

Mathematisches Seminar

Felder

Andreas Müller

7. Integraltransformationen:
Spektrale Methoden und
Quantenfeldtheorie

Inhalt

1. Spektrale Methoden	2
2. QM: Geschicke und Quantisierungsregeln	8
3. Der harmonische Oszillator	19
4. Auf- und Abschrelopabren	21
5. Zerlegung eines Feldes in harmonische Oszillatoren	24
6. Quantisierung des Wellenfeldes	29
7. Wechselwirkungen	32
7. Integraltransformationen: Spektrale Methoden und Quantenfeldtheorie – 1	

1. Spektrale Methoden

Idee: Integraltransformationen verwenden, um Feldgleichungen zu "vereinfachen"

Dies ist im Wesentlichen die Transformationsmethode in der Theorie der partiellen Differentialgleichungen.

Beispiel 1 (Fourier 1822): Wärmeleitungsgleichung auf dem Gebiet $\Omega = \mathbb{R}_{>0} \times (-\pi, \pi)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} u = k \frac{\partial^2}{\partial x^2} u \quad (1)$$

mit Randbedingungen

$$\begin{aligned} u(t, -\pi) &= 0 \\ u(t, \pi) &= 0 \\ u(0, x) &= f(x) \quad \forall x \in (-\pi, \pi). \end{aligned} \quad \forall t \in \mathbb{R}_{>0}$$

Lösungsansatz nach Fourier: verwendet Fourier-Transformation

$$u(t, x) = \frac{a_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k(t) \cos kx + b_k(t) \sin kx). \quad (2)$$

Mit Ableitungen

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \frac{\dot{a}_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (\dot{a}_k(t) \cos kx + \dot{b}_k(t) \sin kx)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = \sum_{k=1}^{\infty} (-a_k(t) k \sin kx + b_k(t) k \cos kx)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = \sum_{k=1}^{\infty} (-a_k(t) k^2 \cos^2 kx - b_k(t) k^2 \sin^2 kx)$$

Einsetzen in die Differenzialgleichung (1) ergibt:

$$\frac{\dot{a}_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^n (a_k(t) \cos kx + b_k(t) \sin kx)$$

$$= -\kappa \sum_{k=1}^n k^2 (a_k(t) \cos kx + b_k(t) \sin kx).$$

Durch Koeffizientenvergleich:

$$\dot{a}_0(t) = 0$$

$$\dot{a}_k(t) = -\kappa k^2 a_k(t)$$

$$\dot{b}_k(t) = -\kappa k^2 b_k(t).$$

Dies sind gewöhnliche Differenzialgleichungen!

Randbedingungen: $x = \pm \pi$:

$$\frac{a_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) (-1)^k = 0$$

$$t=0: \frac{a_0(0)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k(0) \cos kx + \sum_{k=1}^{\infty} b_k(0) \sin kx = f(x)$$

d.h. $a_k(0), b_k(0)$ sind Fourier-Koeffizienten der Funktion $f(x)$. Schreibt man

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k^f \cos kx + b_k^f \sin kx)$$

Folgt:

$$a_0(0) = a_0^f$$

$$a_k(0) = a_k^f \quad \wedge \quad b_k(0) = b_k^f.$$

○

Beispiel 2: Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\text{mit Folgendem: } c=1) \quad (3)$$

auf $\Omega = \mathbb{R}_{\geq 0} \times (-\pi, \pi)$ mit Randbedingungen

$$u(t, \pm\pi) = 0 \quad (4)$$

$$u(0, x) = f(x)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, x) = g(x)$$

Durch Einsetzen des Ansatzes (2) in die Differenzialgleichung (2) erhält man wieder

$$\begin{aligned} \frac{\ddot{a}_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (\ddot{a}_k(t) \cos kx + \ddot{b}_k(t) \sin kx) \\ = - \sum_{k=1}^{\infty} k^2 (a_k(t) \cos kx + b_k(t) \sin kx) \end{aligned}$$

und daraus durch Koeffizientenvergleich die gewöhnlichen Differenzialgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{a}_0(t) &= 0 \\ \ddot{a}_k(t) &= -k^2 a_k(t) \\ \ddot{b}_k(t) &= -k^2 b_k(t) \end{aligned} \quad (5)$$

Wegen der Randbedingung (4) sind $a_k(t) = 0$.

Es bleiben damit die DGL (5) für $b_k(t)$ mit Anfangsbedingungen $b_k(0) = b_k^f$

$$\dot{b}_k(0) = -k a_k^g.$$

○

Die Lösung der Differenzialgleichung (3) wird durch die Transformation in ein Einzelproblem (5) für jeden Wert des Eigenwertspektrums des Differenzialoperators $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ auf dem Intervall $(-\pi, \pi)$ mit homogenen Randbedingungen aufgeteilt. Daher der Name "Spektrale Methoden".

Beispiel 3: Wellengleichung auf der Kugeloberfläche:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u. \quad (6)$$

Seien u_k die Eigenfunktionen von Δ zu den Eigenwerten $\lambda_k \in \mathbb{R}$, $k \in \mathbb{N}$, dann kann man die Lösung von (6) als periodische Fourier - Reihe

$$u(t, x) = \sum_{k \in \mathbb{N}} a_k(t) u_k(x) \quad (7)$$

ansetzen. Einsetzen von (7) in die DGL (6) ergibt

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{N}} \ddot{a}_k(t) u_k(x) &= \sum_{k \in \mathbb{N}} a_k(t) \Delta u_k(x) \\ &= \sum_{k \in \mathbb{N}} a_k(t) \lambda_k u_k(x) \end{aligned}$$

Wegen linearer Unabhängigkeit der $u_k(x)$ folgt

$$\ddot{a}_k(t) = \lambda_k a_k(t) \quad (8)$$

D.h. die Lösung von (6) erfolgt durch Lösen der gewöhnlichen DGL (8) für $a_k(t)$ für jeden einzelnen Spektralwert λ_k

○

Die Methode ist auch auf nichtlineare Gleichungen anwendbar. Die nichtlineare Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = (1+u) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

beschreibt eine Welle, deren Ausbreitungsgeschwindigkeit von u abhängt (nichtlineares Medium).

Die Differenzialgleichungen werden zu gekoppelten gewöhnlichen DGL:

$$u(t, x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} a_k(t) e^{ikx}$$

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \ddot{c}_k(t) e^{ikx} &= - \left(1 + \sum_{k \in \mathbb{Z}} c_k(t) e^{ikx} \right) \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \ell^2 c_\ell(t) e^{i\ell x} \\ &= - \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} \ell^2 c_\ell(t) e^{i\ell x} \\ &\quad - \sum_{k, \ell \in \mathbb{Z}} k^2 c_k(t) c_\ell(t) e^{i(k+\ell)x} \end{aligned}$$

$$= - \sum_{k \in \mathbb{Z}} k^2 c_k(t) e^{ikx} - \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{ikx} \left(\sum_{\ell \in \mathbb{Z}} (k-\ell)^2 c_k(t) c_{k-\ell}(t) \right)$$

Koeffizientenvergleich:

$$\ddot{c}_k(t) = -k^2 c_k(t) - \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} (k-\ell)^2 c_k(t) c_{k-\ell}(t) \quad (9)$$

In vielen Fällen darf man annehmen, dass die ϵ_k für große k schnell klein werden und danach nur wenige nichtlineare Terme berücksichtigt werden müssen.

Der Hauptvorteil der Methode ist ihre größere Unempfindlichkeit gegenüber Rauschen in den Anfangsbedingungen.

Anwendung: Die Prognosen des europäischen Zentrums für Mittelfristprognosen (ECMWF) werden mit spektralen Methoden gerechnet.

2. QM: Geschichte und Quantisierungsregeln

a) Vorgeschichte: Hamiltonsche Mechanik

Aus der Lagrange-Mechanik entwickelt Hamilton eine Beschreibung eines mechanischen Systems.

Die Hamilton-Funktion $H(p, q)$ drückt die Energie des Systems durch Koordinaten q und Impulse p aus. Die Impulse sind durch die Ableitungen

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad (10)$$

gegeben. Die Funktion H entsteht durch Legendre-Transformation:

$$H(p, q) = p \dot{q} - L(q, \dot{q}). \quad (11)$$

Auf den ersten Blick könnte man meinen, dass die rechte Seite von (11) auch von \dot{q} abhängt, aber

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}} (p \dot{q} - L) = p - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0.$$

Die Euler-Lagrange-Differentialgleichung wird zu

$$\frac{dp}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \quad (12)$$

Durch Ableiten von (11) nach p erhält man

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}. \quad (13)$$

Die Gleichungen (12) und (13) bilden die Bewegungsgleichungen des Systems:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial H / \partial q \\ \partial H / \partial p \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Mit der Hamiltonfunktion lässt sich die zeitliche Änderung einer beliebigen Observablen $A(p, q)$ berechnen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A(p, q) &= \frac{\partial A}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial A}{\partial q} \frac{dq}{dt} \\ &= - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p}. \end{aligned}$$

Definition (Poisson-Klammer):

$$\begin{aligned} \{A, B\} &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \\ &= \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_k} \frac{\partial B}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k} \frac{\partial B}{\partial q_k} \right) \end{aligned}$$

Es folgt:

$$\frac{d}{dt} A = \{H, A\}. \quad (15)$$

Rechenregeln für die Poisson-Klammer:

- 1) Bilinear: $\{ \lambda A + \mu B, C \} = \lambda \{ A, C \} + \mu \{ B, C \}$
- 2) Antisymmetrisch: $\{ A, B \} = -\{ B, A \}$
- 3) Produktregel: $\{ A, BC \} = \{ A, B \} C + B \{ A, C \}$
(d. h. $\{ A, \dots \}$ wirkt wie ein Ableitungsoperator)
- 4) Jacobi-Identität: $\{ A, \{ B, C \} \} + \{ B, \{ C, A \} \} + \{ C, \{ A, B \} \} = 0$

Fundamentale Poisson-Klammer:

$$\begin{aligned}\{ q_k, q_\ell \} &= 0 \\ \{ p_k, p_\ell \} &= 0 \\ \{ q_k, p_\ell \} &= \delta_{k\ell}.\end{aligned}\tag{16}$$

b) Max Planck und der schwarze Körper (1900)

Das Strahlungsspektrum eines schwarzen Körpers oder Hohlraumstrahlers lässt sich mit der klassischen Thermodynamik nicht berechnen. Wenigstens nicht, wenn man davon ausgeht, dass jede beliebige Energie möglich ist. Max Planck nahm daher an, dass nur die diskreten Energien $k \cdot v_h, k \in \mathbb{N}$ möglich sind. Unter dieser Voraussetzung liefert die klassische Thermodynamik ein Strahlungsgesetz, welches sehr gut mit experimentellen Befunden übereinstimmt.

Man kann sich das e.m. Feld im Inneren eines Hohlraumstrahlers als einen e.m. Oszillator vorstellen. Nach Planck kann dieses aber nur diskrete Energie enthalten.

c) Einstein und der Photoeffekt (1905)

Der Photoeffekt beschreibt, wie Elektronen durch Licht aus einem Festkörper herausgelöst werden können. Die Beobachtung zeigt, dass dazu nicht eine minimale Intensität (Energiedichte) der Strahlung nötig ist, sondern eine minimale Wellenlänge. Einstein erklärt das Phänomen dadurch, dass er annimmt, dass sich das Licht wie Teilchen mit Energie $h\nu$ verhält. Nur wenn die Energie eines solchen Photons gross genug ist, kann ein Elektron den Festkörper verlassen. Dazu muss die Frequenz so gross sein, dass $h\nu > W$ ist, wobei W die Arbeit ist die zum Verlassen des Körpers nötig ist.

d) Bohrs Atommodell (1913)

Bohr postulierte, dass der Drehimpuls eines Elektrons in einem Atom nur diskrete Werte

annehmen kann, die Vielfache von $t = h/2\pi$ sind. Damit lassen sich die konkreten Energien von Elektronen bauler einfacher Atome berechnen.

e) Louis de Broglie und Materiewellen (1924)

Inspiriert von Einsteins Theorie zum Photoeffekt schlug de Broglie vor dass nicht nur Wellen manchmal wie Photonen Teilchen-eigenschaften zeigen können, sondern umgekehrt auch Teilchen eine Wellennatur mit Wellenlänge $\lambda = h/p$ zeigen können. Die Wellen können Bohrs Modell rechtfertigen: nur für bestimmte Wellenlängen können sich für das Elektron "stehende Makrowellen" ausbilden, dies scheinen die zulässigen Balmer zu sein.

f) Die Wellengleichung von Schrödinger (1925)

Als Professor für theoretische Physik an der UZH Zürich fand Erwin Schrödinger eine Wellengleichung für Teilchen. Nach de Broglie ist ein freies Teilchen durch eine ebene Welle $e^{ik \cdot x}$ mit der Wellenzahl $k \in \mathbb{R}^3$ zu beschreiben. Der Zusammenhang zwischen Wellenzahl und Wellenlänge ist

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Für eine Welle nach de Broglie ist $\lambda = h/p$
die Wellenzahl ist

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} p = \frac{1}{\hbar} p. \quad (17)$$

Vektoriell: $\vec{k} = \frac{1}{\hbar} \vec{p}$.

Den momentanen Wellenvektor einer ebenen Welle bekommt man durch Ableitung

$$\nabla e^{ik \cdot \vec{x}} = ik e^{ik \cdot \vec{x}} = \frac{i}{\hbar} \vec{p} e^{ik \cdot \vec{x}}$$

Oder: Ebene Wellen sind Eigenfunktionen des Operators

$$P = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (18)$$

Eine beliebige Welle ψ hat am Punkt x den "Impuls" $\hbar/i \nabla \psi$ und die kinetische Energie

$$\frac{P^2}{2m} = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{i^2} \nabla^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$$

Darin steht aber immer noch jeweils ein Faktor ψ , die Energie ist nur der Koeffizient davon.
Die potentielle Energie wäre daher als Produkt $V(x) \psi(x)$ auszudrücken und am Teilchen mit konstanter Energie E müsste die Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(x) \psi = E \psi \quad (19)$$

Dies ist die (zeitunabhängige) Schrödinger-Gleichung. Sie hat die Ebene Welle $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ als Lösung für $V=0$ und $E = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Für das Coulomb-Potential eines Atomkerns lässt sich (19) mit Hilfe von Kugelfunktionen lösen (siehe Vorlesung PartDiff), es ergeben sich für den Wasserstoff die in der Spektroskopie beobachteten Energieniveaus. Die Schrödinger-Gleichung ersetzt das bohrsche Atommodell.

g) Max Born und die Wahrscheinlichkeit (1926)

Was ist die Bedeutung von ψ ? Max Born hat vorgeschlagen dass $|\psi(t, x)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort eines Teilchens ist. Damit können die folgenden Integrale als Erwartungswerte interpretiert werden:

$$\text{Ort: } \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(t, x)|^2 x \, dx = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(t, x) x \psi(t, x) \, dx \quad (20)$$

potentielle Energie:

$$\langle E_{\text{pot}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(t, x) V(x) \psi(t, x) \, dx \quad (21)$$

kinetische Energie:

$$\langle E_{km} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(t, x) \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(t, x) dx \quad (22)$$

Impuls:

$$\langle P \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(t, x) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(t, x) dx \quad (23)$$

Die Messung eines Quantensystems ergibt diese Erwartungswerte als Messwerte.

h) 1. Quantisierung

Die beobachtbaren Größen in der Quantenmechanik sind die Erwartungswerte (20) – (23) und weitere. Diese können als Skalarprodukt geschrieben werden. Paul Dirac hat dafür eine einheitliche Notation einführt:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(t, x) x \psi(t, x) dx \\ &= \langle \psi | x | \psi \rangle \end{aligned}$$

bra- ket-
vektor vektor

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \psi | \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \frac{P^2}{2m} + V(x) | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Daraus kann man die folgenden Quantisierungsregeln ablesen:

1. Koordinaten werden durch Operatoren ersetzt:

$$x \longrightarrow X$$

$$p \longrightarrow P$$

Oft werden die Operatoren auch durch einen Hut ab \hat{x} oder \hat{p} gekennzeichnet

2. In kartesischen Koordinaten wird $P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ verwendet

3. In allgemeinen Koordinaten ist $P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}$

4. Der Hamilton-Operator entsteht aus der Hamilton-Funktion, indem man p und q durch Operatoren ersetzt.

5. Schrödinger Gleichung: $H\psi = E\psi$

i) Ungewissheitssrelation

Durch Fourier-Transformation wird aus ψ die Fouriertransformierte

$$\hat{\psi}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{R^3} e^{-ik \cdot x} \psi(x) dx$$

und umgekehrt

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{R^3} e^{ik \cdot x} \hat{\psi}(k) dk.$$

Der Operator X wird durch Fourier-Transformation

zu einem Ableitungsooperator nach k. Ort und Impuls in einem Quantensystem verhalten sich also wie Variablen, die durch Fourier-Transformationen miteinander verbunden sind.

Für die klassische Fourier-Theorie gilt eine Unschärfe-Relation für die Variablen:

$$\langle X - \langle X \rangle \rangle^2 \langle K - \langle K \rangle \rangle \geq \frac{1}{4}. \quad (24)$$

Sie wird interpretiert als die Unmöglichkeit, konjugierte Variable gleichzeitig beliebig genau messen zu können.

i) Operatoren und Messprozess

Ist das System in einem Zustand $|\psi\rangle$ der durch den Impuls P charakterisiert ist, dann kann man $\langle \psi | P | \psi \rangle$ so interpretieren:

1. P extrahiert aus $|\psi\rangle$ den Wert des Impulses,
2. $\langle \psi |$ misst die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand $|\psi\rangle$ zu finden

Man deutet also X und P als Operatoren, die eine physikalische Größe messen.

Da in der QM der Messprozess den Zustand verändern kann, ist die Reihenfolge der Operatoren wichtig!

k) Kommutator und Poisson-Klammer

Die Operatoren P und X vertauschen nicht:

$$XP \psi = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$DX \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) = \frac{\hbar}{i} \psi + x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\Rightarrow XP - PX = [X, P] = \frac{\hbar}{i}, \quad (25)$$

da sich die blauen Terme wegheben. Aus dem Vergleich mit der Poissonklammer (16) ergibt sich eine neue, universelle Quantisierungsregel:

$$6. \text{ Ersetze } \{A, B\} \text{ durch } \frac{\hbar}{i}[A, B]. \quad (26)$$

Die Tatsache, dass man P als Ableitungsoperator verstehen kann, ergibt sich jetzt aus der allgemeinen Regel, dass Kommutatoren Ableitungsoperatoren sind.

3. Der harmonische Oszillator

Das Federspendel mit Masse m und Federkonstante k hat die Gesamtenergie

$$H(P, X) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} k X^2. \quad (27)$$

Die hamiltonischen Bewegungsgleichungen (14) dafür sind:

$$\dot{P} = - \frac{\partial H}{\partial X} = -kX \quad (\text{Newton})$$

$$\dot{X} = \frac{\partial H}{\partial P} = \frac{P}{m} \quad (\text{Impuls})$$

Daraus ergibt sich nach den Quantisierungsregeln ein Quantensystem mit den Operatoren X und P und dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} P^2 + \frac{k}{2} X^2 \quad (28)$$

und den Verforschungsregeln

$$[X, P] = \frac{\hbar}{i}.$$

Lösungen können zum Beispiel durch die Substitution $P \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X}$ als Lösungen der DGL

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \frac{1}{2} k \psi(x) = E \psi(x) \quad (29)$$

gefunden werden

Lösungen von (29) können mit Hermite-Polynomen gefunden werden. Die konkreten Lösungen sind allerdings weniger wichtig, viel wichtiger sind die möglichen Energieniveaus, also die Eigenwerte des Hamilton-Operators. Diese lassen sich allem aus algebraischen Methoden ableiten.

Die Energie lässt sich statt durch die Föderkonstante k auch durch die Kreisfrequenz ω ausdrücken. Wegen $\omega = \sqrt{k/m}$ wird die Hamilton-Funktion

$$H(P, X) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

und der Hamilton-Operator wird

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

Teilt man durch $\hbar\omega$ (eine Energie-Einheit), steht

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} &= \frac{1}{2} \left(-\frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{m\omega}{\hbar} X^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{\left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial X} \right)^2}_{P} + \frac{1}{2} \underbrace{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \right)^2}_{Q} = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2) \end{aligned} \quad (30)$$

mit Veranschaulichung

$$[P, Q] = \frac{1}{i} I.$$

4. Auf- und Absteigende Operatoren

Wir versuchen jetzt, die Eigenwerte von \hat{H} (gemäß (30)) mit den algebraischen Mitteln zu bestimmen.

Wir dürfen annehmen, dass es einen Zustand minimaler Energie gibt, den Grundzustand |0⟩.

Gäbe es keinen solchen Grundzustand, könnte man dem System beliebig viel Energie entziehen, was zu einem Perpetuum Mobile führen würde.

Wir bilden jetzt die Operatoren

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) \end{aligned} \quad \left. \right\} (31)$$

und berechnen ihre Produkte

$$\begin{aligned} aa^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 + iPQ - iQP + P^2) \\ &= \hat{H} + \frac{1}{2} i[P, Q] = \hat{H} + \frac{1}{2} I \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) \\ &= \frac{1}{2} (Q^2 - iPQ + iQP + P^2) \\ &= \hat{H} - \frac{1}{2} i[P, Q] = \hat{H} - \frac{1}{2} I =: N \end{aligned}$$

und den Kommutator

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = I$$

oder $aa^\dagger = a^\dagger a + I \Leftrightarrow a^\dagger a = aa^\dagger - I$

Definition: $N := \hat{H} - \frac{1}{2}I$

Die Energie in Einheiten $\hbar\omega$ kann also durch N ausgedrückt werden: $H = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

Vertauschungsrelationen für $N = a^\dagger a$

$$\begin{aligned}[N, a^\dagger] &= NA^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger aa^\dagger - a^\dagger a^\dagger a \\ &= a^\dagger \cancel{a^\dagger a} + a^\dagger - \cancel{a^\dagger a^\dagger a} = a^\dagger\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[N, a] &= Na - aN = aa^\dagger a - aaa^\dagger \\ &= \cancel{aaa^\dagger} - a - \cancel{aaa^\dagger} = -a\end{aligned}$$

Wenn also $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand mit Energi

$$\hat{H}|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$$

ist, dann ist

$$\begin{aligned}\hat{H}a^\dagger|\psi\rangle &= (N + \frac{1}{2})a^\dagger|\psi\rangle \\ &= a^\dagger(N + \frac{1}{2})|\psi\rangle + a^\dagger|\psi\rangle \\ &= a^\dagger \hat{H}|\psi\rangle + a^\dagger|\psi\rangle \\ &= a^\dagger(\epsilon + 1)|\psi\rangle\end{aligned}\tag{32}$$

d.h. $a^\dagger|\psi\rangle$ ist Eigenzustand mit Energie $\epsilon + 1$.

Ahnlich gilt für $a|\psi\rangle$

$$\hat{H}a|\psi\rangle = (\epsilon - 1)a|\psi\rangle \quad (33)$$

d.h. $a|\psi\rangle$ ist Eigenzustand mit Energie $\epsilon - 1$. Die Operatoren a^+ und a verändern also die Energie in ganzen Einheiten von $\hbar\omega = h\nu$.

Alle möglichen Energiezustände des harmonischen Oszillators entstehen als durch Anwendung von a^+ auf den Grundzustand. Der Grundzustand selbst muss durch Anwendung von a zu 0 werden, er muss also die Gleichung $a|0\rangle$ erfüllen oder

$$0 = (Q + iP)\psi_0 = \left(\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \right)^2 - \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial X} \right)^2 \right) \psi_0$$

$$\frac{m\omega}{\hbar} X^2 \psi_0 - \frac{\hbar}{m\omega} \psi_0'' = 0$$

$$\psi_0''(x) = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \psi_0(x)$$

mit der Lösung

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Der Grundzustand ist also eine Gauß-Verteilung.

5. Zerlegung eines Feldes in harmonische Oszillationen

Aus den Maxwell-Gleichungen lässt sich ableiten, dass das e.m. Feld eine Wellengleichung genügt. Sowohl \vec{E} wie auch \vec{B} erfüllen eine Wellengleichung. Dies ist aber "nur" eine Folge der Tatsache, dass bereits das elektrische Potenzial φ und das Vektorpotenzial \vec{A} eine Wellengleichung erfüllen, da der Wellenoperator

$$\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta, \quad (34)$$

auch d'Alembert-Operator genannt, als linearer Differentialoperator mit den Operatoren grad und rot veranschaut, mit denen sich \vec{E} und \vec{B} aus φ und \vec{A} gewinnen lassen.

Die Felder φ und \vec{A} sind jedoch nicht eindeutig bestimmt. Ersetzt man \vec{A} durch $\vec{A} + \text{grad } \psi$ und φ durch $\varphi - \frac{\partial \psi}{\partial t}$ für ein beliebiges Feld ψ , dann ist

$$\begin{aligned} & -\text{grad}\left(\varphi - \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) - \frac{\partial}{\partial t}(\vec{A} + \text{grad } \psi) \\ &= -\text{grad } \varphi - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} + \text{grad } \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \text{grad } \psi \\ &= \vec{E} \end{aligned}$$

cmd

$$\text{rot}(\vec{A} + \text{grad } \varphi) = \text{rot } \vec{A} + \underbrace{\text{rot grad } \varphi}_{=0} = \vec{B}.$$

Es ergeben sich also die gleichen phänomenologischen Felder \vec{E} und \vec{B} . Die Transformation

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \text{grad } \varphi, \quad \varphi \rightarrow \varphi - \frac{\partial \varphi}{\partial t}$$

wird Eichtransformation genannt. Sie bedeutet, dass die Funktion φ frei gewählt werden kann, z.B. dadurch, dass man φ und \vec{A} eine zusätzliche Bedingung auflegt.

Eine allgemein kovariante Bedingung ist die sogenannte Lorenz-Eichung mit der Bedingung

$$\text{div } \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0. \quad (35)$$

Die allgemeine Kovarianz wird offensichtlich, wenn man den 4er-Vektor A^k mit Komponenten $(\varphi/c, \vec{A})$ einführt, dann ist (35) nichts anderes als die 4er-Divergenz

$$\frac{\partial A^M}{\partial x^M} = 0. \quad (36)$$

Selbst die Lorenz-Eichbedingung legt φ und \vec{A} noch nicht eindeutig fest. Dazu ist es notwendig, Randbedingungen hinzuzufügen. Wir untersuchen dieses Detail nicht weiter.

In der Lorentz-Eichung gelten die inhomogenen Wellengleichungen

$$\square \varphi = \frac{S}{\epsilon_0} \quad \text{und} \quad \square \vec{A} = \mu_0 \vec{J}, \quad (37)$$

es gilt also eine Wellengleichung für jede einzelne Komponente, insbesondere gibt es für jede Ausbreitungswichung und jede Wellenzahl sowohl transversale wie auch longitudinale Lösungen und solche, die in "Zeitschichtung polariert" sind. In der Realität sind aber em. Wellen transversal polarisiert, es braucht daher zusätzliche Bedingungen, um diese Lösungen ausschließen (Ward-Identitäten).

Im Folgenden betrachten wir nur das freie Feld. Wir können daher von einem Vektorfeld ausgehen, das die Wellengleichung

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} - \Delta \vec{u} = 0 \quad (38)$$

erfüllt. Als Definitionsbereich verwenden wir eine Würfel $(0, L)^3$ mit periodischen Randbedingungen, d.h. Translation um L in jede Achsnichtung ändert \vec{u} nicht. \vec{u} ist also eine 3-fach periodische Funktion.

Wir verwenden die 3-dimensionale Fourier-Transformation für L -periodische komplexwertige Funktionen. Die komplexe Ebene der Werte identifizieren wir mit den transversalen Vektoren und schreiben

$$u(t, x) = \sum_{k \in \Gamma} c_k(t) e^{ik \cdot x}$$

wobei Γ das 3-dimensionale Gitter der zulässigen Wellenvektoren ist. Mit diesem Ansatz folgt

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \sum_{k \in \Gamma} \ddot{c}_k(t) e^{ik \cdot x}$$

$$\Delta u = - \sum_{k \in \Gamma} k^2 c_k(t) e^{ik \cdot x}$$

und damit durch Koeffizienten vergleicht

$$\frac{1}{c^2} \ddot{c}_k(t) + k^2 c_k(t) = 0$$

$$c_k(t) = -c^2 k^2 c_k(t), \quad (39)$$

d.h. die Fourier-Koeffizienten erfüllen die Bewegungsgleichung eines harmonischen Oszillators. Wir bestimmen die zugehörige Hamiltonfunktion. Die Kreisfrequenz ist $\omega_k = ck$, also wird (39) zu

$$\ddot{c}_k(t) = -\omega_k^2 c_k(t). \quad (40)$$

Die Bewegungsgleichung (40) folgt aus der Hamilton-Funktion

$$H_k(p, c) = \frac{1}{2} p_k^2 + \frac{1}{2} \omega_k^2 c_k^2, \quad (41)$$

denn die zugehörigen Hamilton-Gleichungen sind

$$\begin{aligned} \dot{p}_k &= -\frac{\partial H_k}{\partial q_k} = -\omega_k^2 c_k \\ \dot{c}_k &= \frac{\partial H_k}{\partial p_k} = p_k \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \left. \begin{aligned} \ddot{c}_k &= -\omega_k^2 c_k \\ \ddot{p}_k &= \ddot{c}_k \end{aligned} \right\}$$

Die Hamilton-Funktion des gesamten Feldes ist die Summe:

$$H(p, c) = \sum_{k \in \Gamma} H_k(p_k, c_k). \quad (42)$$

Dies bedeutet, dass es zwischen den verschiedenen Oszillatoren keine Kopplung gibt. Dies entspricht der Beobachtung, dass em. Felder linear überlagert werden und sich gegenseitig nicht beeinflussen.

6. Quantisierung des Wellenfeldes

Die Hamilton-Funktion (42) beschreibt das Feld für hohe Intensität, bei der nur eine vergleichsweise geringe Energie menge ist. Für schwache Felder sind Quanteneffekte zu erwarten. Wir wenden daher die Quantisierungsmethode für den harmonischen Oszillator der Abschnitte 3 und 4 auf die Hamilton-Funktion H_k an. Der zugehörige Hamilton-Operator ist

$$\hat{H}_k = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial c_k^2} + \frac{1}{2} \omega_k^2 c_k^2.$$

Wir teilen durch $\hbar\omega$ und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\hat{H}_k}{\hbar\omega} &= -\frac{1}{2} \frac{\hbar}{\omega_k} \frac{\partial^2}{\partial c_k^2} + \frac{1}{2} \frac{\omega_k}{\hbar} c_k^2 \\ &= \underbrace{\frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{\omega_k}} \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial c_k} \right)^2}_{P_k} + \underbrace{\frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\omega_k}{\hbar}} c_k \right)}_{Q_k} \end{aligned}$$

$$H_k = \frac{1}{2} P_k^2 + \frac{1}{2} Q_k^2,$$

den einheitenfreien Hamilton-Operator H_k , ausgedrückt durch die Operatoren P_k und Q_k mit den Vertauschungsrelationen

$$[P_k, Q_n] = \frac{1}{i} I$$

Durch Vergleich mit den Resultaten von Abschnitt 4 können wir jetzt Auf- und Absteigeroperatoren

$$\begin{aligned} a_k^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_k - iP_k) \\ a_k^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_k + iP_k) \\ N_k &= a_k^+ a_k^- = \mathcal{H}_k - \frac{1}{2} I \end{aligned}$$

mit Vertauschungseigenschaften

$$[a_k, a_k^+] = I.$$

Wie für den gewöhnlichen harmonischen Oszillator folgt also, dass der Grundzustand des Oszillators zur Wellenzahl die Energie $\frac{1}{2}\hbar\omega_k = \frac{1}{2}\hbar\omega_k$ hat. Die angeregten Zustände werden durch Anwenden des Operators a_k^+ erreicht. Es können als nur Energie niveaus besetzt werden, die sich durch ein natürliches Vielfaches $n\hbar\omega_k$ vom Grundzustand unterscheiden. Eine Veränderung der Feldenergie muss also immer in Einheiten $\hbar\omega_k$ stattfinden. Eine solche Einheit erhöht die Intensität des Feldes mit der Wellenzahl, man kann sie daher als ein Quanton des e.m. Feldes mit der Wellenzahl k beobachten, als **Photon**.

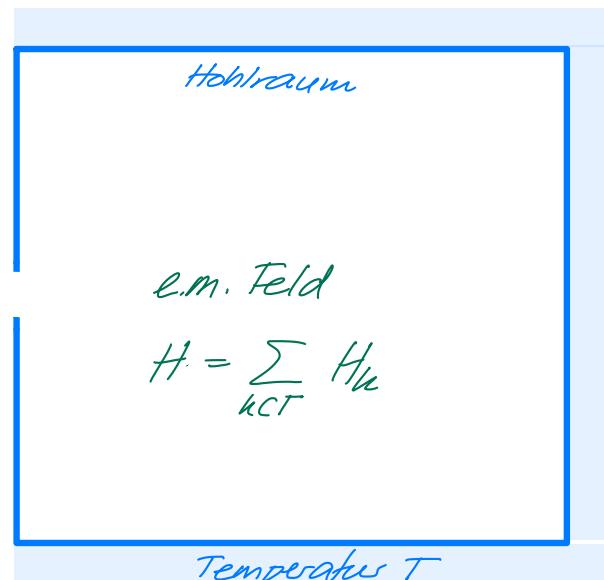
In Abschnitt 2.b) wurde beschrieben wie Max Planck sein mit experimentellen Befunden übereinstimmendes Strahlungsgesetz für die Schwarzkörperstrahlung aus der Annahme ableitete, dass die Energie ein Vielfaches von $h\nu$ sein muss.

Ein Hohlraum mit Wänden auf der Temperatur T ist ein Modell eines schwarzen Strahlers.

Das Feld im Inneren dieses Hohlraums ist in der Abschätzung

5. + 6. quantenmechanisch beschrieben worden.

Für jede Wellenzahl k besteht es aus einem harmonischen Oszillator, dessen Energie $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_k = (n + \frac{1}{2})h\nu_k$ sein muss mit $n \in \mathbb{N}$. Die plancksche Hypothese ist somit bestätigt. Das Strahlungsgesetz ist somit auch eine Bestätigung der Quantenfeldtheorie des e.m. Feldes.



7. Wechselwirkungen

Die Resultate von Abschnitt beschreiben nur das freie e.m. Feld ohne irgendwelche Wechselwirkungen mit anderen Elementarteilchen. Die mathematische Theorie hat ein quantisiertes Feld ergeben, welches sich durch Anwendung der Operatoren a_n^\dagger, a_n nur um eine Energieeinheit $\hbar\omega$ ändern kann. Von Photonen im engeren Sinne kann man aber erst sprechen, wenn zum Beispiel bei einer Wechselwirkung eines Elektrons genau einer dieses Feldquanten ausgesetzt wird.

Der Photoeffekt, der im Abschnitt 2.c) beschrieben wurde, ist konstruktiv mit der Vorstellung solcher Photonen, die immer genau ein Elektron aus dem dem Licht ausgesetzten Metall herausstoßen können.

Um die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs von einem Zustand mit n_k Photonen zu einem Zustand mit n_k+1 Photonen berechnen zu können, reicht es nicht, nur zu verstehen, dass sich die Energie im Endzustand $\hbar\omega$ ändert. Es muss auch die konkrete Normierung der Wellenfunktion $a_k^\dagger |n_k\rangle$ bestimmt werden.

Dazu kann man rechnen:

$$\begin{aligned}\|a_k |n_k\rangle\|^2 &= \langle n_k | a_k^\dagger a_k | n_k \rangle = \langle n_k | N_k | n_k \rangle \\ &= n_k \underbrace{\langle n_k | n_k \rangle}_{=1} \\ a_k |n_k\rangle &= \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\|a_k^\dagger |n_k\rangle\|^2 &= \langle n_k | a_k a_k^\dagger | n_k \rangle = \langle n_k | a_k^\dagger a_k + I | n_k \rangle \\ &= \langle n_k | N_k + I | n_k \rangle = (n_k + 1) \underbrace{\langle n_k | n_k \rangle}_1 \\ a_k^\dagger |n_k\rangle &= \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle.\end{aligned}$$

Der zusätzliche Faktor führt dazu, dass die Wahrscheinlichkeit für Emission proportional ist zu $n_k + 1$, während die Wahrscheinlichkeit für Absorption proportional zu n_k ist. Bei verschwindendem Feld ($n_k = 0$) kann spontane Emission erfolgen. Mit zunehmender Feldstärke steigt aber die Wahrscheinlichkeit für Emission, dieses Phänomen wird stimulierte Emission genannt und ist die Basis von Maser und Laser. Sie wurde von Einstein 1916 entdeckt (Zur Quantentheorie der Strahlung).

Die Quantenfeldtheorie beschreibt alle Elementarteilchen als quantisierte Felder. Für jedes Feld gibt es daher Auf- und Absteigeroperatoren, die die

Anzahl der Teilchen dieser Art verändert. Zulässige Interaktionen können dann durch Produkte von solchen Operatoren beschrieben werden.

Das moderne Standardmodell ist eine QFT mit einer grossen Zahl von Feldern. Sie erlaubt, alle bekannten Prozesse zwischen Elementarteilchen zu beschreiben.

Die Festkörperphysik verwendet die gleiche Art von Feldquantisierung um z.B. Gitterschwingungen in einem Kristall zu beschreiben. Damit lässt sich die Wärmekapazität des Festkörpers berechnen.

Die Feldquanten heißen in diesem Fall Phononen und erzeugen eine Wechselwirkung zwischen Elektronen. Die BCS-Theorie der Supraleitung erklärt das Verschwinden des elektrischen Widerstandes damit, dass die Phononen Elektronenpaare koppeln können, die sich dann wie Bosonen verhalten. Bosonen können bei höherer Temperatur alle im gleichen Zustand mit ausgedehnter Wellenfunktion sein.