambda} F^{\kappa\lambda}
\end{aligned}$$

Wir symmetrisieren durch die Addition von $\frac{1}{\mu_0} (\partial^\mu A^\kappa) F^\mu{}_\kappa$. (Dies ist möglich, da $\partial_\mu F^\mu{}_\kappa = 0$, wenn keine Ladungen existieren.)

$$\Rightarrow \boxed{T^{\mu\nu} = -\frac{1}{\mu_0} g_{\kappa\lambda} F^{\mu\kappa} F^{\lambda\nu} + \frac{1}{4\mu_0} g^{\mu\nu} F_{\kappa\lambda} F^{\kappa\lambda}}$$

Eigenschaften von $T^{\mu\nu}$:

- symmetrisch $T^{\mu\nu} = T^{\nu\mu}$
- spurfrei $T^\mu{}_\mu = 0$

Die Komponenten ergeben sich zu

$$\begin{aligned}
T^{00} &= \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{1}{c^2} \vec{E}^2 + \vec{B}^2 \right) = \frac{\varepsilon_0}{2} \vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2 \\
&\quad \longrightarrow \text{Energiedichte} \\
T^{i0} = T^{0i} &= +\frac{1}{\mu_0 c} (\vec{E} \times \vec{B})_i \\
&\quad \hat{=} \text{Poyntingvektor} \\
T^{ij} &= -\varepsilon_0 E_i E_j - \frac{1}{\mu_0} B_i B_j + \frac{\delta_{ij}}{2} T^{00} \\
&\quad \longrightarrow \text{negativer Maxwell'scher Spannungstensor}
\end{aligned}$$

Die Berücksichtigung von Ladungen (= Quellen des elektromagnetischen Feldes) führt auf gemeinsame Erhaltungssätze:

z.B.:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} (P_{\text{Feld}}^\mu + P_{\text{Teilchen}}^\mu) &= 0 \\
\text{mit } P_{\text{Teilchen}}^\mu &= \sum_i p_{(i)}^\mu \hat{=} \text{gesamter 4er-Impuls aller Teilchen}
\end{aligned}$$

2.4 Lösung der Wellengleichung in kovarianter Form

Wir gehen von den inhomogenen Maxwellgleichungen aus:

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu$$

Mit dem Potential

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$$

$$\implies \underbrace{\partial_\mu \partial^\mu A^\nu}_{\square} - \underbrace{\partial^\nu \partial_\mu A^\mu}_{=0} = \mu_0 j^\nu$$

$\partial_\mu A^\mu = 0$ heißt Lorenzbedingung. Die inhomogene Wellengleichung nimmt die Form einer inhomogenen, partiellen Differentialgleichung an.

$$\boxed{\square A^\nu = \mu_0 j^\nu}$$

Lösung mit Hilfe der Greenschen Funktion:

$$\square_x G(x, x') = \delta^{(4)}(x - x')$$

$$\text{Im freien Raum gilt } G(x, x') = G(x - x')$$

Eine 4 dim. Fouriertransformation löst die Gleichung:

$$G(x - x') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k \tilde{G}(k) e^{-ik(x-x')}$$

$$k^\mu = \left(\frac{\omega}{c}, \vec{k} \right)^T \quad kx = \omega t - \vec{k} \vec{x}$$

$$\delta^{(4)}(x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k e^{-ikx}$$

$$\implies \boxed{\tilde{G} = -\frac{1}{k^2}}$$

Rücktransformation:

Für die Rücktransformation müssen die Pole bei $k_0 = \pm |\vec{k}|$ beachtet werden.

→ Definiere wie zuvor eine retardierte und avancierte Greensche Funktion, indem die Integration infinitesimal nach $k_0 \pm i\varepsilon$ verschoben wird.

Durchführung: siehe Übung

Ergebnis:

$$G_{R/A}(x - x') = \frac{1}{4\pi R} \Theta(\pm(x_0 - x'_0)) \delta(x_0 - x'_0 \mp R)$$

mit $R = |\vec{x} - \vec{x}'|$

Beachte die sog. **retardierte Zeit**, d.h. dass die Greensche Funktion bei \vec{x} von Null verschieden ist für

$$t' = \frac{x'_0}{c} = \frac{x_0}{c} - \frac{R}{c} = t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}$$

Die Wirkung bei x' findet zu einer früheren Zeit $t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}$ statt.

Kovariante Form

$$\begin{aligned} \delta((x - x')^2) &= \delta((x_0 - x'_0)^2 - |\vec{x} - \vec{x}'|^2) \\ &= \delta((x_0 - x'_0 - R)(x_0 - x'_0 + R)) \\ &\quad \text{mit } \delta(f(x)) = \sum_n \frac{1}{|f'(x_n)|} \delta(x - x_n) \quad x_n = \text{Nst.} \\ &= \frac{1}{2R} (\delta(x_0 - x'_0 - R) + \delta(x_0 - x'_0 + R)) \end{aligned}$$

Wegen $\Theta(\pm(x_0 - x'_0))$ tritt immer nur eine δ -Funktion in der Greenschen Funktion auf und es gilt:

$$\boxed{G_{R/A}(x - x') = \frac{1}{2\pi} \Theta(\pm(x_0 - x'_0)) \delta((x - x')^2)}$$

Die Thetafunktionen sind unter Lorentztransformationen invariant, da die Kausalität erhalten bleibt!

Felder bewegter Ladungen folgen aus

$$\begin{aligned} j^\mu(x) &= c \sum_i q_i \int d\tau u_{(i)}^\mu(\tau) \delta^{(4)}(x - x_i(\tau)) \\ \text{und } A^\mu(x) &= \int d^4x' G(x - x') j^\mu(x') \end{aligned}$$

Für die bewegte Punktladung führt das auf die sog. **Lienard-Wichert-Potentiale**.

Kapitel 3:

Relativistische Quantenmechanik

Wiederholung

- Bisherige Quantenmechanik für ein Teilchen basiert auf der Schrödingergleichung.

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = \mathcal{H} |\psi\rangle$$

Für den Zustand $|\psi\rangle$

- Wahrscheinlichkeitsinterpretation

$$|\langle n | \psi \rangle|^2$$

Die obige Gleichung gibt die Wahrscheinlichkeit einen Zustand $|n\rangle$ zu finden an.

- Der Hamiltonoperator eines freien Teilchens

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$$

mit $\vec{p} = -i\hbar\nabla$

- Kopplung an elektromagnetischen-Felder ist analog zur Hamiltonmechanik

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A} \qquad \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} + q\phi$$

Relativitätstheorie fordert kovariante Formulierung der Naturgesetze.

Problem: Die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{\vec{r}}^2 \psi$$

ist nicht kovariant, da die Ableitungen der Raum- und Zeitkomponenten in unterschiedlichen Ordnungen auftreten.

3.1 Klein-Gordon-Gleichung

Verwende das Korrespondenzprinzip

$$E \rightarrow i\hbar\partial_t \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$$

und den relativistischen Energie- und Impuls-Zusammenhang

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

Für die Wellengleichung ergibt sich dann

$$i\hbar\partial_t\psi = \sqrt{m^2c^4 - \hbar^2c^2\nabla^2}\psi$$

Die r.S. ist über die Reihenentwicklung definiert

$$mc^2 - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \dots \nabla^4 + \dots$$

Das heißt es treten unendlich hohe Ableitungen auf.

→ Die Ausdrücke werden sehr kompliziert. Zeit und Ort treten unsymmetrisch auf, Kovarianz ist nicht offensichtlich.

→ Ansatz wird nicht weiter verfolgt. Stattdessen gehen wir von

$$E^2 = m^2c^4 + c^2p^2$$

aus.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad & \boxed{-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (m^2c^4 - \hbar^2c^2\Delta) \psi} \\ & \hat{=} \text{Klein-Gordon-Gleichung} \end{aligned}$$

Die Klein-Gordon-Gleichung kann kovariant geschrieben werden:

$$\left(\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right)\psi = 0$$

Dabei ist $\frac{mc}{\hbar}$ ein Lorentzskalar.

Analog der Wellengleichung mit einem Massenterm. Dieser definiert eine Länge gemäß

$$\frac{mc}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda_c}.$$

λ_c ist die Compton-Wellenlänge.

Konsequenzen der Klein-Gordon-Gleichung:

- Ebene Welle $\exp(i\vec{k}\vec{x} - iE\frac{t}{\hbar})$
mit

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + \hbar^2c^2k^2}$$

d.h. es gibt im Vakuum Lösungen negativer Energien. Diese Lösungen werden im Rahmen der **Quantenfeldtheorie** durch **Antiteilchen** erklärt.

- Wahrscheinlichkeitsinterpretation
(Dichte und Stromdichte)

$$\begin{aligned}\psi^* \left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi - c.c. &= 0 & c.c. = \text{complex conjugated} \\ \Rightarrow \psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* &= 0 \\ \Rightarrow \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) &= 0\end{aligned}$$

Diese Gleichung hat die Form einer Kontinuitätsgleichung für eine 4-Stromdichte.

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

Aber:

Die Zeitkomponente

$$\frac{j^0}{c} = \rho = \frac{\hbar}{2m i c} (\psi^* \partial^0 \psi - \psi \partial^0 \psi^*) \quad \text{mit: } \partial^0 = \frac{1}{c} \partial_t$$

ist nicht positiv definit, da ψ und $\partial_t \psi$ unabhängig gewählt werden können zum Zeitpunkt $t = 0$ (Dgl. 2. Ordnung).

\Rightarrow Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist nicht möglich und Klein-Gordon-Gleichung kann keine Einteilchen Quantenmechanik beschreiben.

- Klein-Gordon-Gleichung in der Quantenfeldtheorie beschreibt geladene Teilchen mit Spin 0 (π -Mesonen) und ihre anti-Teilchen (mit umgedrehter Ladung), d.h. negativer Ladungsdichte.
- Kopplung an ein skalares Potential

$$\left[\left(i\hbar \partial_t - \underbrace{V(r)}_* \right)^2 + \hbar^2 c^2 \nabla^2 \right] \psi = m^2 c^4 \psi$$

*) typisches Skalar $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$

Dass heißt die Kopplung an das Potential ist bestimmt durch eine dimensionslose Konstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137.037} \quad \text{Feinstrukturkonstante}$$

Die Feinstrukturkonstante ist eine grundlegende Größe in der sog. Quantenelektrodynamik (QED), die die Wechselwirkung von Ladungen und Photonen beschreibt.

Alternativ:

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{\text{Coulombenergie zweier Ladungen im Abstand } s}{\text{Photonenenergie mit der Wellenlänge } r} \\ &= \frac{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}}{\hbar c \frac{1}{r}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \\ \alpha &= \frac{\text{Compton Wellenlänge}}{\text{Bohrradius}} = \frac{\frac{\hbar}{mc}}{4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{e^2 m}}\end{aligned}$$

3.2 Dirac-Gleichung

Neuer Ansatz mit der Ableitung erster Ordnung (zur Vermeidung negativer Dichte).

$$\boxed{i\hbar\partial_t\psi = (-i\hbar c\alpha^k\partial_k + \beta mc^2)\psi} \quad \hat{=}\text{Dirac-Gleichung}$$

mit $(-i\hbar c\alpha^k\partial_k + \beta mc^2) = \mathcal{H} \quad k \in \{x, y, z\}$

ψ kann keine einkomponentige Wellenfunktion sein, da α^k und β hermitesche Matrizen sein müssen. Für einfache Zahlen (für $\alpha^k = 1$ z.B.) wäre nicht einmal die Drehinvarianz der Gleichung gewährleistet.

$$\Rightarrow \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \quad \hat{=}\text{„Spinor“}$$

Forderungen

1. Aus dem Korrespondenzprinzip folgt, dass die Lösung ebenfalls die Klein-Gordon-Gleichungen erfüllen sollen. Speziell für ebene Wellen soll gelten:

$$E^2 = m^2 c^4 + c^2 p^2$$

2. Erhaltener 4-Strom mit positiv definiter Dichte.

$$(\text{Kandidat: } \rho = \psi^\dagger \psi = \sum_{i=1}^N |\psi_i|^2)$$

3. Die Lorentzkovarianz muss erfüllt sein.

3.2.1 Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung

Erneute Anwendung von $i\hbar\partial_t = \mathcal{H}$ ergibt

$$\begin{aligned} -\hbar^2\partial_t^2\psi &= \left[-\hbar^2 c^2 \alpha^k \alpha^l \partial_k \partial_l + \beta^2 m^2 c^4 - i\hbar c^3 m (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k) \partial_k \right] \psi \\ &\stackrel{!}{=} \left[-\hbar^2 c^2 \sum_k \partial_k^2 + m^2 c^4 \right] \psi \end{aligned}$$

Hieraus folgt für α und β

$$\beta^2 = \mathbb{1} \quad \beta \alpha^k + \alpha^k \beta = 0 \quad (1)$$

$$(\alpha^k)^2 = \mathbb{1} \quad \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = 2\delta^{kl} \mathbb{1} \quad (2)$$

Diese Bedingungen stellen wir an die Dirac-Matrizen um die erste Forderung zu erfüllen.

3.2.2 Konstruktion des Viererstroms

Multipliziere die Dirac-Gleichung mit $\psi^\dagger = (\psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$

$$\Rightarrow i\hbar\psi^\dagger\partial_t\psi = -i\hbar c \psi^\dagger\alpha^k\partial_k\psi + mc^2\psi^\dagger\beta\psi$$

Komplex konjugiert:

$$-i\hbar(\partial_t\psi^\dagger)\psi = i\hbar c(\partial_k\psi^\dagger)\alpha^k\psi + mc^2\psi^\dagger\beta\psi$$

Bei der obigen Gleichung haben wir ausgenutzt, dass gilt

$$\alpha^{k\dagger} = \alpha^k \quad \beta^\dagger = \beta$$

Bilde die Differenz:

$$i\hbar\left[\psi^\dagger\partial_t\psi + (\partial_t\psi^\dagger)\psi\right] = -i\hbar c\left[\psi^\dagger\alpha^k\partial_k\psi + (\partial_k\psi^\dagger)\alpha^k\psi\right]$$

Umschreiben der obigen Gleichung in der Form einer Kontinuitätsgleichung.

$$\partial_t(\psi^\dagger\psi) = -\partial_k(c\psi^\dagger\alpha^k\psi)$$

Identifiziere die Viererstromdichte:

$$\begin{aligned} \partial_\mu j^\mu &= 0 \\ \text{mit } j^0 &= c\psi^\dagger\psi = c\rho \\ \vec{j} &= c\psi^\dagger\vec{\alpha}\psi \end{aligned}$$

Damit ist die Zeitkomponente positiv definit und kann als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. (Forderung 2)

Man kann außerdem eine Dreierstromdichte $c\alpha^k$ definieren, welche die Rolle der Geschwindigkeit spielt. Dies folgt auch aus $\vec{v}_{op} = -\frac{i}{\hbar}[\vec{r}, \mathcal{H}]$.

3.2.3 Konstruktion des Spinorraums, Dirac-Darstellung

Frage: Wie viele Komponenten hat ein Spinor ψ und welche Form haben die Dirac-Matrizen?

Damit haben α^k und β die Eigenwerte ± 1 (da $(\alpha^k)^2 = \mathbb{1} = \beta^2$).

Aus dem Antikommutator $\{\beta, \alpha^k\} = 0$ folgt:

$$\begin{aligned} \alpha^k\beta &= -\beta\alpha^k \quad \Rightarrow \quad \alpha^k = -\beta\alpha^k\beta \\ \text{Sp}\alpha^k &= -\text{Sp}(\beta\alpha^k\beta) = -\text{Sp}(\alpha^k\beta^2) = -\text{Sp}(\alpha^k) \\ \Rightarrow \quad \text{Sp}(\alpha^k) &= 0 \\ \text{analog folgt: } \text{Sp}(\beta) &= 0 \end{aligned}$$

Die Zahl der Eigenwerte $+1$ und -1 muss gleich sein. $\rightarrow N$ ist gerade.

$N = 2$? Geht nicht, da es nur drei untereinander antikommutierende 2×2 Matrizen gibt (Paulimatrizen).

$N = 4$? Geht!

\Rightarrow Spinoren haben (mindestens) 4 Komponenten und die Dirac-Matrizen sind 4×4 Matrizen!

Standarddarstellung: Dirac-Darstellung

($\sigma^k = 2 \times 2$ Paulimatrizen, es gilt .

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad \alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\text{also } \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \alpha^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & +i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Ausblick:

$N = 4$ wird erklärt durch den Spin - $\frac{1}{2}$ - Freiheitsgrad und der Existenz von Antiteilchen, beides sind Konsequenzen der relativistischen Formulierung.

3.2.4 Kovariante Form der Dirac- Gleichung

Multipliziere die Dirac-Gleichung mit $\frac{\beta}{c}$.

$$-i\hbar\beta\partial_0\psi - i\hbar\beta\alpha^k\partial_k\psi + mc\psi = 0$$

Definition der γ -Matrizen

$$\boxed{\gamma^0 = \beta \quad \gamma^k = \beta\alpha^k}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} (\gamma^0)^\dagger &= \gamma^0 & (\gamma^k)^\dagger &= -\gamma^k \\ (\gamma^0)^2 &= \mathbb{1} & (\gamma^k)^2 &= \beta \alpha^k \beta \alpha^k \\ & & &= -(\alpha^k)^2 = -\mathbb{1} \end{aligned}$$

Zusammengefasst gilt für Antikommutatoren:

$$\boxed{\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1}}$$

Feynman-Slash: $\not{\psi} = \gamma^\mu\nu_\mu$

$$\longrightarrow (-i\hbar\not{\partial} + mc)\psi = 0$$

Mit der Konvention: $\hbar = 1 = c$ gilt:

$$(-i\not{\partial} + m)\psi = 0$$

Explizit:

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

Beachte: Unter der Lorentztransformation $x' = \Lambda x$ müssen neben den Koordinaten auch die **Spinoren** transformiert werden.

$$\begin{aligned} (-i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + mc)\psi(x) &= 0 \\ \rightarrow (-i\hbar\gamma^\mu\partial'_\mu + mc)\psi'(x') &= 0 \\ \text{mit } \psi'(x') &= S(\Lambda) \cdot \psi(x) \end{aligned}$$

S ist die Transformationsmatrix für die Spinoren.

Die γ -Matrizen sind in allen Inertialsystemen gleich, sie entsprechen 4-Vektoren in dem Sinne, dass sich die **Bilinearform**

$$\psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\psi = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$$

wie ein 4-Vektor transformiert.

3.2.5 Nachweis der Kovarianz

Gesucht ist eine Transformation $S(\Lambda)$ der Spinoren ($\psi' = S(\Lambda)\psi$), die gleichzeitig die Dirac-Gleichung forminvariant lässt.

Erinnerung: Λ ist eigentliche Lorentztransformation (Boosts oder Drehungen).

$$x'^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} x^\nu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \quad x' = \Lambda x$$

Die Transformation $S(\Lambda)$ ist eine 4×4 -Matrix, die von Λ abhängt. Es gilt:

$$\begin{aligned} \psi'(x') &= \psi'(\Lambda x) = S(\Lambda)\psi(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x') \\ \psi(x) &= S^{-1}(\Lambda)\psi'(x') = S^{-1}(\Lambda)\psi'(\Lambda x) \\ &= S(\Lambda^{-1})\psi'(\Lambda x) \\ \implies S(\Lambda^{-1}) &= S^{-1}(\Lambda) \end{aligned}$$

Forminvarianz der Dirac-Gleichung

$$\begin{aligned} \underbrace{(i\hbar\gamma^\mu \underbrace{\partial_\mu}_{\Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu} - mc)}_{\Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu} \underbrace{\psi(x)}_{S^{-1}(\Lambda)\psi'(x')} &= 0 \\ \underbrace{(i\hbar S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu - mc)}_{\gamma^\nu} \psi'(x') &= 0 \end{aligned}$$

$$\rightarrow \boxed{S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu = \gamma^\nu} \quad (5a)$$

$$\rightarrow \boxed{S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda) = \Lambda_\nu{}^\mu \gamma^\nu} \quad (5b)$$

Die umrahmte Gleichung ist die fundamentale Bestimmungsgleichung für die $S(\Lambda)$. Falls $S(\Lambda)$ existiert, ist die Kovarianz der Dirac-Gleichung bewiesen.

Um Gleichung 5b aus 5a zu erhalten, multiplizieren wir Gleichung(5a) von links mit $\Lambda^\sigma{}_\rho g_{\sigma\ \nu}$ und benutzen

$$\Lambda^\nu{}_\mu g_{\nu\sigma} \Lambda^\sigma{}_\rho \stackrel{*}{=} g_{\mu\rho} = g_{\rho\mu}$$

*) Dies ist die Orthogonalitätsbedingung der Lorentztransformation.

$$S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)g_{\rho\mu} = \Lambda^\sigma{}_\rho \underbrace{g_{\sigma\nu}\gamma^\nu}_{=\gamma_\sigma}$$

Explizite Konstruktion für S durch eine infinitesimale Lorentztransformation $\Delta\omega^\mu{}_\nu \ll 1$.

$$\Lambda^\mu{}_\nu = g^\mu{}_\nu + \Delta\omega^\mu{}_\nu$$

Aus der Invarianz von

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$$

folgt

$$\boxed{\Delta\omega^{\mu\nu} = -\Delta\omega^{\nu\mu}} \\ \rightarrow \Delta\omega^T = -g\Delta\omega g$$

Multiplizieren mit g von rechts an die Gleichung ergibt:

$$\rightarrow (\Delta\omega g)^T = -\Delta\omega g$$

$\rightarrow \Delta\omega$ ist antisymmetrisch.

$\Delta\omega$ hat sechs unabhängige Komponenten. Diese sind drei Boosts und drei Drehungen.

Zum Beispiel einen Boost in x -Richtung ist

$$-\Delta\omega^0{}_1 = \Delta\omega^{01} = \frac{\Delta v}{c}$$

oder eine Rotation um die x -Achse:

$$\Delta\omega^2{}_3 = -\Delta\omega^{32} = \Delta\varphi \\ \Lambda^{\mu\nu} = g^{\mu\nu} + \Delta\omega^{\mu\nu}$$

Entwickle $S(\Lambda^{\mu\nu})$ in $\Delta\omega^{\mu\nu}$

$$S_\Delta = \hat{1} - \frac{i}{4} \underbrace{\sigma_{\mu\nu}}_* \Delta\omega^{\mu\nu}$$

*)Die σ sind 4×4 Matrizen, die im 4-dimensionalen Raum der Wellenfunktion ψ operieren. Sie bestimmt man aus der Orthogonalitätsbedingung der Lorentztransformation.

$$S_\Delta(\Delta\omega^{\mu\nu}) = S_\Delta(-\Delta\omega^{\nu\mu}) = \hat{1} + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\nu\mu} \\ \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\mu\nu} = -\sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\nu\mu} = -\sigma_{\nu\mu} \Delta\omega^{\mu\nu}$$

$$\boxed{\sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu}}$$

Wir können auch $S S^{-1} = \mathbb{1}$ bis zur 1.Ordnung in $\Delta\omega$ entwickeln.

$$S^{-1} = \hat{\mathbb{1}} + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\mu\nu}$$

Einsetzen von S und S^{-1} in die Gleichung für γ ergibt:

$$\begin{aligned} S \gamma^\mu S^{-1} &= \Lambda^{\nu\mu} \gamma_\nu \\ &= \left(\hat{\mathbb{1}} - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\mu\nu} \right) \gamma^\alpha \left(\hat{\mathbb{1}} + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\mu\nu} \right) \\ &= (g^\alpha{}_\beta + \Delta\omega^\alpha{}_\beta) \gamma^\beta \end{aligned}$$

\Rightarrow Bedingung für σ und S :

$$\Delta\omega^\alpha{}_\beta \gamma^\beta = -\frac{i}{4} \Delta\omega^{\mu\nu} [\sigma_{\mu\nu}, \gamma^\alpha]$$

Diese Gleichung wird durch

$$\boxed{\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]}$$

erfüllt. Beweis siehe Übung. Eine infinitesimale Transformation ist dann

$$S_\Delta = 1 + \frac{1}{8} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \Delta\omega^{\mu\nu}.$$

\Rightarrow Bilde eine endliche Lorentztransformation.

$$\begin{aligned} \Delta\omega^{\mu\nu} &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 & \omega^{\mu\nu} &= N \Delta\omega^{\mu\nu} \\ \Rightarrow S(\omega^{\mu\nu}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} S(\Delta\omega^{\mu\nu})^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \Delta\omega^{\mu\nu} \right)^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \frac{\omega^{\mu\nu}}{N} \right)^N \end{aligned}$$

$$\longrightarrow \boxed{S(\omega^{\mu\nu}) = \exp \left(-\frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right)}$$

Diese Transformation existiert, somit ist die Kovarianz der Dirac-Gleichung gezeigt.

1. Raumspiegelungen $x' = -x \quad t' = t$

$$\Lambda^\mu{}_\nu = g^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$P \gamma^\mu P^{-1} = g^{\mu}{}^\mu \gamma^\mu$$

$$P = \text{Paritätstransformation}$$

$$P \gamma^0 P^{-1} = \gamma^0$$

$$P \gamma^i P^{-1} = -\gamma^i$$

Eine Lösung ist zum Beispiel

$$P = \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

P ist bis auf einen Phasenfaktor $e^{i\varphi}$ bestimmt.

2. Endliche Drehung um die z -Achse

Hier gilt dann für $\varphi \ll 1$

$$\begin{aligned} \omega^1_2 &= \varphi = -\omega^{12} = -\omega_{12} \\ \omega^2_1 &= -\varphi = +\omega^{21} = +\omega_{21} \end{aligned}$$

Per Definition ist es in diesem Fall nur notwendig eine σ -Matrix zu kennen. ?

$$\begin{aligned} \sigma_{12} &= \frac{i}{2} [\gamma_1, \gamma_2] = \frac{i}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & -\sigma_1 \\ +\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_2 \\ +\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} -\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

→ Analogie zur Drehung mit zwei Spinoren um die z -Achse.

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

D.h.

$$\begin{aligned} S(\Lambda) &= \exp(-\frac{i}{4}(\sigma_{12}\omega^{12} + \sigma_{21}\omega^{21})) = e^{\frac{i}{2}\sigma_{12}\varphi} \quad \text{mit } \sigma_{12}^2 = \mathbb{1} \\ S(\Lambda^{-1}) &= S^{-1}(\Lambda) = e^{-\frac{i}{2}\sigma_{12}\varphi} = S(\Lambda)^\dagger \end{aligned}$$

Im folgenden soll nun $S(\Lambda)$ berechnet werden:

$$\begin{aligned} S(\Lambda) &= e^{\frac{i}{2}\sigma_{12}\varphi} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m)!} \left(\frac{i\varphi}{2}\right)^{2m} \underbrace{\sigma_{12}^{2m}}_1 + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)!} \left(\frac{i\varphi}{2}\right)^{2m+1} \underbrace{\sigma_{12}^{2m+1}}_{\sigma_{12}} \\ &= \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2m}}_{\cos(\frac{\varphi}{2})} + i\sigma_{12} \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m+1)!} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^{2m+1}}_{\sin(\frac{\varphi}{2})} \\ &= \cos(\frac{\varphi}{2}) + i\sigma_{12} \sin(\frac{\varphi}{2}) = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

⇒ Keine Mischung der Spinorkomponenten.

Verhalten der oberen bzw. unteren Komponenten entspricht üblicher Rotation eines Spin $\frac{1}{2}$.

→ Wir identifizieren diese Freiheitsgrade mit dem Spin des Elektrons und $\frac{\hbar}{2}\sigma_{12}$ mit der z -Komponente des Spinoperators.

3. Boost in x -Richtung mit v

$$\omega \ll 1 \quad (v \ll c)$$

Hier gilt:

$$\begin{aligned}\omega_{01} &= -\omega_{10} =: -\omega \\ \omega^0_{1} &= -\omega = \omega_{01} = -\omega^{01} \\ \omega^1_{0} &= -\omega = -\omega_{10} = \omega^{10}\end{aligned}$$

Hierbei ist ω wie folgt definiert ($\tanh(\omega) = \frac{v}{c}$).

$$\begin{aligned}\Lambda^\mu_{\nu} &= \begin{pmatrix} \cosh(\omega) & -\sinh(\omega) & 0 & 0 \\ -\sinh(\omega) & \cosh(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \sigma_{01} &= \frac{i}{2} [\gamma_0, \gamma_1] \\ &= \frac{i}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -2\sigma_1 \\ -2\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = i\alpha_1 \quad \text{mit: } \alpha_1^2 = 1\end{aligned}$$

Einsetzen in die Transformationsmatrix ergibt:

$$S = e^{-\frac{i}{2}\sigma_{01}\omega} = e^{-\frac{1}{2}\alpha_1\omega} = S^\dagger$$

Betrachten die Inverse der Transformationsmatrix:

$$S^{-1} = e^{\frac{1}{2}\alpha_1\omega} \neq S^\dagger$$

$$\begin{aligned}S &= e^{-\frac{1}{2}\alpha_1\omega} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m)!} \left(\frac{-\omega}{2}\right)^{2m} \alpha_1^{2m} + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)!} \left(\frac{-\omega}{2}\right)^{2m+1} \alpha_1^{2m+1} \\ &= \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m)!} \left(\frac{+\omega}{2}\right)^{2m}}_{\cosh(\frac{\omega}{2})} - \alpha_1 \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)!} \left(\frac{+\omega}{2}\right)^{2m+1}}_{\sinh(\frac{\omega}{2})} \\ &= \cosh(\frac{\omega}{2}) - \alpha_1 \sinh(\frac{\omega}{2}) \\ &= \begin{pmatrix} \cosh(\frac{\omega}{2}) & 0 & 0 & -\sinh(\frac{\omega}{2}) \\ 0 & \cosh(\frac{\omega}{2}) & -\sinh(\frac{\omega}{2}) & 0 \\ 0 & -\sinh(\frac{\omega}{2}) & \cosh(\frac{\omega}{2}) & 0 \\ -\sinh(\frac{\omega}{2}) & 0 & 0 & \cosh(\frac{\omega}{2}) \end{pmatrix}\end{aligned}$$

\Rightarrow Mischung aller Spinorkomponenten des Lorentzboost. Vergleiche mit Lorentzboost:

$$\Lambda_\mu^\nu = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(g_\mu^\nu + \frac{\omega_\mu^\nu}{N} \right)^N \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} \cosh \omega & -\sinh \omega & 0 & 0 \\ -\sinh \omega & \cosh \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

vergleich liefert: $\cosh \omega = \gamma \quad \sinh \omega = \beta\gamma \quad \Rightarrow \quad \tanh \omega = \beta$

3.3 Lösungen der Dirac-Gleichung und der nicht relativistische Grenzfall

Einheiten Konvention $\boxed{c = 1 = \hbar}$

3.3.1 Ruhende Teilchen $\partial_t \psi = 0$

$$i\partial_t \psi = m\beta\psi$$

Die Dirac-Gleichung für ein räumlich unabhängiges Teilchen. Wir können 4 linear unabhängige Lösungen angeben, müssen jedoch die Zeitabhängigkeit beachten.

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

$$\begin{aligned} \psi_1^+ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imt} & \psi_2^+ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imt} \Bigg\} E = mc^2 \\ \psi_1^- &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{+imt} & \psi_2^- &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+imt} \Bigg\} E = -mc^2 \end{aligned}$$

Jeweils zwei Lösungen mit positiver und negativer Energie!
Bedeutung?

- 2 Lösungen mit positiver Energie entsprechen den **inneren Freiheitsgraden**.
 \implies Eigendrehimpuls = Spin.
- Lösungen negativer Energie entsprechen Antiteilchen, die erst im Rahmen der Quantenfeldtheorie konsistent behandelt werden können.

3.3.2 Ebene Wellen

Wir suchen Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung

$$\begin{aligned} (\square + m^2)\psi &= 0 \\ \rightarrow -p^2 + m^2 &= 0 \quad \Rightarrow E^2 = m^2 + \vec{p}^2 \\ \longrightarrow E &= \pm \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} \end{aligned}$$

Seien u_s und v_s Spinoren, so lässt sich abhängig von der Energie schreiben:

$$\begin{aligned} E > 0 \quad \psi^+(x) &= u_s(\vec{p}) e^{-ipx} = u_s(\vec{p}) e^{-ip_0 t + i\vec{p}\vec{x}} \\ E < 0 \quad \psi^-(x) &= v_s(\vec{p}) e^{ipx} = v_s(\vec{p}) e^{ip_0 t - i\vec{p}\vec{x}} \end{aligned}$$

Hierbei ist $p_0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} > 0$. Die Spinoren erfüllen mit $i\not{p}\psi = \pm\not{p}\psi$ die Dirac-Gleichung:

$$\begin{aligned} (\not{p} - m)u_s(\vec{p}) &= 0 \\ (\not{p} + m)v_s(\vec{p}) &= 0 \end{aligned}$$

Benutze zur Berechnung:

$$\begin{aligned} \not{p}\not{p} &= p_\mu \gamma^\mu p_\nu \gamma^\nu = p_\mu p_\nu \underbrace{\frac{1}{2} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}}_{2g^{\mu\nu}} \\ &= p_\mu p_\nu g^{\mu\nu} = p_\mu p^\mu \stackrel{*}{=} m^2 \end{aligned}$$

*) Das einzige Lorentzskalar, welches unter Transformationen konstant bleibt ist m^2 .
Es gilt also:

$$(\not{p} - m)(\not{p} + m)\psi = (\not{p}\not{p} - m^2)\psi = 0$$

D.h. ein Spinor $\psi' = (\not{p} + m)\psi$ erfüllt die Dirac-Gleichung, da

$$(\not{p} - m)\psi' = (\not{p} - m)(\not{p} + m)\psi = 0$$

für ein beliebiges ψ .

\Rightarrow Wir erhalten Lösungen z.B. indem wir $(\not{p} \pm m)$ auf die Basisvektoren

$$u_0 = \begin{pmatrix} \chi_s \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } \chi_\pm = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

anwenden.

$$\begin{aligned} (\not{p} + m)u_0 &= (p^\mu \gamma_\mu + m)u_0 = \begin{pmatrix} (E + m)\mathbb{1}_2 & -\vec{p}\hat{\vec{\sigma}} \\ \vec{p}\hat{\vec{\sigma}} & (-E + m)\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi_s \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (E + m)\chi_s \\ \vec{p}\hat{\vec{\sigma}} \cdot \chi_s \end{pmatrix} \\ \vec{p}\hat{\vec{\sigma}} &= p_x \sigma_x + p_y \sigma_y + p_z \sigma_z = \begin{pmatrix} p_z & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & -p_z \end{pmatrix} \\ \text{analog} \quad (\not{p} - m) &\begin{pmatrix} \chi_s \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

\rightarrow vier linear unabhängige Lösungen (Normierung später).

$$\begin{aligned} u_s(\vec{p}) &= \sqrt{\frac{E + m}{2m}} \begin{pmatrix} \chi_s \\ \frac{\vec{p}\hat{\vec{\sigma}}}{E + m} \chi_s \end{pmatrix} \\ v_s(\vec{p}) &= \sqrt{\frac{E + m}{2m}} \begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\hat{\vec{\sigma}}}{E + m} \chi_s \\ \chi_s \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die vollständigen Wellenfunktionen sind:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{p},s}^+(\vec{r}, t) &= u_s(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)} \quad \text{mit } E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} \\ \psi_{\vec{p},s}^-(\vec{r}, t) &= v_s(\vec{p}) e^{i(-\vec{p}\vec{r} + Et)} \end{aligned}$$

Zum Beweis der Orthogonalität benötigen wir zunächst die Definition des Skalarprodukts im Spinorraum. Hierzu führen wir den adjungierten Spinor $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_0$ ein. (vgl. hermitesch adjungiert: $\psi^\dagger = \psi^{T*}$.)

Damit gilt für die Dichte und den Strom:

$$\begin{aligned} j^\mu &= c \left(\psi^\dagger \psi, \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi \right) \\ &= c \left(\bar{\psi} \gamma^0 \psi, \bar{\psi} \vec{\gamma} \psi \right) \\ &= c \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \end{aligned}$$

Für die adjungierten Spinoren gilt:

$$\begin{aligned} \bar{u}_s = u_s^\dagger \gamma_0 &= \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \left(\chi_s^\dagger, \chi_s^\dagger \frac{\vec{p} \hat{\sigma}}{E+m} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \left(\chi_s^\dagger, -\chi_s^\dagger \frac{\vec{p} \hat{\sigma}}{E+m} \right) \\ \bar{v}_s &= \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \left(\chi_s^\dagger \frac{\vec{p} \hat{\sigma}}{E+m}, -\chi_s^\dagger \right) \\ \bar{u}_s \cdot u_{s'} &= \frac{E+m}{2m} \left(\chi_s^\dagger \chi_{s'} - \chi_s^\dagger \left(\frac{\vec{p} \hat{\sigma}}{E+m} \right)^2 \chi_{s'} \right) \end{aligned}$$

Mit der Identität $(\vec{p} \hat{\sigma})^2 = \vec{p}^2$ vereinfachen, wir das

$$\begin{aligned} \rightarrow \bar{u}_s u_{s'} &= \frac{E+m}{2m} \delta_{ss'} \left(1 - \frac{\vec{p}^2}{(E+m)^2} \right) = \delta_{ss'} \\ \bar{u}_s v_{s'} &= \frac{E+m}{2m} \left(\chi_s^\dagger \frac{\vec{p} \hat{\sigma}}{E+m} \chi_{s'} - \chi_s^\dagger \frac{\vec{p} \hat{\sigma}}{E+m} \chi_s \right) = 0 \\ \Rightarrow &\boxed{\begin{aligned} \bar{u}_s u_{s'} &= \delta_{ss'} & \bar{v}_s v_{s'} &= -\delta_{ss'} \\ \bar{u}_s v_{s'} &= 0 & \bar{v}_s u_{s'} &= 0 \end{aligned}}$$

Die umrahmte Gleichung gilt unabhängig vom Bezugssystem, da die rechten Seiten nicht vom Impuls abhängen.

Wir berechnen die Dichte $\rho = \frac{j^0}{c} = \bar{\psi} \gamma^0 \psi$ mit Hilfe von

$$\frac{\not{p}}{m} u_s = u_s \quad ((\not{p} - m) u_s = 0)$$

Es gilt nun:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_s^+ \gamma_0 \psi_s^+ &= \bar{\psi}_s^+ \underbrace{\frac{\not{p} \gamma_0 + \gamma_0 \not{p}}{2m}}_{\frac{1}{2m} \{ \not{p}, \gamma_0 \} = \frac{1}{2m} 2p_0 = \frac{E}{m}} \psi_s^+ \\ &= \frac{E}{m} \\ \bar{\psi}_s^- \gamma_0 \psi_s^- &\stackrel{-\frac{\not{p}}{m} v_s = v_s}{=} \bar{\psi}_s^- \frac{\not{p} \gamma_0 - \gamma_0 \not{p}}{2m} \psi_s^- = -\frac{E}{m} \bar{v}_s v_s \\ &= -\frac{E}{m} \end{aligned}$$

→ Die Dichten sind positiv für alle Lösungen, aber sie sind kein Lorentzskalar (aufgrund der Längenkontraktion unter Lorentztransformationen ist das verständlich). Der faktor $\frac{E}{m}$ kann auch geschrieben werden als:

$$\frac{E}{m} = \frac{\frac{E}{m_0}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \gamma \frac{E}{m_0}$$

und kompensiert die Längenkontraktion des Volumenelements $\frac{d^3x}{\gamma}$.

Berechnung der Stromdichte.

$$\begin{aligned} \vec{j} &= c\bar{\psi}\vec{\gamma}\psi & \psi &= \begin{cases} u_{\vec{p},s} & e^{i(\vec{p}\vec{r}-Et)} \\ v_{\vec{p},s} & e^{-i(\vec{p}\vec{r}-Et)} \end{cases} \\ \bar{u}_{\vec{p},s}\vec{\gamma}u_{\vec{p},s} &= \left(\chi_s^\dagger, -\chi_s^\dagger \frac{\vec{p}\vec{\sigma}}{E+m}\right) \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_s \\ \frac{\vec{p}\vec{\sigma}}{E+m}\chi_s \end{pmatrix} \frac{E+m}{2m} \\ &= \chi_s^\dagger \left(\vec{\sigma}(\vec{p}\vec{\sigma}) + (\vec{p}\vec{\sigma})\vec{\sigma}\right) \chi_s \frac{1}{2m} & \text{mit } \{\sigma_i, p_j\sigma_j\} = 2p_i \\ &= \frac{\vec{p}}{m} \\ \text{Ebenso gilt} \quad \bar{v}_{\vec{p},s}\vec{\gamma}v_{\vec{p},s} &= \frac{\vec{p}}{m} \end{aligned}$$

→ Die Stromdichte zeigt in \vec{p} -Richtung für ψ^+ und ψ^- .

→ Beachte $\psi^+ \sim e^{i\vec{p}\vec{r}}$ aber $\psi^- \sim e^{-i\vec{p}\vec{r}}$ bewegt sich in umgekehrter Richtung

3.3.3 Ankopplung des elektromagnetischen Feldes

Wir wenden das Prinzip der minimalen Kopplung an und ersetzen den Impulsoperator gemäß:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A} = \vec{\Pi}$$

Weiter addieren wir die potentielle Energie zum Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}} + q\Phi$$

Zusammenfassen für die restliche Rechnung:

$$\begin{aligned} p^\mu &\rightarrow p^\mu - qA^\mu & A^\mu &= (\Phi, \vec{A}) \\ i\hbar\partial^\mu &\rightarrow i\hbar\partial^\mu - qA^\mu \end{aligned}$$

Einsetzen in die Dirac-Gleichung ergibt:

$$(i\hbar\partial_\mu\gamma^\mu - qA_\mu\gamma^\mu - mc)\psi = 0$$

$$(i\cancel{\partial} - q\cancel{A} - mc) = 0$$

Die Gleichung (5) ist die Dirac-Gleichung im elektromagnetischem Feld (in eichinvarianter Form).

3.3.4 Nicht-relativistischer Grenzfall, Pauli-Gleichung

Ebene Welle für $|\vec{p}|/m \ll c$ ($mc^2 \gg c|\vec{p}|$)

$$u_s(\vec{p}) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \cdot \begin{pmatrix} \chi_s \\ \frac{\vec{p}\vec{\sigma}}{E+mc^2}\chi_s \end{pmatrix} \xrightarrow{E \rightarrow mc^2} \begin{pmatrix} \chi_s \\ \frac{\vec{p}\vec{\sigma}}{2mc^2}\chi_s \end{pmatrix}$$

Die unteren Komponenten sind um einen Faktor

$$\frac{|\vec{p}|}{mc} \approx \frac{v}{c}$$

kleiner. Die Dirac Gleichung in der hamiltonschen Schreibweise:

$$i\hbar\partial_t\psi = \left(\vec{\mathcal{L}}\vec{P}i\vec{\alpha} + q\Phi + m\beta\right)\psi$$

Ansatz:

$$\underline{\psi} = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} \quad \begin{array}{ll} \tilde{\phi} & : \text{„große Komponente“} \\ \tilde{\chi} & : \text{„kleine Komponente“} \end{array}$$

→ Separieren die schnellen zeitlichen Oszillationen ab (verursacht durch die dominante Energie mc^2).

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} &= e^{-imt} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \\ \Rightarrow i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} &= \vec{\Pi}\vec{\sigma} \begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix} + q\Phi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} - 2m \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \end{aligned}$$

χ ist um $\frac{v}{c} \approx \frac{|\vec{\Pi}|}{mc}$ kleiner als ϕ , d.h. wir können $\dot{\chi}$ und $e\Phi\chi$ vernachlässigen. Die Gleichung für χ ist dann

$$\chi = \frac{\vec{\Pi}\hat{\vec{\sigma}}}{2mc}\phi.$$

Einsetzen in die Gleichung (5) für die obere Komponente ergibt:

$$i\hbar\partial_t\phi = \left[\frac{1}{2m}(\vec{\Pi}\hat{\vec{\sigma}})^2 + e\Phi\right]\phi$$

Auswerten mit der Identität:

$$\begin{aligned} (\vec{a}\hat{\vec{\sigma}})(\vec{b}\hat{\vec{\sigma}}) &= \vec{a}\vec{b} + \hat{\vec{\sigma}}(\vec{a} \times \vec{b}) \quad \text{mit } [a, \sigma] = 0 = [b, \sigma] \\ \text{d.h. } (\vec{\Pi}\hat{\vec{\sigma}})^2 &= \vec{\Pi}^2 + i\hat{\vec{\sigma}}(\vec{\Pi} \times \vec{\Pi}) \end{aligned}$$

Aus Kapitel I.5.3 folgt für $\vec{\Pi}$

$$\begin{aligned} \vec{\Pi} &= m\vec{v}_{\text{op}} = -i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A} \\ \rightarrow \vec{\Pi} \times \vec{\Pi} &= iq\hbar\vec{B} \end{aligned}$$

Hiermit ergibt sich die **Pauli-Gleichung** zu:

$$i\hbar\partial_t\phi = \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 - \frac{\hbar}{2m} \vec{\sigma} \vec{B} + q\Phi \right] \phi$$

Im konstanten Magnetfeld $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad \text{div}\vec{A} = 0$$

Für die Drehimpulsoperatoren gilt:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

Somit erhalten wir

$$i\hbar\partial_t\phi = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} \underbrace{(\vec{L} + 2\vec{S})}_{\vec{\mu}} \vec{B} + \frac{e^2 A^2}{2m} + e\Phi \right] \phi$$

Das **magnetische Moment**

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} \\ \vec{\mu}_{\text{Bahn}} &= -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} \quad \text{mit } \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \\ \vec{\mu}_{\text{spin}} &= -g\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \quad \text{mit } g = 2 \end{aligned}$$

Die Dirac-Gleichung reproduziert die nicht relativistische Schrödingergleichung für ein Spin 1/2-Teilchen (z.B. Elektron) mit dem entsprechenden g-Faktor.

Aufgrund von sogenannten Strahlungskorrekturen gibt es noch kleine Abweichungen:

$$g - 2 \approx \frac{\alpha}{\pi} + O(\alpha^2)$$

3.3.5 Spin, Helizität, Chiralität

Das Verhalten unter Drehungen suggeriert die Einführung eines Spinoperators \hat{S}_i :

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{4} \varepsilon_{ijk} \sigma^{jk} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \hat{\Sigma}_i$$

Im Ruhesystem können wir beliebige Spinoren definieren.

$$\begin{aligned} \vec{n} \hat{\vec{S}} \psi &= \pm \frac{\hbar}{2} \psi \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} \\ \text{mit: } \psi &= \begin{pmatrix} \chi_s(\vec{n}) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_s(\vec{n}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Wobei χ_s ein Eigenvektor von $\vec{n}\hat{\sigma}$ ist. Explizit ergibt sich:

$$\chi_+(\vec{n}) = \begin{pmatrix} \cos(\vartheta/2) \\ \sin(\vartheta/2)e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}} \begin{pmatrix} 1+n_z \\ n_x + in_y \end{pmatrix}$$

Der Spin bewegter Teilchen, beispielsweise für eine ebene Wellen ist, gegeben durch:

$$\psi \propto u = \begin{pmatrix} \chi_s(\vec{n}) \\ \frac{\vec{p}\hat{\sigma}}{E+m}\chi_s(\vec{n}) \end{pmatrix}$$

Im Allgemeinen ist ψ also kein Eigenzustand von genau einer Spinachse für beliebige \vec{p} . Für $\vec{p} = |\vec{p}|\vec{e}_z$ und $\chi = \chi_s(\vec{e}_z)$ gilt zum Beispiel:

$$\vec{p} = |\vec{p}|\vec{e}_z \quad \chi = \chi_s(\vec{e}_z) \Rightarrow \sigma_z \psi_{\pm} = \pm \psi$$

Damit ist ψ_{\pm} ein Eigenzustand des Spins in z -Achse mit Eigenwert ± 1 .

Aber für $\chi = \chi_s(\vec{e}_x)$ gilt:

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_z \chi_{\pm}(\vec{e}_x) &= -\sigma_z \sigma_x \chi_{\pm}(\vec{e}_x) = \mp \sigma_z \cdot \chi_{\pm}(\vec{e}_x) \\ &\neq \sigma_x \chi_{\pm}(\vec{e}_x) = \pm \chi_{\pm}(\vec{e}_x) \end{aligned}$$

Das heißt eine ebene Welle in z -Richtung ist nur ein Eigenzustand des Spinors in z -Richtung. Die räumliche Bewegung ist also an die Spin Richtung gekoppelt. Man spricht von Spin-Bahn-Kopplung.

Allgemein gilt: Ebene Welle in \vec{p} -Richtung sind Eigenzustände zum Spinoperator in diese Richtung.

Man definiert sich daher einen sogenannten Helizitätsoperator $\hat{h}(\vec{p})$, welcher den Spin in Impulsrichtung beschreibt:

$$\hat{h}(\vec{p}) = \hat{p}\hat{\Sigma}$$

Man definiert außerdem die Eigenzustände des Helizitätsoperators $\hat{h}(\vec{p})$:

$$u_{\pm}(\vec{p}) := \begin{pmatrix} \chi_{\pm}(\hat{p}) \\ \frac{\vec{p}\hat{\sigma}}{E+m}\chi_{\pm}(\hat{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{\pm}(\hat{p}) \\ \frac{\pm|\vec{p}|}{E+m}\chi_{\pm}(\hat{p}) \end{pmatrix}$$

Diese haben offensichtlich die Eigenwerte ± 1 .

Grenzfall masseloser Teilchen, Chiralitätsoperator:

Für den Grenzfall masseloser Teilchen wie Neutrinos oder Graphen definiert man den sogenannten Chiralitätsoperator:

$$\gamma_5 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Der Antikommutator ist dabei $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0$. Es gilt außerdem $[\gamma_5, \hat{\Sigma}_i] = 0$. $\hat{\Sigma}$ und γ^5 haben also gemeinsame Eigenzustände.

Für $m \rightarrow 0$ ergibt sich dann:

$$\gamma_5 u_\pm(\vec{p}) = \pm u_\pm(\vec{p})$$

Für Raumspiegelungen, welche durch den Paritätsoperator \hat{P} beschrieben werden, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \Lambda_\nu^\mu = g^{\mu\nu} &\Rightarrow \hat{P} \gamma^\mu \hat{P}^{-1} = g^{\mu\mu} \gamma^\mu \\ &\Leftrightarrow \hat{P} \gamma^0 \hat{P}^{-1} = \gamma^0 \quad \hat{P} \gamma^i \hat{P}^{-1} = \gamma^i \quad \text{mit: } i = 1, 2, 3 \\ &\Rightarrow \hat{P} = e^{i\varphi} \gamma_0 \\ &\Rightarrow \hat{P} \gamma_5 \hat{P}^{-1} = -\gamma_5 \end{aligned}$$

Der Chiralitätsoperator hat also eine negative Parität unter Raumspiegelungen. Es sind also Lösungen negativer Chiralität möglich.

Neutrinos werden allerdings erstaunlicherweise nur mit positiver Helizität beobachtet. Sie verletzen also die Parität!

3.3.6 Zitterbewegung

Bis jetzt wurden nur stationäre Zustände der Dirac-Gleichung berechnet. Wie sehen die Lösungen der zeitabhängigen Dirac-Gleichung aus?

Betrachte Wellenpakete

Wellenpaket aus Zuständen positiver Energie:

$$\begin{aligned} \vec{\psi}^+(x) &= \int d^3p \underbrace{\frac{m}{(2\pi)^2 E}}_{\text{Normierung}} \sum_{s=\pm 1} b_s(\vec{p}) u_s(\vec{p}) e^{-ipx} \\ b_s(\vec{p}) &\hat{=} \text{komplexe Koeffizienten} \\ u_s(\vec{p}) &\hat{=} \text{freie Spinoren positiver Energie} \end{aligned}$$

Die Gesamtwahrscheinlichkeit ist:

$$\int d^3x \ j^0(x, t) = \int d^3x \ |\psi^{(+)\dagger}(\vec{x}, t)|^2$$

Mit der Orthogonalität von u_s und

$$\int d^3x \ e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\vec{x}} = (2\pi)^3 \delta(\vec{p}-\vec{p}')$$

folgt:

$$\int d^3x \ j^0(x, t) = \sum_{s=\pm 1} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} |b_s(\vec{p})|^2 = 1$$

- übliche Normierungsbedingung wie bei den Pauli Spinoren.
- zeitunabhängiges j^0
- Gesamtstrom für $\psi^{(+)}(x)$

$$\begin{aligned}\vec{j} &= \int d^3x \psi^{(+)\dagger}(x) \vec{\alpha} \psi^{(+)}(x) \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m^2}{E^2} b_s^*(\vec{p}) b_{s'}(\vec{p}) u_s^+(\vec{p}) \vec{\alpha} u_{s'}(\vec{p})\end{aligned}$$

Benutzte Gordon-Identität (Zerlegung)

$$\begin{aligned}2m \bar{u}_s(\vec{p}) \gamma^\mu u_{s'}(\vec{p}') &= \bar{u}_s(\vec{p}) \dots \\ &\left[\underbrace{(p^\mu + p'^\mu)}_{\text{Konvektionsstrom}} + i \underbrace{\sigma^{\mu\nu} (p_\nu - p'_\nu)}_{\text{Spinstrom}} \right] u_{s'}(\vec{p}') \\ \vec{j} &= \sum_{s=\pm 1} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} |b_s(\vec{p})|^2 \frac{\vec{p}}{E} = \left\langle \frac{\vec{p}}{E} \right\rangle\end{aligned}$$

- Gesamtstrom entspricht dem quantenmechanischen Erwartungswert der Gruppengeschwindigkeit.

$$\vec{v} = \frac{\partial E}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}}{E}$$

- Der Gesamtstrom ist zeitunabhängig

\Rightarrow Wellenpakete aus Zuständen positiver Energie verhalten sich wie in der nicht relativistischen Quantenmechanik!

Aber: $u_s(\vec{p})$ sind kein vollständiges Basissystem.

\longrightarrow Wir können nicht alle Wellenfunktionen ausdrücken.

\longrightarrow Wir benötigen Spinoren negativer Energie.

Allgemeines Wellenpaket

Zur Zeit $t = 0$ sei $\psi(\vec{x}, 0)$ ein beliebiger Spinor (z.B. $\psi \sim f(x) \begin{pmatrix} \chi \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow$ keine Anteile negativer Energie.)

$$\psi(x, t) = \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} \sum_{s=\pm 1} (b_s(\vec{p}) u_s(\vec{p}) e^{-ipx} + d_s(\vec{p}) v_s(\vec{p}) e^{ipx})$$

Die Koeffizienten b_s und d_s sind durch $\psi(\vec{x}, 0)$ bestimmt.

Wegen der Orthogonalität gilt:

$$\begin{aligned}b_s(\vec{p}) &= \frac{E}{m} \int d^3x e^{-ipx} \bar{u}_s(\vec{p}) \vec{\psi}(\vec{x}) \\ d_s(\vec{p}) &= -\frac{E}{m} \int d^3x e^{-ipx} \bar{v}_s(\vec{p}) \vec{\psi}(\vec{x})\end{aligned}$$

Im Allgemeinen sind $b_s \neq 0$, $d_s \neq 0$ und $\psi(x, t)$ setzt sich aus Lösungen positiver und negativer Energie zusammen.

Welche Konsequenz entstehen hieraus?

Dichte

$$\int d^3x \psi^\dagger(x, t) \psi(x, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} \sum_{s=\pm 1} (|b_s|^2 + |d_s|^2)$$

→ Die Dichte ist normierbar und zeitunabhängig.

Strom

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \int d^3x \bar{\psi}(x, t) \vec{\gamma} \psi(x, t) \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\vec{p}}{E} \sum_{s=\pm 1} (|b_0(\vec{p})|^2 + |d_0(\vec{p})|^2) \right. \\ &\quad \left. + 2\text{Re} \left(i \sum_{ss'} b_s^*(-\vec{p}) d_s(\vec{p}) \bar{u}_s(-\vec{p}) \vec{\gamma} v_{s'}(\vec{p}) e^{2iEt} \right) \right\} \end{aligned}$$

Der 1. Term ist eine Mittelung über die Gruppengeschwindigkeit $\frac{\vec{p}}{E}$.

Der 2. Term oszilliert zeitlich mit der Frequenz:

$$\frac{2E}{\hbar} > \frac{2mc^2}{\hbar} = 2 \cdot 10^{21} \text{ Hz}$$

Diese Frequenz hängt von der Amplitude des Betrags mit negativer Energie ab.

Die Amplitude der Zitterbewegung ist ein Mittelwert von x .

Wann ist die Zitterbewegung relevant?

Fourier-Komponenten mit $|\vec{p}| \lesssim \frac{\hbar}{L}$.

Damit die Zitterbewegung auftritt, muss $|\vec{p}| \gtrsim mc$ sein.

$$\frac{\hbar}{L} \geq mc \quad \Rightarrow \quad L \leq \frac{\hbar}{mc} = \lambda_c$$

Ein Wellenpaket das Größe $\lesssim \lambda_c$ hat, vollführt Zitterbewegungen.

Betrachtung des Schwerpunktes $\langle \vec{x} \rangle$ liefert eine Abschätzung für eine räumliche Oszillation.

$$\lambda_c \sim 4 \cdot 10^{-13} \text{ m}$$

⇒ Schwer beobachtbar im Vakuum. Bei einer Realisierung dieser Zitterbewegung im Rahmen

der Festkörperphysik wird die Fermi-Geschwindigkeit v_f

$$v_f \sim 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

anstelle der Lichtgeschwindigkeit benutzt.

⇒ Charakteristische Energie („Bandlücke“)

$$E_g \sim mc^2 \lesssim eV \quad \Rightarrow \quad \lambda_c \sim \frac{\hbar v_f}{E_g} = 10^{-9} \text{ m}$$

$$\frac{E_g}{\hbar} \lesssim 10^{15} \text{ Hz}$$

3.3.7 Löchertheorie

Bisher wurden Lösungen negativer Energie ignoriert. Lösungen positiver Energie können durch eine Wechselwirkung mit einem Strahlungsfeld in Zustände negativer Energie übergehen.

Problem:

Die Materie wird instabil.

Ausweg: Dirac 1930

Alle Zustände negativer Energie sind besetzt. Wegen des Pauliverbots sind somit die Zustände negativer Energie für die Elektronen unerschöpflich:

Der Vakuumzustand besteht aus einem See von unendlich vielen Teilchen negativer Energie, die alle Zustände besetzen.

Anregung des Vakuums:

Ein Elektron aus dem Diracsee wird in einem Zustand positiver Energie angeregt. Zurück bleibt ein Loch im Diracsee mit folgenden Eigenschaften:

- Ladung: $-q_e = e > 0$
- Wellenfunktion des ursprünglichen Elektrons

$$v_s(p)e^{ipx} = v_s(p)e^{i(E_p t - \vec{p}\vec{x})}$$

mit der Energie $-E_p > 0$ und dem Impuls $-\vec{p}$. Ist der Zustand nicht besetzt, so ist der Energieunterschied größer 0.

- Spin: $-s_{\frac{\hbar}{2}}$

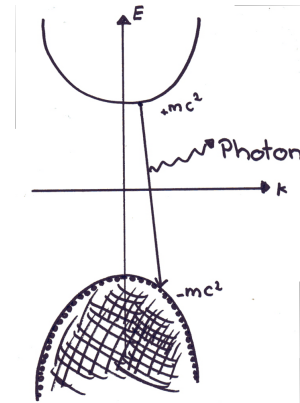
Interpretation

Das Loch verhält sich wie ein Teilchen mit der Energie E , Impuls \vec{p} , Ladung $+e$ und Spin $s_{\frac{\hbar}{2}}$.
 \Rightarrow Antiteilchen (Positron)

Das Antiteilchen wurde experimentell nachgewiesen.

Probleme:

- In der Diractheorie ist die Energie des Vakuums unendlich, und die Wechselwirkung zwischen den Teilchen wird vernachlässigt.
- Die Dirac-Theorie dient der Beschreibung von Ein-Teilchen-Systemen. Im Dirac-See existieren aber unendlich viele Löcher.
- Es bleibt unklar, was für die Symmetriebrechung sorgt, die dazu führt, dass Elektronen und nicht Positronen unbesetzte Zustände besetzen.



Kapitel 4:

Quantenfeldtheorie

Motivation

- relativistische Einteilchentheorie führt zu Widersprüchen.
- Kerne, Atome, Moleküle, Festkörper bestehen aus großer Anzahl Teilchen
- Elementarteilchen- und -anregungen können erzeugt oder vernichtet werden

4.1 Teilchensysteme

4.1.1 Ein Teilchen

Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$
Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = \mathcal{H}\psi \quad \mathcal{H} = T + U \quad U = U(\vec{r}) \quad T = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

4.1.2 Zwei identische Teilchen

Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ hängt nun von beiden Koordinaten ab.

Beide Teilchen sind identisch, d.h. wenn wir die beiden Koordinaten vertauschen, darf sich die Physik nicht ändern.

z.B. Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = W(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2 \\ \implies \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= e^{i\varphi} \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \end{aligned}$$

In der Praxis kommen zwei Fälle vor

$$\begin{array}{ll} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) & \text{Bosonen (Photon, Phonon)} \\ & \text{Teilchen mit ganzem Spin} \\ -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) & \text{Fermionen (Elektron)} \\ & \text{Teilchen mit halbzahligem Spin} \end{array}$$

Wenn die Teilchen sich jeweils in der Wellenfunktion $\phi_1(\vec{r})$ oder $\phi_2(\vec{r})$ befinden, so erhalten wir die Zweiteilchenwellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \pm \phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)] \\ \text{mit } + &\text{ für Bosonen} \\ \text{und } - &\text{ für Fermionen} \end{aligned}$$

Folge: Pauli-Verbot für zwei Fermionen im gleichen Orbital $\phi_1 = \phi_2$, da sonst gilt:

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2) - \phi_1(\vec{r}_2)\phi_1(\vec{r}_1)] = 0$$

Hamiltonoperator enthält die Einteilchenhamiltonoperatoren und die Zweiteilchenwechselwirkung

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 &= \sum_{\alpha=1}^2 \mathcal{H}(\vec{r}_{\alpha}, \vec{p}_{\alpha}) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ \text{wobei} \quad \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) &= T(\vec{p}) + U(\vec{r}) \end{aligned}$$

z.B. Coulomb-Wechselwirkung

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

4.1.3 Viele Teilchen

Vereinfachte Schreibweise mit (Anti-) Symmetrisierungsoperator S_+ (S_-).

Dieser macht aus dem Produkt von n Wellenfunktionen die symmetrisierte Form, bei der alle Koordinaten permutiert werden (Bei Fermionen ergibt jede Permutation ein Minuszeichen).

Wellenfunktion für N Teilchen ist:

$$\psi_{\{\pm\}}^{\pm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} S_{\pm}(\phi_{i_1}(\vec{r}_1), \dots, \phi_{i_N}(\vec{r}_N))$$

Für Fermionen kann dies als Slater-Determinante geschrieben werden:

$$\psi_N^- = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{i_1}(\vec{r}_1) & \phi_{i_2}(\vec{r}_1) & \dots & \phi_{i_N}(\vec{r}_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{i_1}(\vec{r}_N) & \phi_{i_2}(\vec{r}_N) & \dots & \phi_{i_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}$$

Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H}_N = \sum_{\alpha=1}^N \mathcal{H}(\vec{r}_{\alpha}, \vec{p}_{\alpha}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V(\vec{r}_{\alpha}, \vec{r}_{\beta})$$

Für allgemeine Zustände bilden die $\psi_{\{i\}}^{\pm}$ für alle $\{i\}$ eine Basis im N -Teilchen Hilbertraum.

Es gilt in Ket- Schreibweise

$$|\psi_N\rangle = \sum_{\{i\}} c_{i_1} \dots c_{i_N} S^{\pm} (|i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_N\rangle)$$

Die Zustände können vereinfacht in der linear unabhängigen sogenannten Besetzungszahlbasis dargestellt werden. Wir wählen für jedem äquivalenten Zustand einen Vertreter aus.

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \begin{cases} S^{-} (|i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_N\rangle) & \text{Fermionen} \\ \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} S^{+} (|i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_N\rangle) & \text{Bosonen} \end{cases}$$

n_i gibt an wie vielfach der Zustand i besetzt wird. Für Fermionen gilt $n_i = 0, 1$ für Bosonen $n_i = 0, 1, 2, \dots$

Zusammen:

$$N = \sum_i^{\infty} n_i$$

Besetzungszustände bilden eine vollständige Orthonormalbasis im N -Teilchen Hilbertraum.

$$\begin{aligned} \langle n_1, n_2, \dots | n'_1, n'_2, \dots \rangle &= \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \\ \sum_{n_1=0}^{1(\infty)} \sum_{n_2=0}^{1(\infty)} \dots \delta_{N, \sum_i n_i} | n_1, n_2, \dots \rangle \langle n_1, n_2, \dots | &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

4.1.4 Fockraum

Wir bilden die direkte Summe aller Hilberträume \mathcal{H}_N mit $N = 0, 1, 2, \dots$

$$\mathcal{F} = \oplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N \quad \text{Fockraum}$$

Die Besetzungszahlbasis ohne Einschränkung ($\sum_i n_i = N$) ist eine VONB im Fockraum, d.h. es gilt

$$\sum_{n_1=0}^{1(\infty)} \sum_{n_2=0}^{1(\infty)} \dots | n_1, n_2, \dots \rangle \langle n_1, n_2, \dots | = \mathbb{1} \quad \text{für Fermionen (Bosonen).}$$

\mathcal{H}_0 enthält einen Zustand ohne Teilchen.

→ Vakuumzustand $|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle \left(\langle 0 | 0 \rangle = 1 \right)$

4.2 Erzeuger und Vernichter

Um Operatoren im Fockraum in einer teilchenzahlunabhängigen Weise auszudrücken, führen wir sog. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein, die Hilberträume mit verschiedenen Teilchenzahlen verbinden.

4.2.1 Bosonen:

Erzeugungsoperator erhöht die Besetzungszahl um 1

$$a_i^\dagger |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\dots n_i + 1 \dots\rangle$$

Der adjungierte Operator erniedrigt Besetzung um 1

$$a_i |\dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i} |\dots n_i - 1 \dots\rangle$$

Insbesondere gilt für den Vakuumzustand:

$$a_i |0\rangle = 0 \quad \text{f.a. } i$$

Aus der Definition folgen die Vertauschungsrelationen

$$[a_i, a_j] = 0 \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

Beweis

$$\begin{aligned} & [a_i^\dagger, a_j^\dagger] |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \quad i \neq j \\ &= (a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger) |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \\ &= (\sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j + 1} - \sqrt{n_j + 1} \sqrt{n_i + 1}) |\dots, n_{i+1}, \dots, n_{j+1}, \dots\rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & [a_i, a_j^\dagger] |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \\ &= (a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i) |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \\ &\stackrel{(i \neq j)}{=} \underbrace{(\sqrt{n_i} \sqrt{n_j + 1} - \sqrt{n_j + 1} \sqrt{n_i})}_{=0} |\dots, n_{i-1}, \dots, n_{j+1}, \dots\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & [a_i, a_i^\dagger] |\dots, n_i, \dots\rangle \\ &= (a_i a_i^\dagger - a_i^\dagger a_i) |\dots, n_i, \dots\rangle \\ &= a_i \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_{i+1}, \dots\rangle - a_i^\dagger \sqrt{n_i} |\dots, n_{i-1}, \dots\rangle \\ &= (n_i + 1) |\dots, n_i, \dots\rangle - n_i |\dots, n_i, \dots\rangle \\ &= |\dots, n_i, \dots\rangle \quad \text{vgl. } [a, a^\dagger] = 1 \quad (\text{harm. Oszi.}) \end{aligned}$$

Alle Zustände können aus dem Vakuumzustand erzeugt werden:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \left(a_1^\dagger\right)^{n_1} \left(a_2^\dagger\right)^{n_2} \dots |0\rangle$$

Um die Teilchenzahl festzustellen, konstruiert man den Besetzungszahloperator: $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$ mit

$$\hat{n}_i |\dots n_i \dots\rangle = a_i^\dagger a_i |\dots n_i \dots\rangle = n_i |\dots n_i \dots\rangle$$

Gesamtteilchenzahloperator $\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i$

$$\langle N \rangle = \langle n_1 \dots | \hat{N} | n_1 \dots \rangle = \sum n_i$$

Für nicht wechselwirkende Teilchen können wir die Eigenzustände des Hamiltonoperators als Einteilchenzustände benutzen ($\mathcal{H}_1 \phi_i = \varepsilon_i \phi_i$).

Der Vielteilchen-Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i \\ \langle \mathcal{H} \rangle &= \langle n_1 \dots | \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i | n_1 \dots \rangle = \sum \varepsilon_i n_i \end{aligned}$$

4.2.2 Fermionen

Wegen der Antisymmetrie unter Vertauschung zweier Teilchen muss auf die Reihenfolge der Anwendung fermionscher Operatoren geachtet werden.

$$\begin{aligned} S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle &= a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger \dots a_{i_N}^\dagger |0\rangle \\ S_- |i_2, i_1, \dots, i_N\rangle &= a_{i_2}^\dagger a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_N}^\dagger |0\rangle \\ &= -S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \\ \implies a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger + a_{i_2}^\dagger a_{i_1}^\dagger &= 0 \\ \left\{ a_{i_1}^\dagger, a_{i_2}^\dagger \right\} &= 0 \quad \text{Antikommutator} \\ \text{allg. } \left\{ a_i^\dagger, a_j^\dagger \right\} &= 0 \end{aligned}$$

es folgt für $i = j$:

$$a_i^\dagger a_i^\dagger = \left(a_i^\dagger\right)^2 = 0$$

Alle Zustände können aus dem Vakuum erzeugt werden die Reihenfolge muss einmal festgelegt werden.

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \left(a_1^\dagger\right)^{n_1} \left(a_2^\dagger\right)^{n_2} \dots |0\rangle$$

Für Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren folgt:

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |\dots n_i \dots\rangle &= (1 - n_i) \underbrace{(-1)^{\sum_{j < i} n_j}}_{=p_i} |\dots n_i + 1 \dots\rangle \\ a_i |\dots n_i \dots\rangle &= n_i p_i |\dots n_i - 1 \dots\rangle \end{aligned}$$

Beachte: $n_i = 0, 1$. Besetzungszahloperator $\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i$

$$\hat{n}_i |\dots n_i \dots\rangle = n_i |\dots n_i \dots\rangle$$

Algebra folgt zum Beispiel aus:

$$\begin{aligned} & \{a_i, a_i^\dagger\} |\dots n_i \dots\rangle \\ = & (a_i a_i^\dagger + a_i^\dagger a_i) |\dots n_i \dots\rangle \\ = & a_i(1 - n_i) |\dots n_i + 1 \dots\rangle + a_i^\dagger n_i |\dots n_i - 1 \dots\rangle \\ = & [(n_i + 1)(1 - n_i) + n_i(2 - n_i)] |\dots n_i \dots\rangle \\ \stackrel{n^2=n}{=} & |\dots n_i \dots\rangle \\ \Rightarrow \{a_i, a_i^\dagger\} = & 1 \end{aligned}$$

Es gilt für Fermionen

$\{a_i, a_j\} = 0$	$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$	$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}$
--------------------	------------------------------------	--------------------------------------

4.3 Operatoren in zweiter Quantisierung

4.3.1 Einteilchenoperator

$$T = \sum_{\alpha=1}^N T_{\alpha} \quad \left(\text{z.B. } T_{\alpha} = \frac{p_{\alpha}^2}{2m} \right)$$

In Basis $|i\rangle$ gilt:

$$T_{ij} = \langle i | T | j \rangle$$

$$\text{und } t = \sum_{ij} T_{ij} |i\rangle \langle j|$$

Zusammen

$$T = \sum_{ij} T_{ij} \underbrace{\sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha}}_O$$

Die Wirkung von O auf einen Zustand ist es ein Teilchen im Zustand $|j\rangle$ durch eines im Zustand $|i\rangle$ zu ersetzen. Die Wirkung ist identisch zum Operator $a_i^{\dagger} a_i$, d.h. es gilt

$$a_i^{\dagger} a_i = \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha}.$$

Wir erhalten

$$T = \sum_{ij} T_{ij} a_i^{\dagger} a_j$$

Allgemeine Form eines Einteilchenoperators unabhängig von der Teilchenzahl!

4.3.2 Zweiteilchenoperator

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V(\vec{r}_{\alpha}, \vec{r}_{\beta})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ijkm} \sum_{\alpha \neq \beta} \underbrace{\langle i |_{\beta} \langle j |_{\alpha} V | k \rangle_{\alpha} | m \rangle_{\beta}}_{V_{ijklm}} |i\rangle_{\alpha} |j\rangle_{\beta} \langle k|_{\alpha} \langle m|_{\beta}$$

$$= a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_m a_k$$

wobei gilt

$$\sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_{\alpha} |j\rangle_{\beta} \langle k|_{\beta} \langle m|_{\alpha} = \sum_{\alpha \neq \beta} \underbrace{|i\rangle_{\alpha} \langle k|_{\alpha}}_{a_i^{\dagger} a_k} \underbrace{|j\rangle_{\beta} \langle m|_{\beta}}_{a_j^{\dagger} a_m} - \underbrace{\langle k | j \rangle}_{\delta_{kj}} \sum_{\alpha} \underbrace{|i\rangle_{\alpha} \langle m|_{\alpha}}_{a_i^{\dagger} a_m}$$

Allgemeiner Zweiteilchenoperator:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

Matrixelement:

$$V_{ijkl} = \int d^3x_1 d^3x_2 \phi_i^*(\vec{x}_1) \phi_j^*(\vec{x}_2) V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \phi_k(\vec{x}_1) \phi_l(\vec{x}_2)$$

4.3.3 Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

Der erste Term beschreibt die kinetische Energie in der Eigenbasis von \mathcal{H}_1 , der zweite Term die Wechselwirkung zwischen jeweils zwei Teilchen.

Der Hamiltonoperator hat folgende Eigenschaften:

- Operator im Fockraum unabhängig von Teilchenzahl
- für Bosonen und Fermionen identisch
- aufgrund des nicht quadratischen Terms $\sim a^\dagger a^\dagger a a$ im Allgemeinen nicht lösbar

4.4 Feldoperatoren

4.4.1 Basiswechsel

Der Wechsel von einer Basis $\{|i\rangle\}$ in eine Basis $\{|\lambda\rangle\}$ erfolgt wie bekannt durch:

$$|\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\lambda\rangle$$

Operatoren transformieren sich wie folgt:

$$\begin{aligned} a_\lambda^\dagger &= \sum_i \langle i|\lambda\rangle a_i^\dagger \\ a_\lambda &= \sum_i \langle \lambda|i\rangle a_i \end{aligned}$$

Die Vertauschungsrelationen bleiben unter Basistransformationen erhalten.

$$\begin{aligned} [a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger]_\pm &= \sum_{ij} \underbrace{[a_i, a_j^\dagger]_\pm}_{\delta_{ij}} \langle \lambda|i\rangle \langle j|\lambda'\rangle \\ &= \langle \lambda| \underbrace{\sum_i |i\rangle \langle i|}_{\mathbb{1}} |\lambda'\rangle = \langle \lambda|\lambda'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \end{aligned}$$

4.4.2 Ortsdarstellung

Für die Ortsbasis gilt $\phi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | i \rangle$

Die entsprechenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren heißen **Feldoperatoren**.

$$\boxed{\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_i \phi_i(\vec{r}) a_i \quad \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_i \phi_i^*(\vec{r}) a_i^\dagger}$$

Dabei vernichtet $\hat{\Psi}(\vec{r})$ ein Teilchen am Ort \vec{r} und $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$ erzeugt eines.

Die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}(\vec{r}')]_\pm &= [\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')]_\pm = 0 \\ [\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')]_\pm &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

Beispiele für Operatoren: Kinetische Energie:

$$\hat{T} = \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left(\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} \right) \hat{\Psi}(\vec{r})$$

Potentielle Energie:

$$\hat{U} = \int d^3r U(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r})$$

Teilchendichte:

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}) = \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r})$$

Zweiteilchenoperator:

$$\hat{V} = \int d^3r d^3r' \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r})$$

Vielteilchenhamiltonoperator;

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{U}$$

4.4.3 Bewegungsgleichung

Die Heisenberg-Gleichung für Felder

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \hat{\Psi}(\vec{r}, t) &= [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\mathcal{H}}] \\ \dots &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) + \frac{1}{2} \int d^3r' \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}', t) V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

- Für $V = 0$ erinnert die Bewegungsgleichung an die Einteilchen- Schrödingergleichung.
→ Bekannte Methoden können zur Lösung genutzt werden.
- $V \neq 0$ („many-body-problem“)
Die Gleichung ist nicht linear in den Feldoperatoren (außerdem integro-differential).
- Stromdichte: Aus den Bewegungsgleichungen für $\hat{\Psi}$ und $\hat{\Psi}^{\dagger}$ folgt:

$$\begin{aligned} \hat{n}(\vec{r}, t) &= \text{div} \hat{j} \\ \text{mit } \hat{j} &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\hat{\Psi}^{\dagger} \nabla \hat{\Psi} - (\nabla \hat{\Psi}^{\dagger}) \hat{\Psi} \right) \end{aligned}$$

4.4.4 Impulsdarstellung / Feynmandiagramme

Impulsdarstellung, insbesondere für translationsinvariante Systeme.

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Algebra für $a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^{\dagger}$

$$\begin{aligned} [a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}] &= 0 \\ [a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}] &= \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \end{aligned}$$

Hamiltonoperator

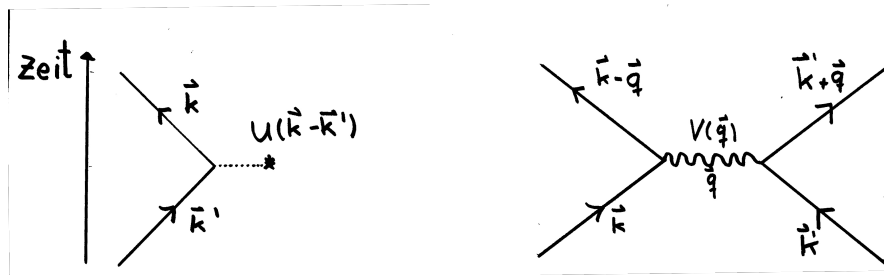
$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} U_{\vec{k}-\vec{k}'} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}'} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger V_{\vec{q}} a_{\vec{k}'} a_{\vec{k}}$$

Die Matricelemente sind

$$U_{\vec{k}-\vec{k}'} = \int d^3r \quad U(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}}$$

$$V_{\vec{q}} = \int d^3r \quad V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}}$$

Die Potential- und Wechselwirkungs-Terme können grafisch in sogenannten Feynman-Diagramme repräsentiert werden.



4.4.5 Spin

Feldoperatoren erhalten zusätzlichen Index σ für den Spin. Es gilt

$$\left[\hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \right]_{\pm} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Einteilchenoperatoren enthalten Summen über Spin. Zum Beispiel

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \hat{n}_{\sigma}(\vec{r})$$

Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\sigma} \int d^3r \psi_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + U(\vec{r}) \right) \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

$$+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3r d^3r' \psi_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

Bemerkung:

Die Wechselwirkung ist unterschiedlich zwischen Teilchen mit gleichem und ungleichem Spin.

Spindichteoperator

$$\vec{S}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}')_{\alpha} \vec{S}_{\alpha}$$

Für Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen $S = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$
 In 2. Quantisierung

$$\vec{S}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(\vec{r})$$

Gesamtspin:

$$\vec{S} = \int d^3r \vec{s}(\vec{r})$$

Erfüllt Drehimpulsalgebra

$$[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$$

4.5 Feldquantisierung der Diractheorie

4.5.1 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Einteilchenlösungen:

$$\begin{aligned}\psi_{\sigma k}^{\pm}(x) &= \sqrt{\frac{m}{VE_k}} u_{\sigma}^{\pm}(k) e^{\mp i k x} \\ \text{mit } u_{\sigma}^{+}(k) &= u_{\sigma}(k) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{pmatrix} \chi_{\sigma} \\ \frac{\vec{\sigma} \vec{k}}{E+m} \chi_{\sigma} \end{pmatrix} \\ u_{\sigma}^{-}(k) &= v_{\sigma}(k) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \vec{k}}{E+m} \chi_{\sigma} \\ \chi_{\sigma} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Es gilt mit adjungierten Spinoren

$$\begin{aligned}\bar{u}_{\sigma}^{\alpha} &= u_{\sigma}^{\alpha\dagger} \gamma^0 \quad \alpha = \pm \\ \bar{u}_{\sigma}^{\alpha} u_{\sigma'}^{\beta} &= \alpha \delta_{\alpha\beta} \delta_{\sigma\sigma'}\end{aligned}$$

Definition

$b_{\sigma k}^{\dagger}$	erzeugt	Elektronen
$b_{\sigma k}$	vernichtet	
$d_{\sigma k}^{\dagger}$	erzeugt	Positronen
$d_{\sigma k}$	vernichtet	

Spinor $u_{\sigma}^{\pm}(\vec{k})$ mit Energie $E = k^0 = \sqrt{k^2 + m^2} > 0$ und Spin σ . Da Elektronen/Positronen Fermionen sind, führen wir Antivertauschungsrelationen ein:

$$\{b_{\sigma k}, b_{\sigma' k'}^{+}\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'} \quad \{d_{\sigma k}, d_{\sigma' k'}^{+}\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'}$$

alle anderen verschwinden.

4.5.2 Feldoperatoren

Wir entwickeln die Feldoperatoren nach einem vollständigen Satz von Lösungen.

$$\underline{\psi}(x) = \sum_{\sigma k} \underbrace{\psi_{\sigma k}^{+}(x) b_{\sigma k}}_{\text{nur für Elektronen}} + \underbrace{\psi_{\sigma k}^{-}(x) d_{\sigma k}^{\dagger}(x)}_{\text{wegen Vollständigkeit}}$$

Der adjungierte Feldoperator

$$\bar{\underline{\psi}}(x) = \underline{\psi}^{\dagger}(x) \gamma^0 = \sum_{\sigma k} \bar{\underline{\psi}}_{\sigma k}^{+}(x) b_{\sigma k}^{\dagger} + \bar{\underline{\psi}}_{\sigma k}^{-}(x) d_{\sigma k}$$

Die Feldoperatoren erfüllen komplizierte Vertauschungsrelationen, da die Kausalität gewahrt bleiben muss. Man findet jedoch für gleiche Zeiten

$$\left\{ \psi_\alpha(t, \vec{x}), \psi_\beta^\dagger(t, \vec{x}') \right\} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

d.h. ψ und ψ^\dagger erfüllen die für fermionen-Feldoperatoren geforderten Vertauschungsrelationen.

Spin-Statistik-Theorem

Teilchen mit ganzzahligem/halbzahligem Spin sind Bosonen/Fermionen. Ursache ist, dass die entsprechenden Feldoperatoren für raumartige Abstände vertauschen/antivertauschen müssen.

4.5.3 Hamiltonoperator

Der Vierer-Impulsoperator ist

$$\begin{aligned} p^\mu &= \int d^3x \, \bar{\psi}(x) (i\partial^\mu \gamma_0) \psi(x) \\ &\vdots \\ &= \sum_{\vec{k}\sigma} k^\mu \left(b_{\sigma k}^\dagger b_{\sigma k} - d_{\sigma k} d_{\sigma k}^\dagger \right). \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator ist die 0-Komponente

$$\mathcal{H} = p^0 = \sum_{\vec{k}\sigma} E_{\vec{k}} \left(b_{\sigma k}^\dagger b_{\sigma k} - d_{\sigma k} d_{\sigma k}^\dagger \right)$$

Wegen der Antivertauschung gilt: $dd^\dagger = 1 - d^\dagger d$

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} E_{\vec{k}} \left(\underbrace{b_{\sigma k}^\dagger b_{\sigma k}}_{n_{\sigma k}^+} + \underbrace{d_{\sigma k}^\dagger d_{\sigma k}}_{n_{\sigma k}^-} - 1 \right)$$

Es gilt

$$(n_{\sigma k}^\alpha)^2 = n_{\sigma k}^\alpha$$

und $n_{\sigma k}^\alpha$ hat deshalb die Eigenwerte 0 und 1.

\Rightarrow Die Energie ist nach unten beschränkt, da sowohl die Elektronen als auch die Positronen einen positiven Energiebeitrag liefern.

Achtung:

Für Bosonen gilt $dd^\dagger = 1 + dd^\dagger$ und damit wäre die Energie von Positronen wieder negativ.

Der letzte Term liefert eine (unendliche) Nullpunktsenergie selbst im Vakuumzustand.

\Rightarrow Wir subtrahieren diesen Term vom Hamiltonoperator, um zur physikalischen Observablen Energie zu kommen.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{neu}} &= \sum_{\sigma k} E_{\vec{k}} \left(b_{\sigma k}^\dagger b_{\sigma k} + d_{\sigma k}^\dagger d_{\sigma k} \right) \\ \vec{P}_{\text{neu}} &= \sum_{\sigma k} \hbar \vec{k} \left(b_{\sigma k}^\dagger b_{\sigma k} + d_{\sigma k}^\dagger d_{\sigma k} \right) \end{aligned}$$

Ladung: (0-Komponente) des Viererstromdichte

$$\begin{aligned} Q &= -e \int d^3x \bar{\psi} \gamma_0 \psi = j^0 \\ &\vdots \\ &= -e \sum_{\sigma k} \left(b_{\sigma k}^\dagger b_{\sigma k} - d_{\sigma k}^\dagger d_{\sigma k} \right) \end{aligned}$$

\implies Elektronen haben die Ladung $-e$
und Positronen haben die Ladung $+e$

4.6 Quantisierung des Strahlungsfeldes

4.6.1 Normalmoden, Photonen

Lagrangefunktion des freien Feldes

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} & F^{\mu\nu} &= \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \\ &= \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{1}{c^2} \vec{E}^2 - \vec{B}^2 \right) = \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{1}{c^2} \dot{\vec{A}}^2 - (\text{rot} \vec{A})^2 \right)\end{aligned}$$

Coulombeichung: $\text{div} \vec{A} = 0$ ($A^0 = 0$) gewählt.

Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned}\Pi^i &= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}^i} = \frac{1}{\mu_0} E^i \\ \mathcal{H} &= \Pi^i \dot{A}^i - \mathcal{L} = \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{1}{c^2} \vec{E}^2 + \vec{B}^2 \right)\end{aligned}$$

Freie Lösungen bestimmt durch Wellengleichung

$$\square \vec{A} = 0 \quad (\text{ mit } \text{div} \vec{A} = 0)$$

Allgemeine Lösung: Zerlegung nach Normalmoden

$$\begin{aligned}A^\mu &= \sum_{\vec{k}, \lambda=1,2} \frac{1}{\sqrt{2|\vec{k}|V}} \left(e^{-ikx} \varepsilon_{\vec{k},\lambda}^\mu a_{\vec{k}} + e^{ikx} (\varepsilon_{\vec{k},\lambda}^\mu)^* a_{\vec{k},\lambda}^\dagger \right) \\ \text{mit} \quad k_0 &= |\vec{k}| \quad \vec{k} \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} = 0 \quad \varepsilon_{\vec{k},\lambda}^0 = 0 \\ \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda'} &= \delta_{\lambda,\lambda'}\end{aligned}$$

Wir quantisieren:

$a_{\vec{k},\lambda}$ vernichtet Photon mit \vec{k}, λ

$a_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ erzeugt Photon mit \vec{k}, λ

Hamiltonoperator:

$$H = \int d^3r \mathcal{H} = \dots = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{|\vec{k}|}{2} \left(a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda} + a_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda}^\dagger \right)$$

Mit bosonischen Vertauschungsrelationen gilt: $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$ und damit

$$H = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar \omega_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right)$$

Das elektromagnetische Feld ist in quantisierter Form äquivalent zu Normalmoden harmonischer Oszillatoren (die Amplitude entspricht gerade den Feldern).

4.6.2 Feldoperatoren

$$\begin{aligned}\vec{E} &= -\dot{\vec{A}} = \sum_{\vec{k}\lambda} \sqrt{\frac{|\vec{k}|}{2V}} \left(-ie^{ikx} \varepsilon_{\vec{k}\lambda} a_{\vec{k}\lambda} + ie^{ikx} \varepsilon_{\vec{k}\lambda}^* a_{\vec{k}\lambda}^\dagger \right) \\ \vec{B} &= \text{rot} \vec{A}\end{aligned}$$

Feldoperatoren sind hermitesch ($\vec{E}^\dagger = \vec{E}$, $\vec{B}^\dagger = \vec{B}$) und sind daher physikalische Observablen (erhalten Erzeuger und Vernichter).

Kommutatoren:

$$\begin{aligned}[E^i(\vec{r}, t), E^j(\vec{r}', t)] &= 0 \\ [E^i(\vec{r}, t), B^j(\vec{r}', t)] &= i\varepsilon_{ijk} \partial_k \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

d.h. \vec{E} und \vec{B} vertauschen nicht und sind konjugierte Operatoren.

4.6.3 Strahlungsübergänge, QED

Minimale Kopplung

$$\begin{aligned}\vec{p} &\longrightarrow \vec{p} - e\vec{A} \\ \hat{H} &= \hat{H}_e + \hat{H}_{e-ph} + \hat{H}_{ph} \\ &= \sum_{\sigma} \int d^3r \, \hat{\psi}_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}))^2 + e\psi(\vec{r}) \right] \hat{\phi}_{\sigma}(\vec{r}) + H_{ph} \\ H_{ph} &= \sum_{\vec{k}\lambda} \hbar\omega_{\vec{k}} d_{\vec{k}\lambda}^\dagger d_{\vec{k}\lambda} \\ H_{e-ph} &= -\frac{1}{m} \sum_{\sigma} d^3r \hat{\psi}_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) \hat{A} \vec{p} \hat{\psi}_{\sigma} + \text{Terme } \vec{A}^2\end{aligned}$$

Strahlungsübergänge folgen in zeitabhängiger Störungstheorie in H_{e-ph} .

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f | H_{e-ph} | i \rangle|^2$$

Hierbei ist $|i/f\rangle = |a\rangle_e |n\rangle_{ph}$, d.h. es müssen Übergänge der Elektronen und Photonen beachtet werden. Im klassischen Fall (Kapitel I)

$$\Gamma^{\text{abs/em}} \sim A \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i \pm \hbar\omega)$$

wobei $A \sim |\vec{E}|^2 \sim n$ (Feldenergie $\hat{=}$ Besetzung)

QED

$$\begin{aligned}&\langle n \pm 1 | (a + a^\dagger) | n \rangle \\ &\langle n \pm 1 | \left(\sqrt{n} |n-1\rangle + \sqrt{n+1} |n+1\rangle \right) \\ &= \begin{cases} \sqrt{n} & \text{für Absorption } (-) \\ \sqrt{n+1} & \text{für Emission } (+) \end{cases} \\ \Rightarrow \Gamma &\sim \begin{cases} n & \text{für Absorption} \\ n+1 & \text{für Emission} \end{cases} \quad (\text{stimuliert} + \text{spontan})\end{aligned}$$

- Absorption und stimulierte Emission ergeben klassische Raten $\sim n$
- Spontane Emission ($n = 0$) erfolgt ohne äußeres Feld, verursacht durch Vakuumsfluktuation

4.6.4 Der Casimir-Effekt

Oder: Ist das Vakuum wirklich leer?

Nein, da Vakuumsfluktuationen der Feldamplituden vorhanden sind.

Bisher: Vakuumsenergie abgezogen, aber: Dieser Term hängt von Randbedingungen ab. BILD
Vernachlässige Randeffekte, Modenstruktur:

$$\omega(\vec{k}_{\parallel}, n) = c\sqrt{|k_{\parallel}|^2 + \left(\frac{\pi n}{a}\right)^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

gegeben durch Randbedingungen $E_{\perp} = 0$ auf Platten.

Die Energie im Vakuumzustand

$$E = \sum_{\vec{k}\lambda} \frac{1}{2} \hbar \omega_{\vec{k}} = \frac{\hbar}{2} \int \frac{L^2 d^2 k}{(2\pi)^2} \left(c|k_{\perp}| + \sum_{n=1}^{\infty} 2\omega(\vec{k}_{\perp}, n) \right)$$

Subtrahieren Vakuumsenergie ohne Rand

$$E_0 = \frac{\hbar c}{2} \int \frac{L^2 d^2 k}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dn \quad \omega(\vec{k}, n)$$

Energie pro Fläche

$$\varepsilon = \frac{E - E_0}{L^2} = \dots = -\frac{\pi^2}{720} \frac{\hbar c}{a^3}$$

Die Kraft pro Fläche ist

$$\frac{F}{L^2} = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial a} = -\frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{a^4} \quad \text{Casimir-Kraft}$$

- anziehende Kraft [z.B. $L = 1\text{m}$, $a = 1\mu\text{m}$, $F \sim 10^{-2}\text{N}$]
- hängt nur von Naturkonstanten ab und vom Abstand, aber nicht vom Material.
- kann auf andere Geometrien (z.B. Kugel) erweitert werden (Vorzeichen-Änderung), hängt von Temperatur ab.
- ähnlich van-der-Waals-Kraft zwischen nicht permanenten „fluktuierenden“ dipolen in Molekülen / Atomen

