Skript QT2

28. Juli 2021

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 0

Grundstruktur der Quantenmechanik

0.1 Postulate

Essenz: Doppelspaltexperiment / Stern-Gerlach-Experiment

Zustand: eindeutig / maximal präpariertes physikalisches System, reproduzierbares Verhalten, eindeutige Zeitentwicklung. Beschreibung durch $|\psi\rangle$ eines Hilbertraums. Linearkombinationen erlaubt!

Observablen: Operatoren $\hat{A}$ (hermitesch, da reelle Eigenwerte $\leftrightarrow$ mögliche Messwerte)

Wahrscheinlichkeit: Für ein Messergebnis a_n ist die Wahrscheinlichkeit $|\langle a_n|\psi\rangle|^2$ (normierte Zustände).

Erwartungswert: (Korrollar) $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

Zeitentwicklung: $\hat{H}$ (Hamiltonoperator), $\hat{H}$ sei nicht expl. zeitabh.

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|[\hat{A},\hat{H}]|\psi_2\rangle$$

Schrödinger-Bild

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Heisenberg-Bild

$$|\psi_H\rangle = e^{i\hat{H}t}|\psi(t)\rangle$$

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t}\hat{A}e^{-i\hat{H}t}$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t),\hat{H}]$$

0.2 Ortsraum, Teilchen in 1D

Operatoren $\hat{x}$, $\hat{p}$, $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$.

EZe: $|x\rangle$, $|p\rangle$ (bilden jeweils Basis)

Wellenfunktionen: $\psi(x) := \langle x|\psi\rangle$, $\tilde{\psi}(p) := \langle p|\psi\rangle$

Kapitel 1

Relativistische Quantenmechanik

1.1 Kontinuierliche Symmetrien (Bsp. Rotationsinvarianz)

Frage: Was ist Drehimpuls?

1.1.1 Drehungen in 3D

($\rightarrow$ Liegruppe $SO(3)$)

Aktive Drehung: Bsp. $\mathbf{v}' = R_z(\theta)\mathbf{v}$ (Drehung um Winkel θ um z-Achse)

Infinitesimale Drehungen, $\theta = \varepsilon \rightarrow 0$:

$$R_z(\varepsilon) = \mathbf{1} - i\varepsilon \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{1} - i\varepsilon\ell_z$$

$$\ell_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \ell_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \qquad \ell_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (\ell_k)_{i,j} = -i\varepsilon_{ijk}$$

"Generatoren der zugehörigen Lie-Algebra"

Charakteristische Kommutatorrelation: $[\ell_i, \ell_j] = i\varepsilon_{ijk}\ell_k$

Endliche Drehungen: $R_z(\theta) = \exp\left(-i\theta\ell_z\right)$

1.1.2 Darstellungen

Eine Darstellung einer Gruppe ist eine Zuordnung: $R \mapsto D(R) =$ Matrix / linearer Operator, mit

$$D(R_1R_2) = D(R_1)D(R_2)$$

Physikalische Idee: Viele physikalische Größen $\rightarrow$ angeben, wie sie sich unter Drehungen verhält.

- Impuls: $\mathbf{p} \longmapsto \mathbf{p}' = R\mathbf{p}$
- Energie: $E \longmapsto E' = E = D(R)E$ mit $\forall R : D(R) = 1$

- Ladung: $Q \longmapsto Q' = Q$
- Dichte: $\rho \longmapsto \rho' : \rho'(R\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x})$
- Quantenzustand $|\psi\rangle \longmapsto |\psi'\rangle = \hat{D}(R)|\psi\rangle$

Generatoren für Darstellungen: $\theta = \varepsilon \to 0$

$$D(R_z(\varepsilon)) = \mathbf{1} - i\varepsilon J_z \qquad \text{(Analog für x, y)}$$

mit Operatoren J_x, J_y, J_z wie $D(R_z(\varepsilon))$, diese sind spezifisch für die Darstellung.

$$D(R_z(\theta)) = \exp\left(-i\theta J_z\right)$$

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k$$

Die Generatoren jeder Darstellung erfüllen dieselben Vertauschungsrelationen.

1.1.3 Drehungen in der Quantenmechanik

Darstellung von Drehungen:

$$\hat{D}(R_k(\theta)) : |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = \hat{D}(R_k(\theta))|\psi\rangle$$

Gruppenstruktur:

$$\hat{D}(R_1 R_2) = \hat{D}(R_1)\hat{D}(R_2)$$

Falls Symmetrie:

$$\langle\psi'|\phi'\rangle = \langle\psi|\phi\rangle \Leftrightarrow \langle\psi|\hat{D}^\dagger\hat{D}|\phi\rangle$$

$\hat{D}(R)$ ist ein *unitärer* Operator. $[\hat{D}(R), H] = 0$.

Infinitesimale Drehung:

$$\hat{D}(R_k(\varepsilon)) = \mathbf{1} - i\varepsilon\hat{J}_k$$

Falls Symmetrie:

$$[\hat{J}_k, \hat{H}] = 0 \qquad [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

Per Definition: $\hat{\mathbf{J}}$ is Drehimpuls dieser Quantentheorie.

Konsequenzen bei solchen $\hat{\mathbf{J}}$-Operatoren: (QT1)

$$[\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}] = 0 \qquad \hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$$

Mögliche Eigenzustände: $|j, m\rangle$ mit $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$ und $m = -j, \ldots, j$

Einfachste nicht-triviale Darstellung: $j = \frac{1}{2}$, d.h. 2-Zustandssystem $|\pm\rangle := |j = \frac{1}{2}, m = \pm\frac{1}{2}\rangle$.

$$|\psi\rangle = \psi_+|+\rangle + \psi_-|-\rangle$$

$$\psi \overset{R_k(\theta)}{\longmapsto} \psi' = \left(\mathbf{1} - i\theta\frac{\sigma_k}{2}\right)\psi$$

mit Pauli-Matrizen σ_k.

1.2 Lorentzinvarianz

1.2.1 Lorentzgruppe

Drehungen: $(t, \mathbf{r}) \longmapsto (t, R(\mathbf{r}))$

Boosts in x-Richtung:

$$\begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} \cosh\beta & \sinh\beta & 0 & 0 \\ \sinh\beta & \cosh\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Generatoren: ℓ_x, ℓ_y, ℓ_z wie gehabt. Boosts: $\Lambda_x(\beta) = \mathbf{1} - i\beta k_x + \mathcal{O}(\beta^2)$

$$k_x = i\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad k_y = i\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad k_z = i\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

6 Generatoren: Vertauschungsrelationen (und zyklisch):

$$[\ell_x, \ell_y] = i\ell_z$$

$$[k_x, k_y] = -i\ell_z$$

$$[\ell_x, k_y] = ik_z$$

1.2.2 Darstellungen

Def. Darstellung: Matrizen/Operatoren J_i, K_i, mit $[J_x, J_y] = iJ_z$, $[K_x, K_y] = -iJ_z$, $[J_x, K_y] = iK_z$.

Triviale Darstellung: $J_i = 0$, $K_i = 0$

Spin $\frac{1}{2}$: $J_i = \sigma^i/2$, $K_i = -i\sigma^i/2$. Die Elemente des 2D Darstellungsraumes nennt man *linkshändige Weyl-Spinoren*. (Andere Variante mit $K_i = +i\sigma^i/2$: Elemente sind *rechtshändige Weyl-Spinoren*)

Partität/Raumspiegelung P: $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$, $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$, $\mathbf{J} \mapsto \mathbf{J}$, $\mathbf{K} \mapsto -\mathbf{K}$. Falls P-Transformation genutzt werden soll, sind beide Darstellungen nötig $\Rightarrow$ 4D komplexer Spinorraum aus *Dirac-Spinoren* notwendig.

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_\alpha \\ \overline{\psi}^{\dot\alpha} \end{pmatrix}$$

Darstellung für Diracspinoren:

$$J_i = \begin{pmatrix} \frac{\sigma^i}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sigma^i}{2} \end{pmatrix} \qquad K_i = \begin{pmatrix} -i\frac{\sigma^i}{2} & 0 \\ 0 & i\frac{\sigma^i}{2} \end{pmatrix}$$

Diracspinoren: 4-komponentige komplexe Spinoren. Einfachste Darstellung mit P-Transformation.

Lorentztransformationen und Darstellungen:

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \omega^\mu{}_\nu$$

(mit infinitesimalem und antisymmetrischem $\omega^{\mu\nu}$ (wenn beide Indizes oben!), z.B Drehung, Boost)

$$\Lambda = \mathbf{1} - \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu} L_{\mu\nu}$$

mit $L_{ij} = -L_{ji} = \varepsilon_{ijk}\ell_k$ und $L_{i0} = -L_{0i} = k_i$

Für eine Darstellung S:

$$\boxed{S(\Lambda) := \mathbf{1} - \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu} L_{\mu\nu}}$$

1.2.3 Diracspinoren und γ-Matrizen

$\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4) =$ komplexer Diracspinor.

Def γ-Matrizen: $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbf{1}$

Weyl-Form:

$$\gamma^0 := \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1}_2 \\ \mathbf{1}_2 & 0 \end{pmatrix} \qquad \gamma^i \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$$

Die Generatoren $\mathbf{J}$, $\mathbf{K}$ lassen sich so ausdrücken:

$$S_{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$$

Dies reproduziert die Darstellungsmatrix $L_{\mu\nu}$ der Lorentztransformation.

$\gamma^{\mu\dagger}$: $\gamma^{0\dagger} = \gamma^0$, $\gamma^{i\dagger} = -\gamma^i = \gamma^0\gamma^i\gamma^0$

$$S^\dagger{}_{\mu\nu} = \gamma^0 S_{\mu\nu}\gamma^0$$

$$S^{-1}(\Lambda) = \mathbf{1} + \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu} S_{\mu\nu} = \gamma^0 S^\dagger(\Lambda)\gamma^0$$

Def *Adjungierter Spinor:* $\overline{\psi} := \psi^\dagger\gamma^0$

Lorentz:

$$\psi \longmapsto S(\Lambda)\psi$$

$$\overline{\psi} \longmapsto \overline{\psi}S^{-1}(\Lambda)$$

$$\overline{\psi}\psi \longmapsto \overline{\psi}\psi$$

$$\overline{\psi}\gamma^\mu\psi \longmapsto \Lambda^\mu{}_\nu\overline{\psi}\gamma^\nu\psi$$

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda) = \Lambda^\mu{}_\nu\gamma^\nu$$

1.3 Überblick über relativistische Wellengleichungen

Welche Gleichungen wären erlaubt durch Lorentzinvarianz?

Notation:

- 4-Vektoren: $(x^\mu) = (t, \mathbf{x})$, $(p^\mu) = (E, \mathbf{p})$
- Lorentzinvarianten sind Skalarprodukte, z.B. $p^\mu p_\mu = E^2 - \mathbf{p}^2 =: m^2$

- Ableitungen: $\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu}\right) = (\partial_t, \nabla)$, $\Box = \partial_\mu \partial^\mu = \partial_t - \Delta$
- Elektrodynamik: $j^\mu = (\rho, \mathbf{j})$, $\partial_\mu j^\mu = 0$, $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$, $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$
  Maxwell: $\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu$, homogene Gleichung automatisch durch Potentiale erfüllt.
  Lorentz-Transf.: $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$, $j'^\mu(x') = \Lambda^\mu{}_\nu j^\nu(x)$

1.3.1 Klein-Gordon-Gleichung

$\phi(x)$ sei Skalarfeld ($\phi \mapsto \phi'$ mit $\phi'(x') = \phi(x)$).

$$\boxed{\Box\phi(x) + m^2\phi(x) = 0}$$

Interpretation?

- Einfachste relativistische Differentialgleichung
- "erraten aus QM" (mit QM Ersetzungsregeln $E \to i\partial_t$, $\mathbf{p} \to -i\nabla$)
- Nichtrelativistischer Limes: ein Teilchen, $E \approx m +$ Korrektur. Ansatz:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-imt}\psi_{n.r.}(\mathbf{x}, t)$$

$$\Rightarrow \partial_t^2\psi = (-2im\partial_t\psi_{n.r.} - m^2\psi_{n.r.} + \mathcal{O}(\ddot{\psi}))e^{-imt}$$

$$\Rightarrow 2im\partial_t\psi_{n.r.} = -\Delta\psi_{n.r.}$$

- Klassische Feldgleichung:

$$\mathcal{L}_{KG} = (\partial^\mu\phi^*)(\partial_\mu\phi) - m^2\phi^*\phi$$

  Euler-Lagrange:

$$0 = \partial_\rho \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\rho\phi^*)} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi^*}$$

Rolle als QM Wellengleichung für ein Teilchen in Ortsdarstellung:

Schrödinger-Gleichung nicht-relativistisch: $i\partial_t\psi = -\frac{\Delta}{2m}\psi$
Klein-Gordon-Gleichung: $-\partial_t^2\phi = (-\Delta + m^2)\phi$

Aufenthaltwahrscheinlichkeitsdichte: Suche $(j^\mu) = (\rho, \mathbf{j})$ mit Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu j^\mu = 0$:

$$\phi^*(\Box + m^2)\phi - \phi(\Box + m^2)\phi^* = 0$$

$$= \partial_\mu[\phi^*\partial^\mu\phi - \phi\partial^\mu\phi^*]$$

Definiere 4-Stromdichte:

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

$$\Rightarrow \mathbf{j} = -\frac{i}{2m}\left[\phi^*\nabla\phi - \phi\nabla\phi^*\right]$$

$$\Rightarrow \rho = \frac{i}{2m}\left[\phi^*\partial_t\phi - \phi\partial_t\phi^*\right]$$

Interpretation

- ρ ist nicht positiv definit! $\rho < 0$ möglich! Also kann ρ nicht als Aufenthaltswahrscheinlichkeit interpretiert werden.
- Lösungen: $\phi \sim e^{-iEt+i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$: $\rho = \frac{E}{m} > 0$, $\rho \sim e^{+iEt-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$: $\rho = -\frac{E}{m} < 0$: negative Energie möglich!?
- Idee: KG-Gl. beschreibt zwei Teilchentypen (Teilchen + Antiteilchen) mit entgegengesetzten Ladungen. Interpretiere ρ als elektrische Ladungsdichte.

1.3.2 Dirac-Gleichung

$\psi(x)$ sein "Dirac-Spinorfeld" d.h. $\psi \mapsto \psi'$ mit $\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x)$.

$$S(\Lambda) = \mathbf{1}_4 - \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}S_{\mu\nu}$$

$$S_{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$$

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbf{1}_4$$

Dirac-Gleichung:

$$\boxed{(i\partial_\mu\gamma^\mu - m)\psi = 0}$$

Interpretation:

- nicht einfachste Differenzialgleichung
- erraten von Dirac: gewünscht "Wurzel aus KG-Gleichung" (Herleitung $\curvearrowright$ Lit.)
- $\mathcal{L} = \overline{\psi}(i\partial_\mu\gamma^\mu - m)\psi$
- Adjungierte Dirac-Gl. $i\partial_\mu\overline{\psi}\gamma^\mu + m\overline{\psi} = 0$

$$\Rightarrow \partial_\mu(\overline{\psi}\gamma^\mu\psi) = 0$$

- Def. $j^\mu = \overline{\psi}\gamma^\mu\psi$, $\rho = \psi^\dagger\psi$ ist positiv-definit

Vollständige Darstellung der Lorentztransformationen

$$\psi'(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x) = (\mathbf{1} - \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}S_{\mu\nu})\psi(x - \omega x)$$

und

$$\psi' = (\mathbf{1} - \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}\hat{J}_{\mu\nu})\psi$$

($\hat{J}$ Generatoren der Darstellung der Lorentz-Algebra auf dem Fkt.-Raum der Spinorfelder)

$$\Longrightarrow \hat{J}_{\mu\nu} = i(x_\mu\partial_\nu - x_\nu\partial_\mu) + S_{\mu\nu}$$

$$\hat{J}_{\mu\nu} = \hat{L}_{\mu\nu} + S_{\mu\nu}$$

Analog zur KG-Gl. treten Inkonsistenzen auf, wenn man Diracgl. als 1-Teilchen-Theorie auffasst. Die Probleme sind ähnlich aber nicht gleich.

1.4 Physik und Lösungen der Diracgleichung

1.4.1 Freie Lösungen, Impuls-/Spin-Eigenzustände

Dirac-Gleichung: $(i\not{\partial} - m)\psi = 0$
Gesamt-Drehimpuls: $\hat{J}_{ij} = \hat{L}_{ij} + S_{ij}$. Spin-EZ: $\pm\frac{1}{2}$

Ansatz: $\psi(x) = w(p)e^{\mp ipx}$ (mit $px = p_\mu x^\mu$)

$$\Rightarrow (\pm\not{p} - m)w(p) = 0$$

Eigenwertgleichung für $\not{p}$!

Beachte: $\not{p}^2 = p^\mu\gamma_\mu p^\nu\gamma_\nu = p^\mu p^\nu\gamma_\mu\gamma_\nu = \frac{1}{2}p^\mu p^\nu\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = p^2\mathbf{1}$

D.h. $\not{p}$ hat EWe $\pm\sqrt{p^2}$ vermutlich je 2-fach entartet. Nicht-triviale Lösung der EW-Gl. für $p^2 = m^2$ $\rightarrow$ Teilchen mit Ruhemasse m beschrieben.

Bezeichnungen der Lösungen

$$(\not{p} - m)u(p, s) = 0$$

$$(\not{p} + m)v(p, s) = 0$$

Beispiel: $p^2 = m^2$, $(p^\mu) = (E, 0, 0, p_z)$ in z-Richtung, $E^2 = p_z^2 + m^2$.

$$\not{p} = p^\mu\gamma_\mu = E\gamma_0 + p_z\gamma_3 = E\gamma^0 - p_z\gamma^3 = \begin{pmatrix} \mathbf{1}E & -p_z\sigma^3 \\ p_z\sigma^3 & -\mathbf{1}E \end{pmatrix}$$

Es gilt $[\not{p}, S_{12}] = 0$, d.h. $\not{p}$ und S_z haben simultane Eigenzustände. (allg. $\not{p}$ und $\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{S}}{|\mathbf{p}|}$ = Helizitätsoperator simultan Diagonalisierbar).

EW-Gleichung lösen:

$$u(p, +1/2) = N \cdot \begin{pmatrix} E+m \\ 0 \\ p_z \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$u(p, -1/2) = N \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ E+m \\ 0 \\ -p_z \end{pmatrix}$$

mit $N = \frac{1}{\sqrt{E+m}}$.

$$v(p, +1/2) = N \cdot \begin{pmatrix} p_z \\ 0 \\ E+m \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$v(p, -1/2) = N \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ -p_z \\ 0 \\ E+m \end{pmatrix}$$

Spinoren für andere $\mathbf{p}$: $\mathbf{p} = R\mathbf{p}_z = e^{-\frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}L_{\mu\nu}}\mathbf{p}_z$:

$$u(p,s) = e^{-\frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}S_{\mu\nu}}u(p_z,s)$$

Negative Energien

$$\psi(x) = u(p,s) = e^{-iEt+i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

$$\psi(x) = v(p,s) = e^{+iEt-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

D.h. Energie $(-E) < 0$ für v-Lösungen.

1.4.2 Mehr zum Drehimpuls

Man betrachte die Diracgleichung als quantenmechanische 1-Teilchen-Gleichung. (sinnvoll, solange Antiteilchen und QFT Effekte vernachlässigbar sind).

Formulierung analog zur Schrödingergleichung im Ortsraum:

$$(i\not{\partial} - m)\psi = 0$$

Multiplikation mit γ^0 von links und nach Zeitableitung umstellen:

$$i\partial_t\psi = (-i\gamma^0\gamma^i\partial_i + m\gamma^0)\psi =: \hat{H}_D^{(0)}\psi$$

Drehimpuls aus Darstellung der Lorentztransformation.

$$\hat{J}_{ij} = i(x_i\partial_j - x_j\partial_i) + \hat{S}_{ij} = \hat{L}_{ij} + \hat{S}_{ij}$$

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

Es gilt $[\hat{H}_D^{(0)}, \hat{\mathbf{J}}] = 0$, d.h. Gesamtdrehimpuls erhalten. $[\hat{H}_D^{(0)}, \hat{\mathbf{L}}] = \gamma^0\gamma_1\partial_y - \gamma^0\gamma_2\partial_x$.

Helizität

$$\frac{\hat{\mathbf{S}}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{|\hat{\mathbf{p}}|}$$

$$[\hat{H}_D^{(0)}, \hat{\mathbf{S}}\cdot\hat{\mathbf{p}}] = [\hat{H}_D^{(0)}, \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}S_{ij}\hat{p}^k] =\sim \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\gamma^0\gamma_i\partial_j\partial_k = 0$$

Es gibt simultane Eigenzustände zu Energie, Impuls, Helizität.

Interpretation der 4 Komponenten von ψ

Zu gegebenem Impuls $\mathbf{p}$: 4 linear unabhängige Lösungen:

- $E > 0$, Helizität $\pm\frac{1}{2}$
- $E < 0$, Helizität $\pm\frac{1}{2}$

1.4.3 Kopplung ans elektromagnetische Feld

Freie Diracgleichung: $(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0$

Freie Klein-Gordon-Gleichung: $(-\partial_\mu\partial^\mu - m^2)\phi = 0$

Relativistisches klassisches Teilchen: $L = \frac{1}{2}m\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau}\frac{\mathrm{d}x_\mu}{\mathrm{d}\tau}$

Kopplung and e.m. Feld soll relativistisch invariant und eichinvariant sein. (Eichung $A^\mu(x) \mapsto A^\mu(x) + \partial^\mu\theta(x)$).

Klassisches Teilchen:

$$L = \frac{1}{2}m\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau}\frac{\mathrm{d}x_\mu}{\mathrm{d}\tau} - e\frac{\mathrm{d}x_\mu}{\mathrm{d}\tau}A^\mu(x)$$

(Einfachse denkbare relativistische WW, Wirkung ist eichinvariant, reproduziert Coulomb- und Lorentzkraft)

Kanonisch konjugierter Impuls:

$$\mathcal{P}^\mu = \frac{\partial L}{\partial\frac{\mathrm{d}x_\mu}{\mathrm{d}\tau}} = m\frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau} - eA^\mu$$

$$\Rightarrow H = \frac{1}{2m}(\mathcal{P}^\mu + eA^\mu)^2$$

Rezept: minimale Kopplung $\mathcal{P}^\mu \to \mathcal{P}^\mu + eA^\mu$, Klein-Gordon-Gleichung:

$$\boxed{\left[(i\partial^\mu + eA^\mu)(i\partial_\mu + eA_\mu) - m^2\right]\phi = 0}$$

Dirac-Gleichung:

$$\boxed{\left(i\not{\partial} + e\not{A} - m\right)\psi = 0}$$

Elektromagnetische Stromdichte:

$$j^\mu = e\overline{\psi}\gamma^\mu\psi$$

Eichinvarianz:

$$\begin{aligned} A^\mu(x) &\longrightarrow A^\mu(x) + \partial^\mu\theta(x) \\ \psi(x) &\longrightarrow e^{ie\theta(x)}\psi(x) \end{aligned}$$

Eichkovariante Ableitung: $D^\mu\psi := (\partial^\mu - ieA^\mu)\psi$. Damit gilt $D^\mu\psi \longrightarrow e^{ie\theta(x)}D^\mu\psi$

1.4.4 Nichtrelativistischer Limes

Nichtrelativistische Schrödingergleichung mit e.m. Feld:

$$(i\partial_t + e\Phi)\psi = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2}{2m}\psi$$

Klein-Gordon-Gleichung:

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

$(A^\mu) = (\Phi, \mathbf{A})$, $(i\partial^j) = (-i\partial_j) = (p^j)$.

Ansatz:

- ϕ ist Energie-EZ, $i\partial_t\phi = E\phi$

- $E = m + \mathit{klein}$, $E > 0$
- $e|A^\mu| \ll m$
- $|\partial_t A^\mu| \ll |mA^\mu|$
- $|p| \ll m$

Einsetzen in KG-Gl.:

$$\left[(i\partial_t + e\Phi)(E + e\Phi) - (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 - m^2\right]\phi = 0$$

Vernachlässigen von $\partial_t \Phi$:

$$\left[(E + e\Phi)^2 - (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 - m^2\right]\phi = 0$$

Mit $E + e\Phi = m + (E - m + e\Phi)$ mit Vernachlässigung des Quadrates der letzten Klammer:

$$\left[2m(E - m + e\Phi) - (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2\right]\phi = 0$$

Daraus folgt direkt die nichtrelativistische Schrödingergleichung.

Diracgleichung mit e.m. Feld

$$(i\not{D} - m)\psi = 0$$

Ansatz wie oben. Aufteilung des Diracspinors in zwei Paulispinoren:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} iD_0 - m & iD_i\sigma^i \\ -iD_i\sigma^i & -iD_0 - m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0$$

Nach Ansatz: $iD_0 \to E + e\Phi$, $iD_i\sigma^i = -\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})$.

$$\begin{aligned} (E - m + e\Phi)\psi_A - \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})\psi_B &= 0 \\ (-E - m - e\Phi)\psi_B + \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})\psi_A &= 0 \end{aligned}$$

Eliminiere

$$\psi_B = \frac{\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})}{E + m + e\Phi}\psi_A \cong \left(\frac{1}{2m} + \mathcal{O}(m^{-2})\right)\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})$$

$$\Rightarrow \quad (E - m + e\Phi)\psi_A = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})\right)\left(\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})\right)\psi_A$$

Vereinfachung der σ-Anteile

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{O}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{O}}) = \sigma^i \hat{O}^i \sigma^j \hat{O}^j = \sigma^i \sigma^j \hat{O}^i \hat{O}^j$$

$$= \left(\frac{1}{2}\left\{\sigma^i, \sigma^j\right\} + \frac{1}{2}\left[\sigma^i, \sigma^j\right]\right)\hat{O}^i\hat{O}^j = \left(\delta^{ij} + i\epsilon^{ijk}\sigma^k\right)\hat{O}^i\hat{O}^j$$

$$= \hat{\mathbf{O}}^2 + i\epsilon^{ijk}\sigma^k\frac{1}{2}[\hat{O}^i, \hat{O}^j]$$

Hier: $\hat{\mathbf{O}} = (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})$:

$$\cdots = (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + i\epsilon^{ijk}\sigma^k(-i\partial_i eA^j)$$

$$= (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 + e\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

$$\boxed{(E - m + e\Phi)\psi_A = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\right]\psi_A}$$

Pauli-Gleichung enthält Term $\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$ ($\mathbf{S} = \boldsymbol{\sigma}/2$) mit Vorfaktor:

$$\boxed{g_s \frac{e}{2m}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B} \qquad , \qquad g_s = 2}$$

Bedeutung des g_s-Terms Allg. Hamiltonian für magnetischen Dipol $\boldsymbol{\mu}$ im $\mathbf{B}$-Feld:

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}_{ext}$$

Vergleich mit Pauli-Gleichung liefert $\boldsymbol{\mu}_s = -g_s\frac{e}{2m}\mathbf{S}$ mit $g_s = 2$. Das ist ein intrinsisches magnetisches Dipolmoment, proportional zum Spin.

Vergleich mit klassischer Elektrodynamik (rotierende Ladungsverteilung, Ladung Q, Masse M, Drehimpuls $\mathbf{L}$) liefert $\boldsymbol{\mu} = \frac{Q}{M}\mathbf{L} \Rightarrow$ Klassisches Ergebnis entspricht $g = 1$.

Interpretation des ersten Terms (identisch in der nicht-relativistischen Schrödingergleichung)

$$\frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2}{2m} = \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}}_{E_{kin}} + \underbrace{\frac{e}{2m}(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2}_{\text{e.m. WW}}$$

Bsp. homogenes $\mathbf{B}$-Feld: setze $\mathbf{A}(x) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}\times\mathbf{B})$, dann $\mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}$.

$$\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}}$$

$$\Rightarrow \text{Erster Term } = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{e}{2m}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{L}} + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2$$

1.4.5 Weitere Konsequenzen: Spin-Bahn-Kopplung

Höhere Ordnungen im nicht-relativistischen Limes:

- Spin-Bahn-Kopplung $\sim \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ (Feinstrukturaufspaltung)
- Darwin-Term
- Korrektur E-kin.

Saubere Herleitung durch systematische Entwicklung in Potenzen von m. $\frac{1}{m}$ sei eine kleine Größe.
$\rightarrow$ Foldy-Wouthuysen-Transformation/-Bild.

$$(i\not{D} - m)\psi = 0$$

$$\Leftrightarrow i\partial_t\psi = (-e\Phi + m\gamma^0 - iD_i\gamma^0\gamma^i)\psi = H_D\psi$$

Idee: Unitäre Transformation / neues "Bild", Zerlegung in 2-Spinoren.

$$\psi = e^{-iS}\psi' = e^{-iS}\begin{pmatrix}\psi'_A \\ \psi'_B\end{pmatrix}$$

S hermitesch, eventuell t-abhängig.

Neuer Hamiltonian:

$$
\begin{aligned}
i\partial_t\psi' &= i\partial_t(e^{iS}\psi) = (i\partial_t e^{iS})\psi + e^{iS} i\partial_t\psi \\
&= \left[(i\partial_t e^{iS})e^{-iS} + e^{iS}H_D e^{-iS}\right]\psi'
\end{aligned}
$$

$$
H'_D = i(i\dot{S} + \frac{i^2}{2}[S,\dot{S}] + \frac{i^3}{6}[S,[S,\dot{S}]] + \ldots) + H_D + i[S,H_D] + \frac{i^2}{2}[S,[S,H_D]] + \ldots
$$

Idee 2: H'_D soll blockdiagonal sein in 2-Spinoren (bis zu bestimmter Ordnung) $\rightarrow$ Gleichung für ψ'_A reicht aus.

Konkret:

$$
H_D = m\gamma^0 + (-e\Phi) + \begin{pmatrix} 0 & (\mathbf{p}+e\mathbf{A})\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ (\mathbf{p}+e\mathbf{A})\cdot\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \underbrace{m\gamma^0}_{\mathcal{O}(m^1)} + \underbrace{\mathcal{E}}_{\mathcal{O}(m^0)} + \underbrace{\mathcal{O}}_{\mathcal{O}(m^0)}
$$

Häufige Umformung: $\gamma^0 O = -O\gamma^0$ mit ungeradem Operator O.

1. Schritt: arbeite bis $\mathcal{O}(m^0)$: Setze $S = \mathcal{O}(m^{-1})$

$$
\begin{aligned}
H'_D &= H_D + i[S,H_D] + \mathcal{O}(m^{-1}) = m\gamma^0 + \mathcal{E} + \mathcal{O} + i[S, m\gamma^0 + \mathcal{E} + \mathcal{O}] + \mathcal{O}(m^{-1}) \\
&= m\gamma^0 + \mathcal{E} + \mathcal{O} + i[S, m\gamma^0]
\end{aligned}
$$

Lösung: $S = -\frac{i}{2m}\gamma^0\mathcal{O}$

Damit H'_D komplett ausrechnen bis $\mathcal{O}(m^{-2})$:

$$
H'_D = H_D + i[S,H_D] - \dot{S} + \frac{i^2}{2}[S,[S,H_D]] - \frac{i}{2}[S,\dot{S}] + \frac{i^3}{6}[S,[S,[S,H_D]]] + \mathcal{O}(m^{-3})
$$

Für die einzelnen Terme finden Wirkung

$$
\begin{aligned}
i[S,H_D] &= i\left[-\frac{i}{2m}\gamma^0\mathcal{O}, m\gamma^0 + \mathcal{E} + \mathcal{O}\right] = -\mathcal{O} + \frac{1}{2m}\gamma^0[\mathcal{O},\mathcal{E}] + \frac{1}{m}\gamma^0\mathcal{O}^2 \\
-\dot{S} &= \frac{i}{2m}\gamma^0\dot{\mathcal{O}} \\
\frac{i}{2}[S,\dot{S}] &= -\frac{i}{8m^2}[\mathcal{O},\dot{\mathcal{O}}] \\
\frac{i^2}{2}[S,[S,H_D]] &= -\frac{1}{2m}\gamma^0\mathcal{O}^2 - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O},[\mathcal{O},\mathcal{E}]] - \frac{1}{2m^2}\mathcal{O}^3 \\
\frac{i^3}{3!}[S,[S,[S,H_D]]] &= \frac{1}{6m^2}\mathcal{O}^3
\end{aligned}
$$

Der neue Hamiltonian ist nun

$$
\begin{aligned}
H'_D &= \underbrace{m\gamma^0 + \mathcal{E} + \frac{1}{2m}\gamma^0\mathcal{O}^2 - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O}, i\dot{\mathcal{O}} + [\mathcal{E},\mathcal{O}]]}_{\text{gerade } =: H'_{D,\text{even}}} + \\
&= \underbrace{\frac{1}{2m}\gamma^0(i\dot{\mathcal{O}} + [\mathcal{O},\mathcal{E}]) - \frac{1}{6m^2}\mathcal{O}^3}_{\text{ungerade } =: \mathcal{O}'} \\
&=: H'_{D,\text{even}} + \mathcal{O}'
\end{aligned}
$$

2. Schritt: arbeite bis $\mathcal{O}(m^-1)$:

In Analogie setzen wir $\psi' = e^{iS'}\psi''$ mit $S' = -\frac{i}{2m}\gamma^0\mathcal{O}'$ und erhalten

$$H''_D = H'_{D,\text{even}} + i[S',\mathcal{E}] - \dot{S}' + \mathcal{O}(m^{-3}) := D_{D,\text{even}} + \mathcal{O}''$$

3. Schritt: arbeite bis $\mathcal{O}(m^{-2})$:

Wir setzen wieder $\psi'' = e^{i-iS''}\psi'''$ mit $S'' = -\frac{i}{2m}\gamma^0\mathcal{O}'' = \mathcal{O}(m^{-3})$.

HIER FEHLT NOCH DIE GLEICHUNG FÜR H'''_D

Vollständig ausgerechnet:

$$H'''_D = \underbrace{m\gamma^0 + \mathcal{E} + \frac{1}{2m}\gamma^0\mathcal{O}^2}_{\mathcal{O}(m^{-1})} - \underbrace{\frac{1}{8m^2}[\mathcal{O}, i\dot{\mathcal{O}} + [\mathcal{O},\mathcal{E}]]}_{\mathcal{O}(m^{-2})}$$

- Terme bis $\mathcal{O}(m^{-1})$ liefern genau den Limes aus 1.4.4 inkl. des $g-2$-Terms
- Zusätzliche Terme der relativistischen Korrektur bis $\mathcal{O}(m^{-2})$

Wir diskutieren diese Terme anhand des Zentralpotentials mit $\mathbf{A} = 0$ und $\Psi(\mathbf{x},t) = \Psi(r)$ mit $r = |\mathbf{x}|$. Es ergeben sich die Terme

$$\begin{aligned}
\nabla\Psi(r) &= \frac{\mathbf{x}}{r}\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}r} \\
\mathbf{E} &= -\nabla\Psi \\
\mathcal{E} &= e\Psi \\
\mathcal{O} &= \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & 0 \end{pmatrix} = -i\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla & 0 \end{pmatrix} \\
[\mathcal{O},\mathcal{E}] &= -ie\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E} & 0 \end{pmatrix} \\
[\mathcal{O},[\mathcal{O},\mathcal{E}]] &= (-i)(-ie)\begin{pmatrix} [\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla, \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}] & 0 \\ 0 & [\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla, \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}] \end{pmatrix} \\
[\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla, \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}] &= \sigma^i\sigma^j(\partial_i E^j + E^j\partial_i) - \sigma^j\sigma^i E^j\partial_i \\
&= \nabla\cdot\mathbf{E} + \underbrace{i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\times\mathbf{E})}_{=0} + \underbrace{i^2\epsilon^{ijk}\sigma^k E^j\partial_i}_{=2\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{E}\times\boldsymbol{p})} \\
&= \nabla\cdot\mathbf{E} - \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{L}
\end{aligned}$$

Wir finden den nun bis zum $\mathcal{O}(m^{-2})$ Term blockdiagonalen Hamiltonian

$$H'''_D = \frac{e}{8m^2}\nabla\cdot\mathbf{E} - \frac{e}{2m^2 r}\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}r}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

Der obere Block ist

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= m + H_{\mathcal{O}(m^{-1})} + H_{\mathcal{O}(m^{-2})} + \dots \\
H_{\mathcal{O}(m^{-1})} &= H_{\text{Pauli}} = -e\Psi + \frac{(\mathbf{p}+e\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{e}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} \\
H_{\mathcal{O}(m^{-2})} &= \underbrace{\frac{e}{8m^2}\nabla\cdot\mathbf{E}}_{\text{Darwin-Term}} - \underbrace{\frac{e}{2m^2 r}\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}r}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}}
\end{aligned}$$

Diskussion:

- Darwin-Term: beim Atom $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho_{\text{Kern}} \propto \delta^{(3)}(\mathbf{x})$ ergibt sich eine Korrektur für die s-Orbitale, die am Kern eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit haben
- Spin-Bahn-Koppluns: Wegen dieses Terms $[H_{\text{eff}}, \mathbf{S}] \neq 0$ und $[H_{\text{eff}}, \mathbf{L}] \neq 0$, aber $[H_{\text{eff}}, \mathbf{J}] = 0$.

Kapitel 2

Ununterscheidbare Teilchen

Bosonen und Fermionen

Klassisch: jedes Teilchen hat eine eindeutige Bahnkurve $\rightarrow$ prinzipiell daran erkennbar.

QM: keine eindeutige Bahnkurve

Fragen

- Existieren "ununterscheidbare Teilchen"? $\rightarrow$ Ja! (experimenteller Beweis)
- Wie beschreibt man das? $\rightarrow$ Mehrteilchensysteme, Zustände, Hilberträume/Operatoren
- Nützlicher Formalismus? $\rightarrow$ Erzeuger/Vernichter, Zweite Quantisierung, Quantenfeldtheorie

2.1 Unterscheidbare Teilchen

2.1.1 Zustände

Basiszustände für zwei Teilchen ohne Wechselwirkung:

Basis für Teilchen 1: $|n^{(1)}\rangle$, $n = 1, 2, \ldots$
Basis für Teilchen 2: $|m^{(2)}\rangle$, $m = 1, 2, \ldots$

$\Rightarrow$ vernünftige Annahme: Basiszustände für Teilchen 1+2:
$|n^{(1)}\rangle|m^{(2)}\rangle$, $n, m = 1, 2, \ldots$ "Produktzustände"

Hilbertraum: Teilchen 1 $\mathcal{H}_1^{(1)}$, Teilchen 2 $\mathcal{H}_1^{(2)}$. (Oberer Index Teilchenindex, Unterer Index Teilchenzahl)
Teilchen 1+2: $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)}$ (*Produktraum*)

- $\mathcal{H}_2$ enthält sowohl Produktzustände (*separabel*), z.B.

$$|1^{(1)}\rangle|2^{(2)}\rangle$$

oder

$$\left(|1^{(1)}\rangle + |3^{(1)}\rangle\right)\left(|5^{(2)}\rangle + |7^{(2)}\rangle\right)$$

aber auch *verschränkte Zustände* ("entangled"), z.B.

$$\frac{|1^{(1)}\rangle|1^{(2)}\rangle - |2^{(1)}\rangle|2^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}}$$

Skalarprodukte "offensichtlich" übertragen

$$\left(\langle\psi^{(1)}|\langle\phi^{(2)}|\right)\left(|\psi'^{(1)}\rangle|\phi'^{(2)}\rangle\right) := \left(\langle\psi^{(1)}|\psi'^{(1)}\rangle\right)\cdot\left(\langle\phi^{(2)}|\phi'^{(2)}\rangle\right)$$

Schreibweise: $|\psi^{(1)}\rangle|\phi^{(2)}\rangle = |\psi,\phi\rangle$, Ortsraum-Wellenfunktion: $|x_1^{(1)}\rangle|x_2^{(2)}\rangle = |x_1,x_2\rangle$

$$\langle x_1,x_2|\psi\rangle =: \psi(x_1,x_2)$$

2.1.2 Observablen/Operatoren

Observable: A_2: hermitesche Operatoren auf $\mathcal{H}_2$

- Observablen, die nur ein Teilchen betreffen: entsprechen $A_1^{(1)}$:

$$\langle\psi^{(1)}|\langle\phi^{(2)}|A_2^{(1)}|\psi'^{(1)}\rangle|\phi'^{(2)}\rangle = \langle\psi^{(1)}|A_1^{(1)}|\psi'^{(1)}\rangle\cdot\langle\phi^{(2)}|\phi'^{(2)}\rangle$$

$$A_2^{(1)} = A_1^{(1)}\otimes\mathbf{1}$$

- Analog: Observable betrifft nur Teilchen 2:

$$B_2^{(2)} = \mathbf{1}\otimes B_1^{(2)}$$

Allgemeine Observable: keine Produktstruktur nötig! $\rightarrow$ WW zwischen Teilchen!

Bsp. Coulomb-Potenzial zwischen Teilchen 1 und 2:

$$\langle\psi^{(1)},\phi^{(2)}|V_2|\psi^{(1)},\phi^{(2)}\rangle = \int \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2\frac{-\alpha}{|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|}|\psi(\mathbf{x}_1)|^2|\phi(\mathbf{x}_2)|^2$$

$$\Longrightarrow V_2 = \int \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2(|\mathbf{x}_1^{(1)}\rangle\langle\mathbf{x}_1^{(1)}|\otimes|\mathbf{x}_2^{(2)}\rangle\langle\mathbf{x}_2^{(2)}|)\frac{-\alpha}{|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|}$$

Hamiltonian:

$$H_2 = H_1^{(1)}\otimes\mathbf{1} + \mathbf{1}\otimes H_1^{(2)} + H_{WW}^{(1,2)}$$

2.2 Identische/Ununterscheidbare Teilchen

2.2.1 Prinzipien

Exp: Pauliprinzip, Fermigas, Gibbs Paradoxon (keine Mischungsentropie wenn gleichatomige Gase gemischt werden)

Bisheriger Formalismus reicht nicht aus, da die bisherigen Zustände zu detailliert sind (Zuordnung des Teilchenindexes ist überflüssig)

Fundamentale Beobachtungstatsache / Postulat Zustände eines Systems ununterscheidbarer Teilchen sind gegenüber Vertauschung der Teilchenindizes generell symmetrisch oder generell antisymmetrisch.

Bosonen (Spin ganzzahlig) $|...\psi,\phi...\rangle = +|...\phi,\psi...\rangle$

Fermionen (Spin halbzahlig) $|...\psi,\phi...\rangle = -|...\phi,\psi...\rangle$

2.2.2 Zustände

N-Teilchen Hilbertraum $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1 \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_N$

Permutationsoperator P_{ij}:

$$P_{ij}|...\psi^{(i)}...\phi^{(j)}...\rangle = |...\phi^{(i)}...\psi^{(j)}...\rangle$$

$(P_{ij})^2 = \mathbf{1}$, $(P_{ij})^\dagger = P_{ij}$

(Anti-)symmetrischer Hilbertraum:

- $\mathcal{H}_N^{(+)}$ Teilchenraum mit $P_{ij}|\phi^{(+)}\rangle = |\phi^{(+)}\rangle$
- $\mathcal{H}_N^{(-)}$ Teilchenraum mit $P_{ij}|\phi^{(-)}\rangle = -|\phi^{(-)}\rangle$

Bsp. 2 Bosonen

- Basis $\mathcal{H}_1$: $|n\rangle$
- Basis $\mathcal{H}_2$: $|n^{(1)}, m^{(2)}\rangle$
- Basis
$$\mathcal{H}_2^{(+)} : \frac{|n^{(1)}m^{(2)}\rangle + |m^{(1)}n^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}} =: |n,m\rangle^{(+)}$$

Bsp. 2 Fermionen (Vernachlässige Spin)

- Basis
$$\mathcal{H}_2^{(-)} : \frac{|n^{(1)}m^{(2)}\rangle - |m^{(1)}n^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}} =: |n,m\rangle^{(-)}$$

Bsp. 2 Fermionen (Mit Spin)

- Basis $\mathcal{H}_1$: $|n^{\uparrow}\rangle$, $|n^{\downarrow}\rangle$
- Basis $\mathcal{H}_2$: Vier Kombinationen von n und m für verschiedene Spineinstellungen oder äquivalent:
$$|n^{(1)}m^{(2)}\rangle \otimes |\uparrow\uparrow\rangle, |n^{(1)}m^{(2)}\rangle \otimes \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right), |n^{(1)}m^{(2)}\rangle \otimes |\downarrow\downarrow\rangle, |n^{(1)}m^{(2)}\rangle \otimes \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right)$$

- $\mathcal{H}_2^{(1)}$:

$$\frac{|n^{(1)}m^{(2)}\rangle - |m^{(1)}n^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$\frac{|n^{(1)}m^{(2)}\rangle + |m^{(1)}n^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

Folgerung: Selber Ort unmöglich, wenn Spins gleich.

Frage: Sind obige Zustände eine Basis? Wie konstruiert man allgemein eine Basis von $\mathcal{H}_N^{(\pm)}$?

Antwort: Nimm Basis aus Produktzuständen von $\mathcal{H}_N$, symmetrisiere/antisymmetrisiere jedes Basiselement (wie für $N = 2$ genutzt).

Def. *Symmetrisierungsoperator*

$$S_N^{(\pm)} := \frac{1}{N!}\sum_{\mathcal{P}}(\pm 1)^{\mathcal{P}}\mathcal{P}$$

mit Permutationsoperator $\mathcal{P}$ (beliebiges Produkt von P_{ij}-Operatoren).

Es gilt:

(a)

$$P_{ij}S_N^{(\pm)} = \frac{1}{N!}\sum_{\mathcal{P}}(\pm)^{\mathcal{P}}P_{ij}\mathcal{P} = \pm S_N^{(\pm)} = S_N^{(\pm)}P_{ij}$$

(b)

$$\mathcal{P}S_N^{(\pm)} = (\pm 1)^{\mathcal{P}}S_N^{(\pm)}$$

(c) $S_N^{(\pm)}$ ist hermitesch.

(d)

$$S_N^{(\pm)}S_N^{(\pm)} = S_N^{(\pm)}$$

$S_N^{(\pm)}$ sind hermitesche Projektionsoperatoren auf $\mathcal{H}_N^{(\pm)}$.

Konstruktion einer Basis

- Nimm Basis von $\mathcal{H}_N$ aus Produktzuständen: $|n_1^{(1)}n_2^{(2)}\cdots n_N^{(N)}\rangle$
- Def. $S_N^{(\pm)}|n_1^{(1)}n_2^{(2)}\cdots n_N^{(N)}\rangle =: |n_1\cdots n_N\rangle^{(\pm)}$
- Nimm beliebigen Zustand $|\psi_N^{\pm}\rangle \in \mathcal{H}_N^{\pm}$

$$\begin{aligned}
&\implies |\psi_N^{\pm}\rangle \in \mathcal{H}_N, \\
&\quad P_{ij}|\psi_N^{\pm}\rangle = \pm|\psi_N^{\pm}\rangle \implies S_N^{\pm}|\psi_N^{\pm}\rangle = +|\psi_N^{\pm}\rangle \\
&\implies |\psi_N^{\pm}\rangle = S_N^{\pm}\left(\int |n_1^1\ldots n_N^N\rangle\langle n_1^1\ldots n_N^N|\right)\left(S_N^{\pm}\right)^{\dagger}|\psi_N^{\pm}\rangle \\
&\qquad = \sum\int \underbrace{|n_1\ldots n_N\rangle}_{\text{Basiszustände}}\underbrace{\langle n_1\ldots n_N|\psi_N^{\pm}\rangle}_{\text{Koeffizienten}}
\end{aligned}$$

In der Tat stimmt die obige Antwort und die Basis ist durch die obige Gleichung gegeben.

- Normierung: per Konstruktion gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\mathbf{1}_{\mathcal{H}_N^\pm} = \int |n_1 \dots n_N\rangle^\pm \langle n_1 \dots n_N|^\pm$$

  wegen $S_N^\pm S_N^\pm = S_N^\pm$ aber anders normiert als im 2-Teilchen-Beispiel.

Observablen, weitere Motivation für Symmetrisierungspostulate

System aus N identischen Teilchen, A_N sei sinnvolle Observable, $|\psi_N\rangle$ und $|\phi_N\rangle$ seien sinnvolle Zustände.

- $|\psi_N\rangle$ und $P_{ij}|\psi_N\rangle$ "bedeuten das selbe"
- Sinnvolle Annahme für die Observablen

$$\begin{aligned} \langle\psi_N|A_N|\psi_N\rangle &= \langle\psi_N|P_{ij}A_NP_{ij}|\psi_N\rangle \\ &\implies A_N = P_{ij}A_NP_{ij} \implies [A_N, P_{ij}] = 0 \end{aligned}$$

  für jede sinnvolle Observable auf dem Raum der sinnvollen Zustände.
- Spezielle Observable $A_N := |\psi_N\rangle\langle\psi_N|$ ergibt

$$P_{ij}A_N|\psi_N\rangle = A_NP_{ij}|\psi_N\rangle \iff (P_{ij}|\phi_N\rangle)\langle\phi_N|\psi_N\rangle = |\phi_N\rangle\langle\phi_N|P_{ij}|\psi_N\rangle$$

  Woraus schließlich folgt dass

$$\iff P_{ij}|\phi_N\rangle = \lambda|\phi_N\rangle \implies \lambda = \pm 1$$

  .
- Das Symmetrisierungspostulat wird hierdurch suggestiert. Das Postulat selbst ist noch etwas stärker, denn es besagt, dass für jede Teilchensorte genau nur ein Vorzeichen erlaubt ist.
- Beispiele für Observablen

2 Teilchen unterscheidbar	$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$; $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2$; $H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m}$; $\boldsymbol{L}_1, \boldsymbol{L}_2, \boldsymbol{L}_{\text{ges}}$ H sinnvoll, $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$ nicht sinnvoll
2 Teilchen ununterscheidbar	$\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ nicht sinnvoll, aber $\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2$, $(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)^2$, $|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|^2$, $\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2$ sinnvoll

- Vollständiges System kommutierender Observablen ist kompliziert.
- Oft möglich: Rechnen nicht direkt mit $\mathcal{H}_N^\pm$ sondern in $\mathcal{H}$ und mit einzelnen Observablen und am Ende: Spezialisieren/Einschränken auf symmetrische bzw. antisymmetrische Zustände.

2.3 Einfache Anwendungen

2.3.1 Grund- und angeregte Zustände

N Teilchen ohne Wechselwirkung;

1. Unterscheidbar: z.B. die Elektronen im He-Atom
2. Fermionen: z.B. Elektronen im Metall
3. Bosonen: mehrere H-Atome

Beispiel: Alle Teilchen im Potential mit möglichen Energien e_1, e_2, $e_3, \ldots$ und Eigenzuständen $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle, \ldots$.

1. Grundzustand $|1^1, 1^2\rangle$, $E = 2e_1$
   1. Angeregter Zustand $|1^1 2^2\rangle$ oder $|2^1 1^2\rangle$, $E = e_1 + e_2$ 2-fach entartet.
2. Grundzustand N: $|1, 2, \ldots, N\rangle^-$, $E = e_1 + e_2 + \ldots + e_N$ nicht entartet. e_N ist die maximale besetzte Energie im Grundzustand, genannt Fermienergie
   1. Angeregter Zustand: $|1, 2, \ldots, N-1, N+1\rangle^-$ nicht entartet! $\Delta E = e_{N+1} - e_N$
3. Grundzustand N: $|1, 1, \ldots, 1\rangle^+$, $E = Ne_1$
   1. Angeregter Zustand: $|2, 1, \ldots, 1\rangle$ nicht entartet! $\Delta E = e_2 - e_1$

2.3.2 Direkter Prozess vs. Austauschterm

Zwei Teilchen: $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle \longrightarrow$ Prozess $\longrightarrow |n\rangle$, $|m\rangle$

Anfangszustand $|i\rangle \longrightarrow$ Endzustand $|f\rangle$. Frage: Was ist die Wahrscheinlichkeit?

$$P_{i\to f} = |A_{i\to f}|^2$$

Unterscheidbar: (entweder nur links oder nur rechts):

- "direkt":
$$A^d_{i\to f} = \langle n^{(1)} m^{(2)} | \psi^{(i)} \phi^{(2)} \rangle = \langle n|\psi\rangle\langle m|\phi\rangle$$
- "Austauschterm":
$$A^a_{i\to f} = \langle m^{(1)} n^{(2)} | \psi^{(1)} \phi^{(2)} \rangle = \langle m|\psi\rangle\langle n|\phi\rangle$$
- Gesamtwahrscheinlichkeit: "entweder $\langle nm|$ oder $\langle mn|$"
$$P_{i\to f} = |A^d_{i\to f}|^2 + |A^a_{i\to f}|^2$$

Bosonen:

$$|i\rangle = \frac{|\psi\phi\rangle + |\phi\psi\rangle}{\sqrt{2}} \qquad |f\rangle = \frac{|nm\rangle + |mn\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$A_{i\to f} = \langle f|i\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle\psi|n\rangle\langle\phi|m\rangle + \langle\phi|n\rangle\langle\psi|m\rangle\right)\cdot 2 = A^d_{i\to f} + A^a_{i\to f}$$

$$P_{i\to f} = \left|A^d_{i\to f} + A^a_{i\to f}\right|^2$$

Fermionen (Analog):

$$P_{i\to f} = \left|A^d_{i\to f} - A^a_{i\to f}\right|^2$$

Spezialfall $n = m$: (Beide Teilchen gehen in den selben Zustand über)

- Fermionen: $P_{i\to f} = 0$
- Bosonen: $P_{i\to f} = 2|A^d_{i\to f}|^2$ (Doppelt so groß wie bei unterscheidbaren Teilchen)

2.3.3 Wasserstoffmolekül H_2

Chemische Bindung, gewisser Atomabstand R minimiert die Energie. Austauschwechselwirkung sehr wichtig $\rightarrow$ Orts-Wellenfunktion.

Im Grundzustand: Orts-Wellenfunktion symmetrisch, Spin antisymmetrisch.

Annahme/Näherung: Kerne fixiert im Abstand R, Positionen der Kerne a und b, Elektronen 1 und 2

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} - \alpha\left(\frac{1}{r_{1a}} + \frac{1}{r_{2a}} + \frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{2b}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R}\right)$$

$$H = H_{1,a} + H_{2,b} - \alpha\left(\frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R}\right)$$

H-Atom-Zustände, Struktur der 2-Elektron-Zustände.

Erinnerung H-Atom:

Quantenzahlen n, l, m: $\psi_{nlm} \sim R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$

Grundzustand:

$$\psi_{100} = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_B}}$$

(Bohrscher Radius $a_B = \frac{1}{\alpha m}$).

Energien: $E_1 = -\frac{\alpha^2 m}{2}$, $E_n = \frac{E_1}{n^2}$ (Zusätzlich ungebundene Zustände mit $E > 0$)

H-Atom mit Proton im Punkt $\boldsymbol{R}_a$

Selbe Energie-EW, Eigenzustände: $\psi_a(\boldsymbol{x}) = \psi_{\text{Ursprung}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{R}_a)$

2-Elektron-Zustände 2 Basen von 1-T.-Zuständen um Proton a $|\psi_a, nlm\rangle$ und um Proton b $|\psi_b, nlm\rangle$

Basis von 2-Teilchen-Zuständen (antisymmetrisch): $\mathcal{H}_2^{(-)}$:

$$|\psi_{a,nlm}, \psi_{b,n'l'm'}\rangle^{(-)} \otimes \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$|\psi_{a,nlm}, \psi_{b,n'l'm'}\rangle^{(+)} \otimes \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right)$$

Spinoperator kommutiert mit Hamiltonian, des Weiteren: $[\boldsymbol{S}^2, S_z] = 0$. Simultane Eigenzustände:

$$|SM\rangle \qquad \boldsymbol{S}^2|SM\rangle = S(S+1)|SM\rangle \qquad S_z|SM\rangle = M|SM\rangle$$

Spin-Notation:

$$\begin{aligned} |1,1\rangle &:= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1,0\rangle &:= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |1,-1\rangle &:= |\downarrow\downarrow\rangle \\ |0,0\rangle &:= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Damit Basis:

Ort antisymmetrisch, Spin $S = 1$: $|\psi_{a,nlm}, \psi_{b,n'l'm'}\rangle^{(-)} \otimes |1, M\rangle$
Ort symmetrisch, Spin $S = 0$: $|\psi_{a,nlm}, \psi_{b,n'l'm'}\rangle^{(+)} \otimes |0, 0\rangle$

Idee zur Lösung des H_2-Moleküls:

- Ziel: Grundzustandsenergie? Optimaler Abstand R?
- Annahme/Näherung: obigen Basiszustände sind Eigenzustände des vollen Moleküls (d.h. WW klein, H-Atome nur wenig beeinflusst)
- Variationsprinzip: Ansatz sinnvoller Zustände $|\psi_{\text{sinnvoll}}\rangle$

$$E_{var} = \frac{\langle\psi_{\text{sinnvoll}}|H|\psi_{\text{sinnvoll}}\rangle}{\langle\psi_{\text{sinnvoll}}|\psi_{\text{sinnvoll}}\rangle}$$

  Auf jeden Fall: $E_{var} \geq E_{\text{Grundzustand}}$ (Gleichheit bei guter Wahl)

Heitler-London-Näherung

Wähle $|\psi_{\text{sinnvoll}}\rangle := |\psi\rangle^{(\pm)} = |\phi_a, \phi_b\rangle^{(\pm)} \otimes |SM\rangle$, wobei ϕ_a und ϕ_b die Grundzustände bezüglich der einzelnen H-Atome sind. Bei folgenden Matrixelementen: $\langle SM|SM\rangle = 1$ trägt nicht weiter bei $\rightarrow$ ab jetzt nur noch Ortsraum betrachten.

$$\langle \boldsymbol{x}|\phi_{a,b}\rangle = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_{a,b}|}{a_B}}$$

Längere Rechnung ($\psi^{(\pm)}$ einsetzen und bekannte Skalarproduktrelationen, Normierung ausnutzen und beim Matrixelement auf Eigenzustände von Teilen des Hamiltonians achten):

(a)

$$\langle\psi^{(\pm)}|\psi^{(\pm)}\rangle = 1 \pm |L_{ab}|^2$$

mit $L_{ab} = \langle\phi_a|\phi_b\rangle = \int \mathrm{d}^3x\ \phi_a(\boldsymbol{x})\phi_b(\boldsymbol{x})$ (Überlapp).

(b)

$$\langle\psi^{(\pm)}|H|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle\phi_a^{(1)}\phi_b^{(2)}|H|\phi_a^{(1)}\phi_b^{(2)}\rangle \pm \langle\phi_a^{(1)}\phi_b^{(2)}|H|\phi_b^{(1)}\phi_a^{(2)}\rangle$$

Diagonalterm:

$$\langle\phi_a^{(1)}\phi_b^{(2)}|H|\phi_a^{(1)}\phi_b^{(2)}\rangle = 2E_1 + C_{ab}$$

mit Coulomb-Zusatzenergie

$$\begin{aligned} C_{ab} = \frac{\alpha}{R} &- \alpha \int \mathrm{d}^3x\ |\phi_a(\boldsymbol{x})|^2 \frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_b|} \\ &- \alpha \int \mathrm{d}^3x\ |\phi_b(\boldsymbol{x})|^2 \frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_a|} \\ &+ \alpha \int \mathrm{d}^3x_1\ \mathrm{d}^3x_2 \frac{|\phi_a(\boldsymbol{x}_1)|^2|\phi_b(\boldsymbol{x}_2)|^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|} \end{aligned}$$

Off-Diagonalterm:

$$\langle\phi_a^{(1)}\phi_b^{(2)}|H|\phi_b^{(1)}\phi_a^{(2)}\rangle = 2E_1|L_{ab}|^2 + A_{ab}$$

mit Austauschterm

$$\begin{aligned}A_{ab} = \frac{\alpha}{R}|L_{ab}|^2 - \alpha L_{ab}^* \int \mathrm{d}^3x\, \frac{\phi_a^*(\boldsymbol{x})\phi_b(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_a|} \\ - \alpha L_{ab} \int \mathrm{d}^3x\, \frac{\phi_a(\boldsymbol{x})\phi_b^*(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{R}_b|} \\ + \alpha \int \mathrm{d}^3x_1\, \mathrm{d}^3x_2 \frac{\phi_a^*(\boldsymbol{x}_1)\phi_b(\boldsymbol{x}_1)\phi_b^*(\boldsymbol{x}_2)\phi_a(\boldsymbol{x}_2)}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}\end{aligned}$$

Damit

$$\boxed{E_{var}^{(\pm)} = 2E_1 + \frac{C_{ab} \pm A_{ab}}{1 \pm |L_{ab}|^2}}$$

numerisch ausrechnen!

Stabile Bindung? Für welches R?

2.4 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

2.4.1 Fock-Raum

Der *Fock-Raum* ist ein Zustandsraum, der sowohl 1-Teilchen-, also auch Mehr-Teilchen-Zustände enthält.

Start wie bisher: 1-Teilchenraum $\mathcal{H}_1$, Basis $|n\rangle$ sei gegeben.

Nun füge hinzu:

- "Vakuumzustand" $|0\rangle$ (Nicht Nullvektor!), $\langle 0|0\rangle = 1$
  $\rightarrow$ Vakuum-Hilbertraum $\mathcal{H}_0 = \{c|0\rangle, c \in \mathbb{C}\}$
- "Fockraum"
  Bosonen: $\mathcal{F} := \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2^{(+)} \oplus \mathcal{H}_3^{(+)} \oplus \ldots$
  Fermionen: $\mathcal{F} := \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2^{(-)} \oplus \mathcal{H}_3^{(-)} \oplus \ldots$

  Basis von $\mathcal{F}$:

  - Vakuum: $|0\rangle$
  - 1-Teilchen: $|n\rangle$
  - 2-Teilchen: $|n_1 n_2\rangle^{(\pm)}$
  - 3-Teilchen: $|n_1 n_2 n_3\rangle^{(\pm)}$

  Skalarprodukte:

$$\langle N\text{-Teilchen-Zustand}|M\text{-Teilchen-Zustand}\rangle = \begin{cases} 0 & N \neq M \\ \text{wie gehabt} & N = M \end{cases}$$

2.4.2 Erzeuger/Vernichter für Bosonen

Erzeugungsoperator $a_n^\dagger$ "erzeugt ein zusätzliches Teilchen im Basiszustand $|n\rangle$"

$$a_n^\dagger : \mathcal{H}_N^{(+)} \to \mathcal{H}_{N+1}^{(+)} \qquad a_n^\dagger|0\rangle = |n\rangle \qquad a_n^\dagger|m\rangle = \sqrt{2}|nm\rangle^{(+)} \qquad a_n^\dagger|mk\rangle^{(+)} = \sqrt{3}|nmk\rangle^{(+)}, \qquad ...$$

Jeder Basiszustand des Fockraums lässt sich durch mehrfache Anwendung des Erzeugers auf das Vakuum gewinnen.

$$\boxed{|n_1, ..., n_N\rangle^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{N!}} a_{n_1}^\dagger \cdots a_{n_N}^\dagger |0\rangle}$$

Vertauschungsrelationen Nimm einen beliebigen Basiszustand aus $\mathcal{F}$

$$a_{n_1}^\dagger a_{n_2}^\dagger |m_1, ..., m_N\rangle^{(+)} = \sqrt{(N+1)(N+2)}|n_1 n_2 m_1, ..., m_N\rangle^{(+)}$$
$$a_{n_2}^\dagger a_{n_1}^\dagger |m_1, ..., m_N\rangle^{(+)} = \sqrt{(N+1)(N+2)}|n_2 n_1 m_1, ..., m_N\rangle^{(+)}$$

$$\Rightarrow [a_{n_1}^\dagger, a_{n_2}^\dagger] = 0 \qquad \text{(Für Bosonen)}$$

Vernichtungsoperator $a_n := (a_n^\dagger)^\dagger$

$$a_n|0\rangle = 0$$
$$a_n|m\rangle = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ |0\rangle & n = m \text{ (und Zustände normiert)} \end{cases}$$
$$a_n|m_1, ..., m_N\rangle^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} \delta_{nm_i} |m_1 ... m_{i-1} m_{i+1} ... m_N\rangle^{(+)}$$

Vertauschungsrelation

$$a_n a_m^\dagger |m_1 ... m_N\rangle^{(+)} = a_n \sqrt{N+1}|m m_1 ... m_N\rangle^{(+)} = \delta_{nm}|m_1 ... m_N\rangle + \sum \delta_{nm_i}|m m_1 ... m_{i-1} m_{i+1} ... m_N\rangle^{(+)}$$
$$a_m^\dagger a_n |m_1 ... m_N\rangle^{(+)} = \sum \delta_{nm_i}|m m_1 ... m_{i-1} m_{i+1} ... m_N\rangle^{(+)}$$

Differenz enthält nur δ_{nm}-Term.

$$[a_n, a_m^\dagger] = \delta_{nm} := \langle n|m\rangle$$
$$[a_n^\dagger, a_m^\dagger] = 0$$
$$[a_n, a_m] = 0$$

Diese Vertauschungsrelationen beschreiben die Bose-Natur der Teilchen.

2.4.3 Erzeuger/Vernichter für Fermionen

Erzeugungsoperator

$$c_n^\dagger : \mathcal{H}_N^{(-)} \to \mathcal{H}_{N+1}^{-} \qquad c_n^\dagger|0\rangle = |n\rangle \qquad c_n^\dagger|m\rangle = \sqrt{2}|nm\rangle^{(-)} \qquad ...$$

$$\boxed{|n_1, ..., n_N\rangle^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{N!}} c_{n_1}^\dagger \cdots c_{n_N}^\dagger |0\rangle}$$

Vernichter: $c_n := (c_n^\dagger)^\dagger$

Vertauschungsrelationen Vorgehen analog zu Bosonen.

$$\{c^\dagger_{n_1} c^\dagger_{n_2}\} = 0$$

$$c_n|m_1...m_N\rangle^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum (-1)^{i-1} \delta_{nm_i} |m_1...m_{i-1} m_{i+1}...m_N\rangle^{(-)}$$

$$\begin{aligned}
\{c_n, c^\dagger_m\} &= \delta_{nm} := \langle n|m\rangle \\
\{c^\dagger_n, c^\dagger_m\} &= 0 \\
\{c_n, c_m\} &= 0
\end{aligned}$$

Diese Vertauschungsrelationen beschreiben die Fermi-Statistik.

2.4.4 Besetzungszahldarstellung

1.-T.-Basiszustände $|\psi_n\rangle$, Mehr-T.-Zustände z.B. $a^\dagger_{\psi_{n_1}} a^\dagger_{\psi_{n_2}} a^\dagger_{\psi_{n_3}} |0\rangle = \sqrt{3!} |\psi_{n_1} \psi_{n_2} \psi_{n_3}\rangle$

Äquivalente Charakterisierung: "... Teilchen mit Zustand ψ_i" $\rightarrow$ *Besetzungszahldarstellung* (Nur sinnvoll für sym./antisym. Zustände, mit abzählbarer Basis)

$$|\psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle^{(\pm)} \quad \hat{=} \quad |1, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, ...\rangle$$

Häufig andere Normierung genutzt:

Bsp:

$$\begin{aligned}
a^\dagger_{\psi_1} a^\dagger_{\psi_2} a^\dagger_{\psi_3} |0\rangle &= \sqrt{3!} |\psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle^{(\pm)} \\
|\psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle^{(\pm)} &= \frac{1}{3!} \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{\mathcal{P}} |\psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle \\
\langle \psi_1 \psi_3 \psi_6 | \psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle^{(\pm)} &= \frac{1}{3!}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a^\dagger_{\psi_1} a^\dagger_{\psi_1} a^\dagger_{\psi_5} |0\rangle &= \sqrt{3!} |\psi_1 \psi_1 \psi_5\rangle^{(+)} \\
|\psi_1 \psi_1 \psi_5\rangle^{(+)} &= \frac{1}{3!} \sum_{\mathcal{P}} |\psi_1 \psi_1 \psi_5\rangle \\
\langle \psi_1 \psi_1 \psi_5 | \psi_1 \psi_1 \psi_5\rangle^{(+)} &= \frac{2!}{3!}
\end{aligned}$$

Allgemein:

- Falls jeder Zustand maximal einfach besetzt ist, dann Umnormierung mit $\sqrt{N!}$
- Falls Zustände Besetzungszahlen $n_1, n_2, ...,$ haben, dann Umnormierung mit

$$\sim \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! ...}}$$

Besetzungszahldarstellung normiert

$$|n_1, n_2, ...\rangle = \pm \cdots \frac{\left(a^\dagger_{\psi_2}\right)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \frac{\left(a^\dagger_{\psi_1}\right)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} |0\rangle$$

Vorzeichen für Bosonen immer $+$.

2.4.5 Formulierung von Observablen

Immer entweder Bose/Fermi aber immer mit $a^\dagger/a$

Nehme direkte normierte Basis $|\psi_n\rangle$

Besetzungszahloperator:

$$\hat{n}_{\psi_k} := a^\dagger_{\psi_k} a_{\psi_k}$$
$$\hat{n}_{\psi_k}|0\rangle = 0$$

Vertauschungsrelation:

$$\hat{n}_{\psi_k} a^\dagger_{\psi_l} = a^\dagger_{\psi_k} a_{\psi_k} a^\dagger_{\psi_l} = a^\dagger_{\psi_l} \hat{n}_{\psi_k} + \delta_{kl} a^\dagger_{\psi_l}$$
$$[\hat{n}_{\psi_k}, a^\dagger_{\psi_l}] = \delta_{kl} a^\dagger_{\psi_l} \qquad [\hat{n}_{\psi_k}, \left(a^\dagger_{\psi_l}\right)^{n_l}] = n_l \delta_{kl} \left(a^\dagger_{\psi_l}\right)^{n_l}$$

$$\hat{n}_{\psi_k}|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle = n_k|n_1, n_2, ..., n_k, ...\rangle$$

Teilchenzahloperator:

$$N := \sum_k \hat{n}_{\psi_k}$$

Nebenrechnung:

$$a^\dagger_{\psi_k} a_{\psi_l}|\psi_{n_1}, ..., \psi_{n_N}\rangle^{(\pm)} = \sum_{m=1}^{N} \delta_{l n_m}|\psi_{n_1}, ..., \psi_k, ..., \psi_{n_N}\rangle^{(\pm)}$$

(wobei ψ_k den Zustand ψ_{n_m} ersetzt)

Einteilchenobservablen: z.B. kinetische Energie:

$$T_1 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$$
$$T_N = \sum_{m=1}^{N} T_1^{(m)}$$

Matrixelement zw. 1-T.-Zuständen

$$\langle\psi_k|T_1|\psi_l\rangle =: T_{kl}$$
$$T_1|\psi_l\rangle = \sum_k T_{kl}|\psi_k\rangle$$

Wirkung auf N-T.-Zustand:

$$T_N|\psi_{n_1}...\psi_{n_N}\rangle^{(\pm)} = \sum_{m=1}^{N} \sum_k T_{k n_m}|\psi_{n_1}, ..., \psi_k, ..., \psi_{n_N}\rangle^{(\pm)}$$

Vergleich mit Nebenrechnung:

$$\boxed{T_N = \sum_{k,l} T_{kl}\, a^\dagger_{\psi_k} a_{\psi_l}}$$

Zwei-Teilchen-Observablen (z.B. Coulomb-Potential zwischen Teilchen i,j)

$$V_2^{(ij)} : \langle \psi_{k_1} \psi_{k_2} | V_2^{(12)} | \psi_{l_1} \psi_{l_2} \rangle =: V_{k_1,k_2,l_1,l_2}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_2^{(ij)}$$

analog

$$V = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 l_1 l_2} V_{k_1,k_2,l_1,l_2} a^\dagger_{\psi_{k_1}} a^\dagger_{\psi_{k_2}} a_{\psi_{l_2}} a_{\psi_{l_1}}$$

Beispiel Impulsbasis:

Nicht diskret, sondern kontinuierlich. Impuls-EZ für 1 Teilchen $|\mathbf{p}\rangle$, W.fkt $\langle \mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Erzeuger/Vernichter, kontinuierlicher Index:

$$[a_\mathbf{p}, a^\dagger_{\mathbf{p}'}] = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Alles analog mit $\sum_{k,l} \to \int \mathrm{d}^3p\, \mathrm{d}^3p'$

$$T = \int \mathrm{d}^3p\, \mathrm{d}^3p'\, \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\, \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') a^\dagger_{\mathbf{p}'} a_\mathbf{p}$$

$$\boxed{T = \int \mathrm{d}^3p\, \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\, a^\dagger_\mathbf{p} a_\mathbf{p}}$$

2-Teilchen-Potentiale in Impulsbasis:

im Ortsraum: $V_2^{(12)} = V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$:

$$V = \frac{1}{2} \sum \int V_{\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2'\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} a^\dagger_{\mathbf{p}_1'} a^\dagger_{\mathbf{p}_2'} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1}$$

$$\begin{aligned}
V_{\mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2'\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2} &= \langle \mathbf{p}_1'\mathbf{p}_2' | V_2 | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^6} \int \mathrm{d}^3x_1\, \mathrm{d}^3x_2\, e^{i(\mathbf{p}_1\mathbf{x}_1 + \mathbf{p}_2\mathbf{x}_2 - \mathbf{p}_1'\mathbf{x}_1 - \mathbf{p}_2'\mathbf{x}_2)}\, V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \\
&= \delta^{(3)}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2') \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3z\, e^{i\mathbf{z}\mathbf{q}} V(\mathbf{z})
\end{aligned}$$

mit $\mathbf{z} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ und $\mathbf{q} = \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_2$

$$\boxed{V = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3p_1\, \mathrm{d}^3p_2\, d^3q\, \frac{1}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\mathbf{q}) a^\dagger_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}_2-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1}}$$

2.4.6 Kurz-Überblick über Anwendungen

System identischer Teilchen mit 2.-T.-WW, endl. Volumen

$$H = \underbrace{T + V_{ext}}_{H_0} + V_2$$

Wähle 1-T-Basis aus H_0 Eigenzuständen:

$$H_0|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

Zugehöriger Erzeuger: $a_n^\dagger$

$$T + V_{ext} = \sum_n E_n a_n^\dagger a_n$$

V_2 in Impulsbasis:

$$V_2 = \frac{2}{L^3} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}',\mathbf{q}} \tilde{V}(\mathbf{q}) a^\dagger_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}}$$

Genereller Hamiltonian für Festkörperelektronen mit spinunabhängigem V_2

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2L_3} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}\sigma_1\sigma_2} \tilde{V}(\mathbf{q}) c^\dagger_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q},\sigma_1} c^\dagger_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q},\sigma_2} c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}$$

Genereller Hamiltonian für Bosegas mit Wechselwirkung:

$$H = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a^\dagger_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{q}} \tilde{V}(\mathbf{q}) a^\dagger_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}_2+\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1}$$

Anwendung: Hartree-Fock-Näherung

$c^\dagger_A c^\dagger_B c_C c_D$ = Produkt aus Paar AB oder aus Paar $A'B'$

$$A = c^\dagger_A c_D \qquad B = c^\dagger_B c_C \qquad A' = c^\dagger_A c_C \qquad B' = c^\dagger_B c_D$$

Mean-field-Näherung:

$$A = \langle A \rangle + \delta A \qquad B = \langle B \rangle + \delta B$$

$$AB = (\langle A \rangle + \delta A)(\langle B \rangle + \delta B) \approx \langle A \rangle B + A\langle B \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle$$

H.F.-Näherung:

$$c^\dagger c^\dagger c c \approx A\langle B \rangle + B\langle A \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle - A'\langle B' \rangle - B'\langle A' \rangle + \langle A' \rangle\langle B' \rangle$$

(s. Wick-Theorem)

$$\Rightarrow \quad H^{\text{genähert}} \approx \text{Summe von Termen } \sim c^\dagger c$$

Weitere Anwendungsbeispiele: Supraleitung, Suprafluidität

2.5 Ortsraum, Impulsraum, QFT (Spin=0)

2.5.1 Zur Interpretation der letzten Ergebnisse

$$H = T + V$$

In Impulsbasis:

$$H = \int \mathrm{d}^3p\, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a^\dagger_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3p_1\, \mathrm{d}^3p_2\, \mathrm{d}^3q\, \tilde{V}(\mathbf{q}) a^\dagger_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}_2+\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}_2} a_{\mathbf{p}_1}$$

- freier Anteil: Summe über harmonische Oszillatoren mit $\omega_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$.
- Zahl von Teilchen mit $\mathbf{p}$: Anregungszahl des entsprechenden Oszillators $n_{\mathbf{p}} = a^\dagger_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}$
- Bedeutung der Oszillatoren: de Broglie-Wellen der Impuls-Eigenzustände
- Bedeutung von $\sum$ bzw. $\int \mathrm{d}^3p$: Oszillatoren sind unabhängig, T beschreibt keine Wechselwirkung zwischen den Teilchen.
- Wechselwirkungsanteil als Feynmandiagramm. (Siehe Vorlesung)

  Das gegebene Feynmandiagramm enthält zwei Teilchen mit Impulsen $\mathbf{p}_1$ und $\mathbf{p}_2$, die von links kommen und in der Mitte wechselwirken mit $\tilde{V}(\mathbf{q})$ (Wie ein bosonisches Austauschteilchen gezeichnet). Danach kommen Teilchen mit veränderten Impulsen $\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}$ und $\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}$ rechts raus.

2.5.2 Ortsraum

Ortsraum-EZ für ein Teilchen: $|\mathbf{x}\rangle$.

Erzeuger/Vernichter kontinuierlicher "Index": $a^\dagger_{\mathbf{x}}$. Andere Bezeichnung $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$.

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{y})]^{(\pm)} = 0$$
$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{y})]^{(\pm)} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$
$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})|0\rangle = |\mathbf{x}\rangle$$

Zusammenhang mit Impulsdarstellung:

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int \mathrm{d}^3p\, a^\dagger_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}}$$
$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int \mathrm{d}^3p\, a_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}}$$

Dann mit 2-Teilchen-Potential:

$$V = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x_1\, \mathrm{d}^3x_2\, \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x_1})\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x_2}) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{x_2})\hat{\Psi}(\mathbf{x_1})$$

Dann freier 1-Teilchen-Hamiltonian:

$$
\begin{aligned}
T &= \int \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2\,\langle\mathbf{x}_2|\frac{\mathbf{p}^2}{2m}|\mathbf{x}_1\rangle\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x_2})\hat{\Psi}(\mathbf{x_1}) \\
&= \int \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2\,\mathrm{d}^3p\,\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\frac{e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x}_2-\mathbf{p}x_1)}}{(2\pi)^3}\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x_2})\hat{\Psi}(\mathbf{x_1})
\end{aligned}
$$

$\mathbf{p}^2$-Term durch Laplaceoperator ersetzen und partielle Integration.

$$
= \int \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2\,\mathrm{d}^3p\frac{e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x}_2-\mathbf{p}x_1)}}{(2\pi)^3}\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x_2})\cdot\frac{-\Delta}{2m}\hat{\Psi}(\mathbf{x_1})
$$

Integrieren nach $\mathbf{p}$ ergibt δ-Funktion.

$$
\boxed{T = \int \mathrm{d}^3x\,\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\frac{-\Delta}{2m}\hat{\Psi}(\mathbf{x})}
$$

Bedeutung und Vergleich:

$\hat{\Psi}(\mathbf{x})$:

- Vernichter für Teilchen bei $\mathbf{x}$.
- Definiert auf Fockraum.
- Auch *Quantenfeldoperator* genannt.
- Kann auf beliebige Zustände wirken.

$\psi(x)$:

- 1-Teilchen-QM
- Wellenfunktion $\psi(x) = \langle\mathbf{x}|\psi\rangle$
- Charakterisiert einen bestimmten Zustand $|\psi\rangle$
- Nicht sinnvoll in Mehrteilchentheorie.

Die Ähnlichkeit motivierte den historischen Begriff *zweite Quantisierung.*

Relation: im Fockraum gibt es einen 1-Teilchen-Unterraum und 1-Teilchen-Zustände. Präpariere einen 1-Teilchen-Zustand $|\psi\rangle$. Dann:

$$
\langle 0|\hat{\Psi}(\mathbf{x})|\psi\rangle = \psi(\mathbf{x})
$$

2.5.3 Quantenfeldtheorie und Ortsraum

Betrachte nur freien Hamiltonian

$$H = \int \mathrm{d}^3x\, \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \frac{-\Delta}{2m} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \int \mathrm{d}^3x\, \frac{1}{2m} (\nabla \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}))(\nabla \hat{\Psi}(\mathbf{x}))$$

Umgekehrte Sichtweise: starte von anderem Startpunkt $\longrightarrow$ liefert Fockraum.

Starte mit einer klassischen Feldtheorie mit klassischem Feld $\psi(\mathbf{x}, t)$. (Bekannte klassische Feldtheorien sind die Elektrodynamik und die allgemeine Relativitätstheorie)

Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = i\psi^* \dot{\psi} - \frac{1}{2m} |\nabla \psi|^2$$

Euler-Lagrange-Gleichungen (Subtilität: ψ^* und ψ als unabhängig betrachten)

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x^\mu} \right)}$$

$$\Longleftrightarrow \qquad i\dot{\psi} = \frac{-\Delta}{2m} \psi$$

Die Form ist äquivalent zur Schrödingergleichung, die Bedeutung ist hier aber nur die einer klassischen Feldgleichung.

Kanonisch konjugierter Impuls

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\psi^*$$

Hamiltonian $H = \int \mathrm{d}^3x\, \mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = \pi \cdot \dot{\psi} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m} |\nabla \psi|^2$$

Poissonklammern

$$\{A, B\}_{PK} := \int \left(\frac{\partial A}{\partial \psi(\mathbf{x})} \frac{\partial B}{\partial \pi(\mathbf{x})} - \frac{\partial B}{\partial \psi(\mathbf{x})} \frac{\partial A}{\partial \pi(\mathbf{x})} \right) \mathrm{d}^3x$$

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial \psi(\mathbf{y})} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

$$\{\psi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})\}_{PK} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$
$$\{\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{y})\}_{PK} = 0$$

Quantisierung Rezept: "kanonische Quantisierung"

Ersetze $ih\{\ ,\ \}_{PK} \longrightarrow [\ ,\ ]$. Die kanonische Quantisierung liefert Operatoren $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\pi}(\mathbf{x}) = i\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$, $\hat{\mathcal{H}}$.

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{y})]^{(\pm)} = 0 \qquad [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{y})]^{(\pm)} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$
$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3x\, \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{x}) = \int \mathrm{d}^3x\, \frac{1}{2m} (\nabla \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}))(\nabla \hat{\Psi}(\mathbf{x}))$$

2.5.3. Anhang: Kanonische Quantisierung

Rezept, um eine sinnvolle Quantentheorie zu definieren.

Klassische Theorie	Quantentheorie
ein Paar von "kanonischen Variablen" q, $\dot{q}$ "ein Freiheitsgrad" $L(q,\dot{q}) \to q, p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ kanon. konj. Impuls $\to H(q,p) = p\dot{q} - L$ Bewegungsgleichung $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$ oder äquivalent $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$ oder äquivalent $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A = \{A, H\}_{PK}$ mit $\{A, B\}_{PK} = \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q}$	Forderung: es existieren Operatoren auf dem Zustandsraum mit $\hat{q}$, $\hat{p}$ und $\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p})$ mit $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\{A, B\}_{PK}$

Verallgemeinerung: viele Variablen $q_1(t)$, $q_2(t)$, $q_3(t)$,... bzw. unendlich viele Variablen und auch kontinuierliche Variablen $q_x(t) =: q(t,x)$ ("Feld")

Beispiel: Harmonischer Oszillator

$$L = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - \frac{m\omega^2}{2}q^2$$

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$$

$$H = p\dot{q} - L = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{q}q^2$$

Bewegungsgleichung aus Lagrange

$$m\ddot{q} = -m\omega^2 q$$

Bewegungsgleichung aus Hamilton

$$\dot{p} = -m\omega^2 q \quad , \quad \dot{q} = \frac{p}{m}$$

QT: Operatoren $\hat{q}$, $\hat{p}$ mit $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2$$

Aus dem Kommutator $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ folgt

$$\langle x|p\rangle = N \cdot e^{ipx/\hbar}$$

In Ortsdarstellung folgt

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Warum ist das Rezept sinnvoll? $\to$ Die so erzeugte QT reproduziert die ursprüngliche klassische Theorie im klassischen Limes!

Beispiel:

$$\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = \langle\psi|i[\hat{H}, \hat{p}]|\psi\rangle$$

$$[\hat{H}, \hat{p}] = m\omega^2\hat{q}i\hbar$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle = -m\omega^2\langle\hat{q}\rangle$$

D.h. die QT liefert, dass die Erwartungswerte die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllen!

Ehrenfest-Theorem

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}]$$

(Entspricht der klassischen Bewegungsgleichung mit Poissonklammern)

2.5.4 Quantenfeldtheorie und Impulsraum

Startpunkt: $\mathcal{L} = i\psi^*\psi - \frac{1}{2m}|\nabla\psi|^2$.

Wie kann man die Struktur des Zustandsraums ermitteln?

Ansatz: neue Operatoren $a_\mathbf{p}$:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int \mathrm{d}^3p\, a_\mathbf{p}\, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

simple Rechnung erzeugt Vertauschungsrelationen:

$$[a_\mathbf{p}, a_{\mathbf{p}'}] = 0 \qquad , \qquad [a_\mathbf{p}, a^\dagger_{\mathbf{p}'}] = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Hamiltonian wird zu

$$\hat{H}\int \mathrm{d}^3p\, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a^\dagger_\mathbf{p} a_\mathbf{p}$$

[HIER FEHLT EIN GANZES STÜCK ZUM ERZEUGTEN FOCKRAUM UND ZUR INTERPRETATION DER ZUSTÄNDE - Vorlesung 16.06.2021]

2.5.5 Relativistische Quantenfeldtheorie

Frage: Kausalität? (Hier wurde viel gezeichnet... - Vorlesung 17.06.2021)

Man hat gezeigt, dass bei der Zeitentwicklung eines Orts-EZ zu einem späteren Zeitpunkt das Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit $\neq 0$ an einem raumartig getrennten Ort auftauchen kann $\to$ nicht kausal!

Umformulierung mit Feldoperatoren

$$|\mathbf{x}\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})|0\rangle$$

Heisenberg-Bild:

$$\hat{\Psi}_H(\mathbf{x},t) = e^{i\hat{H}t}\hat{\Psi}(\mathbf{x})e^{-i\hat{H}t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int \mathrm{d}^3p\, a_\mathbf{p}\, e^{-iE_\mathbf{p}t+i\mathbf{px}}$$

$$\hat{\Psi}_H^\dagger(\mathbf{x},t)|0\rangle = e^{i\hat{H}t}\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})|0\rangle = e^{i\hat{H}t}|\mathbf{x}\rangle$$

Kausalität: Übergang von Ereignis am Koordinatenursprung zu Ereignis am Raumzeitpunkt $\mathbf{x}, t$ (Ortseigenzustände mit Zeitentwicklung)

$$\langle \mathbf{x}, t|0,0\rangle = \langle 0|\hat{\Psi}_H(\mathbf{x},t)\hat{\Psi}_H^\dagger(0,0)|0\rangle = \langle 0|[\hat{\Psi}_H(\mathbf{x},t), \hat{\Psi}_H^\dagger(0,0)]|0\rangle$$

Problem:

$$[\hat{\Psi}_H(\mathbf{x},t), \hat{\Psi}_H^\dagger(0,0)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^2}\int \mathrm{d}^3p\, e^{-iE_\mathbf{p}t+i\mathbf{px}} =: \Delta(\mathbf{x},t) \neq 0 \quad \text{(sogar für } |\mathbf{x}| > ct\text{)}$$

Lösungsmöglichkeiten:

- $E_\mathbf{p} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ korrekt relativistisch
- Lorenzinvariantes Integralmaß

  $$\int \mathrm{d}^3p \longrightarrow \int \mathrm{d}^4p\, \delta((p^0)^2 - \mathbf{p}^2 - m^2)\theta(p^0)$$

  Damit ist $\hat{\Psi}_H(\mathbf{x},t)$ ein Skalarfeldoperator (unter Lorentztransformation). Vertauschungsrelation nicht wesentlich geändert, aber $\Delta(\mathbf{x},t)$ ist jetzt lorentzinvariant.

  $$\Delta(x^\mu) = \Delta(\Lambda^\mu{}_\nu x^\nu)$$

- Es muss einen zweiten Teilchentyp geben, welcher die selbe Energie-Impuls-Relation haben sollte (selbe Ruhemasse), aber neue Erzeuger $b_\mathbf{p}^\dagger$, $\hat{\Phi}_H(\mathbf{x},t)$.

  Kausaler Feldoperator:

  $$\begin{aligned}\hat{\Psi}_\text{kausal}(\mathbf{x},t) &= \hat{\Psi}_H(\mathbf{x},t) + \hat{\Psi}_H^\dagger(\mathbf{x},t)\\ &= \int \mathrm{d}^4p\, \delta(p^2 - m^2)\theta(p^0)\left[a_\mathbf{p}e^{-iE_\mathbf{p}t+i\mathbf{px}} + b_\mathbf{p}^\dagger e^{iE_\mathbf{p}t-i\mathbf{px}}\right]\end{aligned}$$

  $$[\hat{\Psi}_\text{kausal}(\mathbf{x},t), \hat{\Psi}_\text{kausal}^\dagger(0,0) = \Delta(x^\mu) \mp \Delta(-x^\mu)$$

  Falls $|\mathbf{x}| > ct$: $-x^\mu$ und x^μ gehen durch Lorentztransformation ineinander über.

  $\Rightarrow$ Aufgrund der Lorentzinvariant von Δ ist der Kommutator für raumartig getrennte Bosonen $= 0$.

Bedeutung

- relativistische QT muss QFT sein, um Kausalität zu ermöglichen
- Antiteilchen müssen existieren mit selber Ruhemasse → Fundamentale Vorhersage → bestätigt!
- Theorie aufgebaut aus kausalen Feldoperatoren, d.h. $a_{\mathbf{p}} \leftrightarrow b^\dagger_{\mathbf{p}}$ tauchen immer gemeinsam auf, z.B. auch im Hamiltonian.

  ⇒ Teilchenvernichtung ↔ Antiteilchenerzeugung

  Teilchenzahl kann nicht konstant bleiben → bestätigt!
- Das Vorzeichen in $[\,,\,]^{(\pm)}$ muss − sein → Bosonen!

  ⇒ fundamentale Vorhersage: Bosonen haben ganzzahligen Spin, Fermionen halbzahligen Spin → bestätigt!

2.5.6 Ausblick auf QFT für Vielteilchensysteme

Lineare Kette mit Orten $q_1, \ldots, q_N$. Bsp. nur nächste-Nachbar-WW.

$$L = \sum_i \frac{m}{2}\dot{q}_i^2 - \sum_i \kappa \frac{(q_{i+i} - q_i)^2}{2}$$

⇒ Vibrationswellen/Schallwellen mit Dispersionsrelation $\omega(k)$

Quantisierung liefert Schallwellenquanten ("Phononen")

Kapitel 3

Streutheorie

3.1 Grundbegriffe

3.1.1 Motivation

Interessante Fragen:

- zeitabhängige Phänomene $\rightarrow$ Prozesse
- Wie findet man $\hat{H}$ aus gegebenen Energie-EW?

Streuung: Ein Teilchen bewegt sich auf ein Potential zu und wird abgelenkt. Die Ablenkung hängt mit der Struktur des Potentials zusammen.

Beispiel:

- elastische Streuung: Natur/innere Struktur der Teilchen ändert sich nicht, E, $|\mathbf{p}|$ bleiben gleich. (z.B. Rutherford, Compton, Bhabha, Rayleigh)
- inelastische Streuung: Innere Struktur der Teilchen kann sich ändern. (z.B. Photoeffekt, $e^- + H^{1s} \rightarrow e^- + H^{2s}$, $pp \rightarrow pp + \pi^0$)

3.1.2 Übersicht

[Hier gab es einige Zeichnungen]

Wichtige Parameter:

- Streuwahrscheinlichkeit in gewisse Winkel $\rightarrow \frac{\mathrm{d}\sigma(\theta,\varphi)}{\mathrm{d}\Omega}$
- Größe des Streuteilchens / “Ausdehnung” des Potentials $\rightarrow$ de-Broglie-Wellenlänge $|\mathbf{p}| = \frac{h}{\lambda} \leftrightarrow$ Reichweite des Potentials.

  Falls $\lambda \ll$ Reichweite $\Rightarrow$ innere Struktur des Potentials auflösbar, sonst sehr einfache Winkelverteilung
- Stärke des Potentials $\rightarrow$ falls $|V| \ll E$, evtl “Taylorentwicklung” in V möglich

Themenübersicht

- Allgemeine Formulierung:

  S- T-Matrix, $\langle\sim$ freie Teilchen für $t \to \infty | \sim$ freie Teilchen bei $t \to -\infty, p_i\rangle$

  Relation S-Matrix $\leftrightarrow$ Wirkungsquerschnitt

  optisches Theorem

  exakte Gleichungen: Lippmann-Schwinger-Gleichung, Greensche Funktionen $\to$ Näherungen

  Näherungen: zeitabhängige Störungstheorie ($\to$ Feynmandiagramme der Teilchenphysik)

- nichtrelativistische elastische Streuung an Potential $V(\mathbf{x})$

  Spezialfall, in obigem enthalten

  Streuwelle $\sim f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$

  Relation $f \leftrightarrow$ Wirkungsquerschnitt

  Störungstheorie für kleines $V \to$ Borusche Näherung

  Partialwellenentwicklung $\to$ insbesondere für kleine Reichweite

- (Themenreihenfolge von unten nach oben)

3.1.3 Grundstruktur der 3-dimensionalen Streuung (nichtrelativisch, elastisch)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Annahme: $|\mathbf{x}| \cdot V(\mathbf{x}) \longrightarrow 0$ für $|\mathbf{x}| \to \infty$.

Suche Lösung $\psi(\mathbf{x},t)$ für einfallenden Zustand $E, \mathbf{p}$.

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad , \qquad E = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} > 0$$

Vgl. 1D Potentialstufe $V(x) \sim \Theta(a-|x|)$: Einfallende Welle resultiert in einer reflektierten und transmittierten Welle mit Koeffizienten r und t.

$$\psi(x) = \begin{cases} \text{links} & e^{ipx} + re^{-ipx} \\ \text{rechts} & te^{ipx} \\ \text{mitte} & \text{irgendwas} \end{cases}$$

Ansatz

- einlaufend: $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$
- auslaufend: $f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$

$$\psi_{\text{gesamt}} \cong e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

Der Ansatz löst die Schrödingergleichung für $x \to \infty$.

Beweis:

$$\hat{H}\psi = \left[\frac{\hbar^2}{2m}(-i\nabla)^2 + V(\mathbf{x})\right]\psi = E\psi = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\psi$$

$$\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m}(-\Delta - \mathbf{k}^2)\psi(\mathbf{x}) = -V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$$

$x \to \infty$:

$$(\Delta + \mathbf{k}^2)\Psi(\mathbf{x}) = 0$$

Das gilt trivialerweise für die einfallende Welle.

Gestreute Welle (Längere Rechnung→ schreibe Δ in Kugelkoordinaten)

$$\Delta\psi_{\text{streu}} \overset{r\to\infty}{=} (ik)^2 f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} + \mathcal{O}(r^{-2}) = -k^2\psi_{\text{streu}}$$

Damit haben wir die asymptotische Lösung durch einlaufendes ϕ und auslaufende Kugelwelle bestimmt, die interessante Größe ist die *Streuamplitude* $f(\theta,\varphi)$.

Messbare Stromdichten Gegeben sei ein Teilchenstrahl mit einer gegebenen Anzahl an Teilchen pro Zeit pro Fläche. $:= |\mathbf{j}_{\text{ein}}|$ (Einlaufende Stromdichte)

Nach Streuung betrachten wir Teilchen in einem infinitesimalen Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ und zählen darin die Teilchen pro Zeit. $:= dI_{\text{aus}}$ (auslaufender Strom)

Das Verhältnis der beiden Größen wird als *differenzieller Wirkungsquerschnitt* $\mathrm{d}\sigma$ definiert:

$$\mathrm{d}\sigma \cdot |\mathbf{j}_{\text{ein}}| = \mathrm{d}I_{\text{aus}}$$

und

$$\mathrm{d}I_{\text{aus}} = |\mathbf{j}_{\text{streu}}| \cdot r^2 \mathrm{d}\Omega$$

Konkret mit obiger Streulösung:

$$\mathbf{j}_{\text{ein}} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \qquad \mathbf{j}_{\text{aus}} = \frac{\hbar k \mathbf{e}_r}{m}\frac{1}{r^2} \cdot |f(\theta,\phi)|^2 + \mathcal{O}(r^{-3})$$

Damit:

$$\boxed{\mathrm{d}\sigma = |f(\theta,\varphi)|^2 \,\mathrm{d}\Omega}$$

3.2 Detail-Analyse der Potentialstreuung

3.2.1 Differentialgleichung, Greenfunktion, Integralgleichung

Gewünscht: $\hat{H}\psi_{\mathbf{k}} = E\psi_{\mathbf{k}}$, $E = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}$

$$(\Delta + \mathbf{k}^2)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \qquad \text{mit} \qquad v(\mathbf{x}) := \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{x})$$

Außerdem gewünscht ist die Randbedingung

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \cong e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{r}$$

Greensche-Funktion obigen Form der Schrödingergleichung:

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{x}) = \delta^{(3)}(\mathbf{x}) \qquad \text{mit dem “Yukawapotential”} \qquad G(\mathbf{x}) = -\frac{e^{ik|\mathbf{x}|}}{4\pi|\mathbf{x}|}$$

Damit lässt sich die Schrödingergleichung zu einer Integralgleichung umformen:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \int \mathrm{d}^3x'\, G(\mathbf{x}-\mathbf{x}')v(\mathbf{x}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')$$

Bemerkungen:

- Das ist eine Integralgleichung für $\psi_{\mathbf{k}}$ (immer noch nichttrivial)
- Ist äquivalent zur Schrödingergleichung (Beweis durch Einsetzen)
- Randbedingung ist auch erfüllt:

  Ebene Welle steht schon da, das Integral werten wir für $|\mathbf{x}| \gg$ Reichweite des Potentials, $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$ aus:

$$|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| = |\mathbf{x}|(1 - \mathbf{e}_x \cdot \frac{\mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|} + ...) \overset{r\to\infty}{=} |\mathbf{x}| - \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{x}'$$

$$\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \cong \frac{e^{ikx}e^{-ik'x'}}{x} \qquad \text{mit} \qquad k' = \mathbf{e}'_x \cdot \mathbf{k}$$

  Damit

$$\psi_k(\mathbf{x}) \cong e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} \cdot \underbrace{\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\int \mathrm{d}^3x'\, e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{x}'}v(\mathbf{x}')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')}_{=f(\mathbf{e}_{\mathbf{k}'})=f(\theta,\varphi)}$$

3.2.2 Bornsche Näherung

Näherung für schwache Potentiale, V="klein"

$$\psi_{\mathbf{kx}} = \phi_{\mathbf{kx}} + \int_{x'} G_{xx'}v_{x'}\psi_{\mathbf{k}x'}$$

Variablen umbenennen:

$$\psi_{\mathbf{kx}'} = \phi_{\mathbf{kx}'} + \int_{x''} G_{x'x''}v_{x''}\psi_{\mathbf{k}x''}$$

Einsetzen der zweiten Gleichung in das erste Integral:

$$\psi_{\mathbf{kx}} = \phi_{\mathbf{kx}} + \int_{x'} G_{xx'}v_{x'}\phi_{\mathbf{k}x'} + \int_{x'}\int_{x''} G_{xx'}v_{x'}G_{x'x''}v_{x''}\psi_{\mathbf{k}x''}$$

Die ersten beiden Terme sind bekannt, der letzte enthält noch ψ. Durch Iteration dieses Verfahrens verschiebt sich der unbekannte Term weiter nach hinten. Es entsteht eine Potenzreihe in $v(\mathbf{x})$.

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \psi^{(1)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + ...$$

Für alle Ordnungen gibt es eine explizite Form. Oft reichen wenige Ordnungen aus.

Allerdings: es ist nicht klar, ob $\psi_{\mathbf{k}}$ als Potenzreihe darstellbar bzw. ob die Potenzreihe konvergent ist.

Ergebnis für Streuamplitude

$$f = f^{(1)} + f^{(2)} + ...$$

$$f^{(n)} = -\frac{m}{2\pi}\int \mathrm{d}^3x' e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}V(\mathbf{x}')\psi^{(n-1)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')$$

Besonders interessant: 1. Bornsche Näherung

$$f^{(1)} = -\frac{m}{2\pi} \int \mathrm{d}^3x' \, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{x}'} V(\mathbf{x})$$

Die Streuamplitude ergibt sich aus der Fouriertransformation des Potentials:

$$\begin{aligned} V(\boldsymbol{x}) &= \int \frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^3} e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{x}} \tilde{V}(\boldsymbol{q}) \\ V(\boldsymbol{q}) &= \int \mathrm{d}^3x e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{x}} \tilde{V}(\boldsymbol{x}) \\ f^{(1)}(\boldsymbol{e}_k') &= -\frac{m}{2\pi} \tilde{V}(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}) \end{aligned}$$

Beispiele:

	V	DGl	$\tilde{V}$
Coulomb	$\frac{1}{4\pi r}$	$\Delta V = -\delta^3$	$\frac{1}{\boldsymbol{q}^2}$
Yukawa	$\frac{e^{-Mr}}{4\pi r}$	$(\Delta - M^2)V = -\delta^3$	$\frac{1}{\boldsymbol{q}^2+M^2}$
Delta	$\delta^3(\boldsymbol{x})$		1
Ladungsvert.	$\int \mathrm{d}^3x \frac{\rho(\boldsymbol{x})}{4\pi\lvert\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\rvert}$	$\Delta V = -\rho$	$\frac{\tilde{\rho}}{\boldsymbol{q}^2}$

3.3 Mathematische Methoden - Funktionen in drei oder weniger dimensionaler Physik

3.3.1 Komplexe und reelle Analysis

Funktionenräume

Besonders interessant sind die p Normen und L^p Räume

$$\begin{aligned} \|f\|_p &:= (\int |f(x)|^p \mathrm{d}x)^{1/p} \\ L^p &:= \left\{ f \middle| \, \|f\|_p < \infty \right\} \end{aligned}$$

mit gewissen Definitionsbereichen.

Interessant:

$$\begin{aligned} &L^1 && \int |f(x)| \mathrm{d}x < \infty \\ &L^2 && \int |f(x)|^2 \mathrm{d}x < \infty \end{aligned}$$

Distributionen

Die Distributionen $\delta(x), \theta(x)$, etc. als Element aus dem Dualraum der Testfunktionen $f \mapsto D(f) =$ "$\int \mathrm{d}x D(x) f(x)''$. Eine Testfunktion ist nur in einem kompakten Bereich ungleich 0 und ∞ oft differenzierbar.

Fourier Transformation

$$f \in L^1 \implies \tilde{f}(k) := \int \mathrm{d}x e^{-ikx} f(x) \text{ existiert } \forall k$$

Es sind $\tilde{f} \in L^1$ oder $\tilde{f} \notin L^1$ möglich. Wenn $f, \tilde{f} \in L^1$ gilt $f(x) = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}k e^{+ikx}\tilde{f}(k)$ fast überall.

Für quadratintegrable Funktionen ist die Fouriertransformation nicht unbedingt konvergent. Es gilt das **Planchorel Theorem** nach dem sich die Fouriertrasformation als Abbildung $f \in L^2 \mapsto \tilde{f} \in L^2$ mit

- falls $f \in L^2$ **und** $f \in L^1$ enspricht die Fouriertransformation $\tilde{f}(k) = \int \mathrm{d}x e^{-ikx} f(x)$
- $\tilde{f}$ ist aber sonst auch definiert, mit selber Schreibweise und $\|f\|_2 = \left\| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f} \right\|_2$
- Es gilt die Verallgemeinerung des Inversionstheorems

Die Anwendung in der Quantenmehanik ist mit der Wellenfunktion $\Psi \in L^2$ im Hilbertraum der Quantenmechanik L^2 und den entsprechenden Fouriertransformationen

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}(p) &= \int \mathrm{d}x e^{-ipx}\Psi(x) \\
\Psi(x) &= \int \mathrm{d}p e^{ipx}\tilde{\Psi}(p)
\end{aligned}$$

Für Distributionen ist die Fouriertransformation über die Testfunktionen definiert.

Residuensatz für komplexe Analysis

Sei f holomorph in einem Gebiet G, bis auf Pole an Punkten $\{z_n\}$ (haben keinen Häufungswert in G)

$$\int_{\text{Geschl. Weg} T \text{in} G} f(z)\mathrm{d}z = 2\pi i \sum_{z_n} \mathrm{ind}_T(z_n)\mathrm{Res}(f; z_n)$$

Eine wichtige, typische Anwendung ist die Integration im Reellen.

Beispiel

Herleitung der Fouriertransformation der Greenfunktion

$$-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r} = \lim_{\varepsilon \to 0_+} \int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{qx}}}{k^2 - q^2 + i\varepsilon}$$

Wir beginnen mit $\mathbf{qx} = qr\cos\theta$ und finden

$$\begin{aligned}
\int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{qx}}}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} &= \int \frac{q^2 \mathrm{d}q \mathrm{d}\cos\theta \mathrm{d}\phi}{(2\pi)^3} \frac{e^{iqr\cos\theta}}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} \\
&= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{q^2 \mathrm{d}q}{k^2 - q^2 + i\epsilon} \frac{1}{iqr} \left(e^{iqr} - e^{-iqr}\right) \\
&= \frac{1}{i(2\pi)^2 r} \int_0^\infty \frac{q \mathrm{d}q}{k^2 - q^2 + i\epsilon} \left(e^{iqr} - e^{-iqr}\right) \\
&= \frac{1}{i(2\pi)^2 r} \int_{-\infty}^\infty \frac{q \mathrm{d}q}{k^2 - q^2 + i\epsilon} e^{iqr}
\end{aligned}$$

3.3.2 dreidimensionale Funktionen, Kugelkoordinaten

In Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\partial_r r^2 \partial_r - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} = \frac{1}{r}\partial_r^2 r - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2}$$

Kugelflächenfunktionen dienen zur Beschreibung von Funktionen $f(\theta, \phi)$ auf Kugeloberflächen. Beispielsweise kann die Temperaturverteilung gut durch Kugelflächenfunktionen mit $l = 1$ oder $l = 2$ oder die Kosmische Hintergrundstrahlung mit $l \approx 200$ modelliert werden. Die Entwicklung ist

$$f(\theta, \phi) = \sum_{lm} c_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Es gilt $Y_{lm} = e^{im\phi} P_l^{|m|}(\cos\theta)$ mit den Legendrepolynomen $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l (x^2-1)^l$. Die Normierung ist dabei $\int_{-1}^{1} P_l(x) P_{l'}(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$.

Aus der **Freien Schrödingergleichung** $(k^2 + \Delta)\Psi = 0$ folgt mit $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$

$$\frac{1}{r}\partial_r^2 r R + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R = 0$$

Wir verwenden $kr = \rho$, $\partial_r^2 = \partial_\rho^2 k^2$, $R(r) = \xi(kr) = \xi(\rho)$ woraus die sphärische Bessel-Differentialgleichung folgt

$$\frac{1}{\rho}\partial_\rho^2 \rho \xi + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\chi = 0$$

Die Lösung sind die

$\xi(\rho) = j_l(\rho)$	sphärischen Besselfunktionen
$\xi(\rho) = n_l(\rho)$	sphärischen Neumannfunktionen, nicht regulär für $\rho \to 0$

In der asymptotischen Form ($\rho \to \infty$) vernachlässigen wir $l(l+1)/\rho^2$ und erhalten

$$j_l(\rho) = \frac{\sin(\rho - l\pi/2)}{\rho} \qquad \text{allgemein}$$

$$j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)^l \frac{\sin\rho}{\rho} \qquad \text{exakt}$$

Damit ergibt sich die allgemeine reguläre Lösung der freien Schrödingergleichung

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sum_{lm} c_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Beispiel: ebene Welle

$$e^{i\mathbf{kx}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

3.4 Partialwellenmethode, Streuphasen

3.4.1 Partialwellenentwicklung

Nun: Zentralpotential $V = V(r) \implies f(\theta, \phi) = f(\theta)$

Schrödingergleichung: $H\psi = E\psi$, $E = \hbar^2 k^2/2m > 0$ bzw. $(\Delta + k^2)\psi = v(r)\psi$ mit $v(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$.

Randbedingungen: $\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{kx}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$.

Ansatz: Entwicklung durch Y_{lm} aber nur $m = 0$ trägt bei.

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_l \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos\theta)$$
$$f(\theta) = \sum_l b_l P_l$$

Schrödingergleichung damit $\partial_r^2 u_l + k^2 u_l - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l = v(r) u_l$ bzw. mit dem effektiven Potential $v_{\text{eff}} = v(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}$

$$(\partial_r^2 + k^2) u_l(r) = v_{\text{eff}}(r) u_l(r)$$

Allgemeine Lösung für $r \to \infty$ mit $v_{\text{eff}} \approx 0$ (kleine Reichweite) ist mir $u_l = \sin kr$ oder $u_l = \cos kr$ über die Besselfunktionen

$$u_l(r) = c_l \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)$$

mit der Streuphase δ_l.

Zur Berechnung:

- explizite Lösung der Radialgleichung gegeben
- j_l und eventuell u_l tauchen Auf
- Randbedingungen einsetzen
- Lösung eindeutig bis auf Normierung
- Kann asymptotisches Verhalten auswerten und mit $Aj_l + Bu_l \leftrightarrow \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)$ vergleichen.

Vergleich / Auswertung der Randbedingungen:

Die allgemeine Lösung war

$$\begin{aligned}
\psi &= \sum c_l \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)}{r} P_l(\cos\theta) \\
&= \sum \frac{1}{r}\left(\frac{c_l}{2i} e^{ikr} e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{i\delta} - \frac{c_l}{2i} e^{-ikr} e^{il\frac{\pi}{2}} e^{-i\delta}\right) P_l(\cos\theta)
\end{aligned}$$

Wir haben zusätzlich gefordert

$$\begin{aligned}
\psi &= e^{i\mathbf{kx}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \\
&= \sum \frac{1}{r}\left(\left[\frac{2l+1}{2ik} + b_l\right] e^{ikr} - e^{-ikr}(-1)^l \frac{2l+1}{2ik}\right) P_l(\cos\theta)
\end{aligned}$$

Ein Koeffizientenvergleich liefert

$$
\begin{aligned}
c_l &= 2i(-1)^l e^{-il\frac{\pi}{2}} e^{i\delta_l} \frac{2l+1}{2ik} = e^{il\frac{\pi}{2}} e^{i\delta_l} \frac{2l+1}{k} \\
b_l &= \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l
\end{aligned}
$$

Zusammenfassung

Falls δ_l bekannt gilt für $r \to \infty$:

$$
\begin{aligned}
\psi(r,\theta,\phi) &= \sum_l \frac{2l+1}{2k} \left(\left[-i + 2e^{i\delta_l} \sin\delta_l \right] \frac{e^{ikr}}{r} + i(-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r} \right) P_l(\cos\theta) \\
e^{i\mathbf{kx}} &= \sum_l \frac{2l+1}{2k} \left(-i \frac{e^{ikr}}{r} + i(-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r} \right) P_l(\cos\theta) \\
f(\theta) &= \sum_l \frac{2l+1}{2k} 2e^{i\delta_l} \sin\delta_l \frac{e^{ikr}}{r} P_l(\cos\theta)
\end{aligned}
$$

3.4.2 Optisches Theorem und Wirkungsquerschnitt

$$
\begin{aligned}
\text{Differentieller Wirkungsquerschnitt} \quad & \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Sigma} = |f(\theta)|^2 = \sum_{ll'} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{k^2} e^{i\delta_l - i\delta_{l'}} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l P_{l'} \\
\text{Totaler Wirkungsquerschnitt} \quad & \sigma = \int \mathrm{d}\sigma = \int \mathrm{d}\Sigma |f(\theta)|^2 = 2\pi \int_{-1}^{1} \mathrm{d}\cos\theta |f(\theta)|^2 \\
& \quad = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) 2\sin^2\delta_l
\end{aligned}
$$

mit der Orthogonalität und Normalisierung der Legendrepolynome. Aufschlüsselung in $\sigma = \sum_l \sigma_l$ mit $\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \leq \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)$ (Unitaritätsschranke).

Nutzen:

- falls δ_l bekannt $\implies \sigma, \mathrm{d}\sigma$ einfach erhaltbar
- δ_l-Bestimmung = Hauptarbeit
- oft ausreichend: nur kleine l betrachten, z.B. nur $l = 0$ (“s-Wellenstreuung”)
- Ungleichung liefert absolute Obergrenze an σ_l (kann eventuell durch Bornsche Näherung verletzt sein)

Optisches Theorem

Wir erinnern uns dass $P_l(1) = 1$ und damit

$$
\begin{aligned}
f(\theta = 0) &= \sum_l \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l \\
\implies \sigma &= \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f(\theta = 0)
\end{aligned}
$$

- Relation Wahrscheinlichkeit $\leftrightarrow$ Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude

- QM Wahrscheinlichkeit $\leftrightarrow$ Wahrscheinlichkeitsamplitude
- Interpretation: Teilchenzahlerhaltung

$$e^{i\mathbf{kx}} \overset{\text{nach Streuung}}{\Longrightarrow} e^{i\mathbf{kx}} + f\frac{e^{ikr}}{r}$$

Gestreuter Anteil muss aus der Vorwärtsrichtung verschwinden. In $\theta = 0$-Richtung muss destruktive Interferenz stattfinden. Das Ausmaß ist durch das optische Theorem gegeben.

3.4.3 Kleine Reichweite, kleine Energie

Streuung bei niedrigen Energien $k \to 0, kR_0 \ll 1$ Ansatz für Radialgleichung: $(\partial_r^2 + k^2)u(r) = v_{\text{eff}}(r)u(r)$ für $l = 0$, $v_{\text{eff}} = v$.

1. Lösen innen: $r < R_0$ mit $u_{\text{in}}(0) = 0 \implies u_{\text{in}}$ eindeutig
2. Allgemeine Lösung außen $r > R_0$, $v(r) > 0$:

$$\begin{aligned} u_a(r) &= Akrj_0(kr) + Bkrn_0(kr) \\ &= A\sin kr + B\cos kr \\ &= C\sin(kr+\delta_0) = C\sin kr\cos\delta_0 + C\cos kr\sin\delta_0 \end{aligned}$$

3. Anschlussbedingung bei $r = R_0$

$$\begin{aligned} \Delta_0 := \frac{u_{\text{in}'(R_0)}}{u_{\text{in}}} &\overset{!}{=} \frac{u_a'(R_0)}{u_a(R_0)} \\ &= k\frac{\cos kR_0\cos\delta_0 - \sin kR_0\sin\delta_0}{\sin kR_0\cos\delta_0 + \cos kR_0\sin\delta_0} \end{aligned}$$

ergeben:

$$\tan\delta_0 = \frac{k\cos kR_0 - \sin kR_0\Delta_0}{k\sin kR_0 + \cos kR_0\Delta_0}$$

Üblicherweise ergibt sich $\tan\delta_0 = -a_0 k$ für $k \to 0$ mit der Streulänge a_0. Für $l = 0$ folgt damit

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = 4\pi a_0^2$$

3.4.4 Kurzzusammenfassung Partialwellenmethode und Ergänzungen

$$\Psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{kx}} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

Zentralpotential: $\mathbf{L}^2$ und L_z sind erhalten. Entsprechend kann das Problem in einzelne l zerlegt werden.

Wir betrachten immer ein festes l:

$$\begin{aligned} &\text{einlaufend} && (e^{i\mathbf{kx}})_{l,|\mathbf{x}|\to\infty} \approx \left(A_l^{(0)}\frac{e^{-ikr}}{r} + B_l^{(0)}\frac{e^{ikr}}{r}\right)P_l(\cos\theta) \\ &\text{komplett} && \Psi_l \approx \left(A_l\frac{e^{-ikr}}{r} + B_l\frac{e^{ikr}}{r}\right)P_l(\cos\theta) \\ & && f_l = b_l P_l(\cos\theta) \end{aligned}$$

Interpretation:

- Ebene Welle = Ein- und auslaufende Kugelwelle
- Teilchenzahlerhaltung

$$\begin{aligned} |A_l^{(0)}| &= |B_l^{(0)}| \\ A_l^{(0)} &= -(-1)^l B_l^{(0)} \end{aligned}$$

- Physikalische Randbedingung: Nur die auslaufende Kugelwelle ändert sich

$$\begin{aligned} A_l^{(0)} &= A_l \\ B_l^{(0)} &\neq B_l \end{aligned}$$

  Teilchenzahlerhaltung

$$|B_l^{(0)}| = |B_l|$$

- Ansatz: $B_l = B_l^{(0)} + b_l$

$$\begin{aligned} B_l &= B_l^{(0)} + e^{2i\delta_l} \\ b_l &= B_l^{(0)}(e^{2i\delta_l} - 1) = B_l^{(0)} 2i \sin\delta_l e^{i\delta_l} \\ &= \frac{2l+1}{k} \sin\delta_l e^{i\delta_l} \end{aligned}$$

- Noch nicht bewiesen ist, warum die Steuphase δ_l reell ist. Grund: Reelles Potential führt keine Absorption ein.

3.5 Mathematische Methoden - Funktionalanalysis

Hilbertraum $\mathcal{H} = \{|\psi\rangle\}$

- Vektorraum auf $\mathbb{C}$
- Positiv definites Skalarprodukt

$$\langle\psi|\phi\rangle; \langle\phi|\phi\rangle = \||\phi\rangle\|^2 \geq 0$$

- Vollständig (jede Cauchyfolge konvergiert)
- Separabel $\exists$ abzählbare Menge $\{|\psi_n\rangle\}$ dicht in $\mathcal{H}$

Konvergenz:

- Starke Konvergenz:

$$\begin{aligned} (|\psi_n\rangle) &\overset{\text{stark}}{\to} |\psi\rangle \\ &\iff \forall\epsilon\exists n_0 : \||\psi\rangle - |\psi_n\rangle\| \leq \epsilon \forall n > n_0 \end{aligned}$$

- Schwache Konvergenz:

$$\begin{aligned} (|\psi_n\rangle) &\overset{\text{schwach}}{\to} |\psi\rangle \\ &\iff \forall|\phi\rangle \in \mathcal{H} : \langle\phi|\psi_n\rangle \to \langle\phi|\psi_n\rangle \end{aligned}$$

- Beispiel: Wellenberg konvergiert schwach gegen 0, aber nicht stark

Operatoren:

- Beschränkter Operator $A \iff \exists M > 0 \, \|A|\psi\rangle\| \leq M \, \||\psi\rangle\| \, \forall|\psi\rangle$. In der QM gibt es oft unbeschränkte Operatoren wie $x, p, H, \ldots$. Diese sind oft nur auf einer Teilmenge $D(A) \subset \mathcal{H}$ definiert.
- Hermitescher Operator $A \iff \forall|\phi\rangle, |\psi\rangle \in D(A) : \langle A\phi|\psi\rangle = \langle\phi|A\psi\rangle$
- Selbstadjungierter Operator $A \iff A$ hermitesch und $D(A) = D(A^\dagger)$

Spektraltheorem: A selbstadjungiert bedeutet, dass man ihn in

$$\begin{aligned}
A &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \mathrm{d}E(\lambda) \\
\mathrm{d}E(\lambda) &= \text{operatorwertiges Integralmaß} \\
E(\lambda) &= \int_{-\infty}^{\lambda} \mathrm{d}E(\lambda') = \text{Projektionsoperator} \\
E(+\infty) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E(\lambda') = \mathbf{1}
\end{aligned}$$

zerlegen können. In der Dirac-Notation ergibt sich entsprechend (bzw. ist gerechtfertigt)

$$\begin{aligned}
A &= \int \lambda|\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|\mathrm{d}\lambda \\
&= \sum \lambda|\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|
\end{aligned}$$

Spektrum $\sigma(A)$ Wertebereich der λ mit $\mathrm{d}E(\lambda) \neq 0$, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \to \int_{\sigma(A)}$$

reicht aus.

- diskrete Eigenwerte bzw. diskretes Spektrum: Integral $\to$ Summe, wobei $|\psi_\lambda\rangle$ normierbare Eigenvektoren $\in \mathcal{H}$ sind.
- kontinuierliche Eigenwerte bzw. kontinuierliches Spektrum: Integral nötig, wobei $|\psi_\lambda\rangle$ nicht normierbare Eigenvektoren sind. Nun ist $|\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|\mathrm{d}\lambda = \mathrm{d}E(\lambda)$ streng sinnvoll.

Unitäre Operatoren Speziell: $U(t) = e^{iAt}$ wobei A selbstadjungiert ist. Allgemeine Unitaritätsbedingung: $U(t)U^\dagger(t) \overset{\text{nicht selbstverst.}}{=} U^\dagger(t)U(t) = \mathbf{1}$

Wichtige Operatoren für Streuproblem:

- Freie Teilchen: freier Hamiltonian H_0, $D(H_0) \subset \mathcal{H}$, selbstadjungiert, nur kontinuierliches Spektrum (keine Bindungszustände).
- Mit Wechselwirkung: $H = H_0 + V$, $D(H) \subset \mathcal{H}$, selbstadjungiert, evtl. kontinuierliches (Streuzustände mit positiver Energie) und diskretes Spektrum (Bindungszustände). Das Spektrum ist nach unten beschränkt.

Optimal: $D(H) \cap D(H_0)$ dicht in $\mathcal{H}$

Unitäre Operatoren:

$$U_0(t) := e^{-iH_0 t} \quad (t \in \mathbb{R})$$
$$U(t) := e^{-iHt}$$

Resolvente / Greensche Operatoren

$$G_0(z) = (z\mathbf{1} - H_0)^{-1} \quad (z \in \mathbb{C})$$
$$G(z) = (z\mathbf{1} - H)^{-1}$$

definiert $\forall z \notin \sigma(H_0)$ bzw. $z \notin \sigma(H)$ insbesondere für $z = r + i\gamma$ mit $\gamma \neq 0$.

- G, G_0 existieren
- alle Spektralwerte $\propto (r + i\gamma - E)^{-1}$ und damit $0 < |\text{Spektralwert}| \leq \frac{1}{\gamma}$.
- beschränkte, invertierbare Operatoren. operatorwertige, analystische Funktionen von z

3.6 Formell, allgemein Streutheorie

3.6.1 Motivation, Übersicht

Fragen:

- Mathematisch: Existenz von Integralen, saubere Beweise bei z.B. der Integralgleichung $\propto G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$

  $$\int \mathrm{d}^3 x' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}_|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')$$

  Selbst wenn V und ψ quadratintegrabel sind, ist das Integral $\propto \frac{1}{r}$ und das Ergebnis damit im Allgemeinen $\notin L^2$.
- Physikalisch: Wellenpakete mit kleinen Δx_{trans}, Δx_{long} und Δp anstatt von ebenen Wellen
- Physikalisch: Bedeutung des bisherigen $\Psi_{\mathbf{k}}$
- Physikalisch: Weitere mögliche nützliche Relationen zwischen H, V, $\Psi_{\mathbf{k}}$, f usw.
- Physikalisch: Allgemeinere Situationen (Relativistisch/Mehrteilchen?)

3.6.2 In-Zustände und S-Martix

Skizzentranskript: Zwei Teilchenstrahlen treffen aufeinander, Wechselwirkung findet statt, Detektoren messen das Ergebnis.

Beschreibung:

Impulsoperator	$\mathbf{p}$
ohne Ww	$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$
mit Ww	$H = H_0 + V$
freie Impuls-EZe	$\lvert\psi_{\mathbf{k}}\rangle$
	$\mathbf{p}\lvert\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \mathbf{k}\lvert\psi_{\mathbf{k}}\rangle$
	$H_0\lvert\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{\mathbf{k}^2}{2m}\lvert\psi_{\mathbf{k}}\rangle$
freies Wellenpaket	$\lvert\psi_g(t)\rangle = \int \mathrm{d}^3k g(\mathbf{k}) e^{-iE_k t}\lvert\psi_{\mathbf{k}}\rangle$
	$\int \mathrm{d}^3k \lvert g(\mathbf{k})\rvert^2 = 1$

wobei $g(\mathbf{k})$ bei $\mathbf{k} = \mathbf{p}$ einen Peak hat. Die Unschärfe Δp ist klein, im Ortstraum ist die Wellenfunktion bei $\pm\Delta x_{\text{long, trans}}$ lokalisiert.

Forderungen Streuzustände, präpariert von Experimentalphysiker:

Präpariert ist der Zustand $\lvert\psi_g(t)\rangle$ (Schrödingerbild bzgl. H) so, dass Zustand für $t \to -\infty$ wie $\lvert\phi_g(t)\rangle$ aussieht! Mathematisch ist starke Konvergenz

$$\|\lvert\psi_g(t)\rangle - \lvert\phi_g(t)\rangle\| \to 0 (t \to -\infty)$$

Äquivalent:

$$\begin{aligned} \lvert\psi_g(t)\rangle &= U(t)\lvert\psi_g(0)\rangle & \qquad \lvert\psi_g(0)\rangle &:= \lvert\psi_g^H\rangle \\ \lvert\phi_g(t)\rangle &= U_0(t)\lvert\phi_g(0)\rangle & \qquad \lvert\phi_g(0)\rangle &:= \lvert\phi_g^H\rangle \end{aligned}$$

und damit die Konvergenzbedingung:

$$\begin{aligned} &\left\|U(t)\lvert\psi_g^H\rangle - U_0(t)\lvert\phi_g^H\rangle\right\| \to 0 \\ \iff &\left\|U_0^\dagger(t)U(t)\lvert\psi_g^H\rangle - \lvert\phi_g^H\rangle\right\| \to 0 \\ &\iff \lvert\psi_g^I(t)\rangle \to \lvert\phi_g^H\rangle \end{aligned}$$

Die obige Gleichung beschreibt einen asymptotisch ($t \to \infty$) freien Zustand, Zeistentwicklung “stoppt”, Wechselwirkung irrelevant.

Entwicklung im Heisenberg-Bild

$$\lvert\psi_g^H\rangle = \int \mathrm{d}^3k g(\mathbf{k})\lvert\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle$$

In-Zustände, Definition von $\lvert\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle$.

Bedeutung: $\lvert\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle$ definiert über diese Integrale, abstrahiert von Wellenpaketen $\lvert\psi_g^H\rangle$.

Heisenberg-Bild: zeitunabhängig, beschreiben System zu jeder Zeit (“Filmrolle”). Zustand hat die Eigenschaft nach Faltung mit $g(\mathbf{k})$ asymptotisch in freie Wellenpakete für $t \to -\infty$ überzugehen.

Diese $|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle$ sind natürlich keine echten $\mathcal{H}$-Elemente, genausowenig wie $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$, sondern nur die $|\psi_g^H\rangle$. Die Existenz von $|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle$ ist noch nicht streng bewiesen. Aber sie gilt in allen relevanten Theorien, inklusive relativistischer QFT. (obwohl dort das Ww-Bild nicht exisitert).

Out-Zustände: analog $|\psi_g(t)\rangle$ mit

$$|\psi_g(t)\rangle - |\phi_g(t)\rangle \to 0(t \to +\infty)$$
$$|\psi_g^H\rangle = \int \mathrm{d}^3 k g(\mathbf{k}) |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{out}}\rangle$$

Diese Zustände werden von den Detektoren gemessen.

S-Matrix:

$$\begin{aligned}|i\rangle &= \text{präparierte Anfangszustand, asympt. freies Teilchen}(t \to -\infty)\\ &= \int \mathrm{d}^3 k g_i(t) |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle\\ |f\rangle &= \text{Endzustand im Detektor, asympt. freies Teilchen}(t \to +\infty)\\ &= \int \mathrm{d}^3 k g_f(t) |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{out}}\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}S_{fi} &= \text{Wahrscheinlichkeitsamplitude bei Präparation von } |i\rangle \text{ am Ende } |f\rangle \text{ zu messen}\\ &= \langle f|e\rangle\end{aligned}$$

Astraktion von Wellenpaketen:

$$S_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}} = \langle\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}}|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle$$

3.6.3 Existenz der Møller-Operatoren

$$\Omega_\pm := \text{Møller-Operatoren}$$

$$\begin{aligned}U(t) &= e^{-iHt} & |\psi^S(t)\rangle &= U(t)|\psi^H\rangle\\ U_0(t) &= e^{-iH_0 t} & |\psi^I(t)\rangle &= U_0^\dagger(t)|\psi^S(t)\rangle\\ W(t) &= U^\dagger(t)U_0(t) & &\end{aligned}$$

Erhoffe eine “gutartige” Situation: Alle Operatoren existieren und haben einen gemeinsamen Definitionsbereich und

$$\Omega_\pm := \lim_{t\to\mp\infty} W(t)$$

existiert stark. D.h. $\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\lim_{t\to\mp\infty} W(t)|\psi\rangle =: \Omega_\pm|\psi\rangle$$

exisitert.

Theorem (Breuig, Haag, 1963; Kupsch, Sandhas)

Starker Limes existiert, falls $|V(r)| \leq \frac{C}{r^{1+\epsilon}} \forall \epsilon > 0$.

Beweis für einfacheren Fall:

- V sogar quadratintegrabel $\int V^2 r^2 \mathrm{d}r < \infty$.
- Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ sei Gaußsches Wellenpaket

Wellenpaket:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}|\psi\rangle &= e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2}\sigma} = g(\mathbf{k}) \\ \langle \mathbf{x}|\psi\rangle &= \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2}\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = \text{const. } \sigma^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2r}} \end{aligned}$$

Für Limes betrachte "Cauchyfolge", sehr negative $t_2 < t_1 < 0$ und bilde

$$\|W(t_2)|\psi\rangle - W(t_1)|\psi\rangle\| =: \|X\|$$

$$\begin{aligned} X = (W(t_2) - W(t_1))|\psi\rangle &= \left(\int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \frac{\mathrm{d}W(t)}{\mathrm{d}t}\right)|\psi\rangle \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t e^{iHt}(iH - iH_0) e^{-iH_0 t}|\psi\rangle \\ \|X\| &\leq \int_{t_1}^{t_2} \left\| V e^{-iH_0 t}|\psi\rangle \right\| \end{aligned}$$

Wir benötigen wir

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}|e^{-iH_0 t}|\psi\rangle =: \psi^0(t,\mathbf{x}) &= \int \mathrm{d}^3 k \langle \mathbf{x}|\mathbf{k}\rangle\langle \mathbf{k}|e^{-iH_0 t}|\psi\rangle \\ \psi^0(\mathbf{x},t) &= \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2}\sigma + i\mathbf{k}\mathbf{x} - iE_k t} \\ &= \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2}(\sigma + \frac{i}{m}t) i\mathbf{k}\mathbf{x}} \\ &= \text{const. } (\sigma + \frac{i}{m}t)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}(\sigma + \frac{i}{2m}t)^{-1}} \\ |\psi^0(\mathbf{x},t)| &\leq \text{const.}' t^{-\frac{3}{2}} \forall \mathbf{x} \end{aligned}$$

Damit folgt schließlich

$$\implies \left\| V|\psi^0(t)\rangle \right\|^2 = \int \mathrm{d}^3 x V^2(\mathbf{x}) |\psi^0(\mathbf{x},t)|^2 \leq C t^{-3}$$

und

$$\|X\| \leq C|t_1^{-\frac{1}{2}} - t_2^{-\frac{1}{2}}| < C|t_1^{-\frac{1}{2}}|$$

Damit ist $W(t)|\psi\rangle$ eine Cauchyfolge in $\mathcal{H}$ und konvergiert.

3.6.4 Møller, Analyse von Jauch (1958) bzw. Bell (1960)

Oft, z.B. für ein hinreichend schnell fallendes Potential V gelten:

Postulate von Jauch:

- $\lim_{t\to\mp\infty} W(t)|\psi\rangle =: |\psi_\pm\rangle$ existiert im starken Sinne $\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ Entsprechend existieren die Møller Operatoren, die physikalische Idee ist dass $W(t)|\phi_{\mathbf{k}}\rangle \to |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in, out}}\rangle$
- Die $|\psi_+\rangle$ und die $|\psi_-\rangle$ spannen den selben (Teil-)Raum $R = \{|\psi_+\rangle\} = \{|\psi_-\rangle\}$ von $\mathcal{H}$ auf.
- Es gilt: H hat diskretes Spektrum (echte Eigenwerte, Bindungszustände) in Raum $\mathcal{H}_{\text{Bind}}$ und kontinuierliches Spektrum (Streuzustände) in Rest R. Entsprechend ist $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Bind}} \oplus R$, d.h. $|\psi_\pm\rangle$ bilden das gesamte kontinuierliche Spektrum von H.

Møller-Operatoren

$$\begin{aligned} \Omega_\pm :&\mathcal{H} \to R \\ &\Omega_\pm|\psi\rangle = \lim_{t\to\mp\infty} W(t)|\psi\rangle =: |\psi_\pm\rangle \\ \Longrightarrow &\Omega_\pm = \lim_{t\to\mp\infty} W(t)(\text{stark}) \end{aligned}$$

- $\Omega_\pm$ erhält die Norm: $\||\phi_\pm\rangle\| = \lim_{t\to\mp\infty} \|W(t)|\phi\rangle\| = \||\phi\rangle\|$
- $\Omega_\pm$ ist nicht unbedingt unitär: (falls $R \subsetneqq \mathcal{H}$, kann nicht $\Omega_+\Omega_+^\dagger = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$ gelten)
- Stattdessen:

$$\Omega_\pm\Omega_\pm^\dagger = P_R(\text{Projektionsoperator}) \qquad \Omega_\pm^\dagger\Omega_\pm = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$$

Damit ergibt sich der unitäre S-Operator:

$$\boxed{S = \Omega_-^\dagger\Omega_+}$$

$$S^\dagger S = SS^\dagger = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$$

Zusammenhang mit In-Zuständen: Klar $\underbrace{\lim_{t\to\mp\infty} W(t)}_{\Omega_\pm} |\phi_g^H\rangle = |\psi_g^H\rangle$

Abstrahiert von den Wellenpaketen ergibt sich formal (mathematisch durch Faltung mit beliebigen Wellenpaketen)

$$\boxed{\Omega_\pm|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in, out}}\rangle}$$

Die S-Matrix folgt analog

$$\langle\phi_{\mathbf{k}'}|S|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = \langle\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}}|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle = S_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}}$$

Alle Größen sind mathematisch sinnvoll, ihre Existenz ist gesichert.

Intertwining-Eigenschaft, Eigenwerte

$$\underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W(t)}_{\to 0(t\to\mp\infty)} = iHW(t) - iW(t)H_0$$

$$\implies \boxed{H\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0}$$

Damit lassen sich Aussagen über die Spektren der Møller-operatoren finden.

$$\begin{aligned} H_0|\phi_\mathbf{k}\rangle &= E_\mathbf{k}|\phi_\mathbf{k}\rangle \\ \implies H|\psi_\mathbf{k}^{\text{in, out}}\rangle &= E_\mathbf{k}|\psi_\mathbf{k}^{\text{in, out}}\rangle \end{aligned}$$

als kontinuierliches Spektrum von H.

3.6.5 Integralgleichung für Ω, Lippmann-Schwinger Gleichung

Integralgleichung:

$$\begin{aligned} \Omega_+ &= \lim_{\epsilon\to 0_+}\left(\epsilon\int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t}W(t)\mathrm{d}t\right) \\ &= \lim_{\epsilon\to 0_+}\left(\epsilon\int_{-\infty}^0 e^{iHt}e^{-i(H_0+i\epsilon)t}\mathrm{d}t\right) \end{aligned}$$

mit $\Sigma_+^\dagger$ und Σ_- analog.

Die **Lippmann-Schwinger-Gleichung** ergibt sich dann mit

$$|\psi_\mathbf{k}^{\text{in, out}}\rangle = |\phi_\mathbf{k}\rangle + \lim_{\epsilon\to 0_+}\frac{1}{E_k - H_0 \pm i\epsilon}V|\psi_\mathbf{k}^{\text{in, out}}\rangle$$

- Die Integralgleichung folgt streng, falls die Jauch-Postulate gültig sind
- Lippmann-Schwinger-Gleichung ist formal und gilt für die Faltung mit Wellenpaketen

Beweis-Skizze

Wähle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ o.B.d.A. normiert mit Norm = 1.

Frage: $\lim_{\epsilon\to 0+}\left(\underbrace{\epsilon\int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t}W(t)|\psi\rangle\mathrm{d}t - \Sigma_+|\psi\rangle}_{=:X}\right) = 0$?

Mit $\tau = \epsilon t$, $\mathrm{d}\tau = \epsilon\mathrm{d}t$ ergibt sich

$$\begin{aligned} X &= \int_{-\infty}^0 e^\tau W(\frac{\tau}{\epsilon})|\psi\rangle\mathrm{d}\tau - \int_{-\infty}^0 e^\tau\mathrm{d}\tau|\psi_+\rangle \\ &= \int_{-\infty}^0 e^\tau(W(\frac{\tau}{\epsilon})|\psi\rangle - |\psi_+\rangle)\mathrm{d}\tau \\ &= \underbrace{\int_{-\sigma}^0 e^\tau\underbrace{(W(\frac{\tau}{\epsilon})|\psi\rangle - |\psi_+\rangle)}_{\text{Norm}\le 2}\mathrm{d}\tau}_{\text{Norm}\le 2|\sigma|} + \int_{-\infty}^{-\sigma} e^\tau(W(\frac{\tau}{\epsilon})|\psi\rangle - |\psi_+\rangle)\mathrm{d}\tau \end{aligned}$$

Sei $\delta > 0$ beliebig. Dann können wir beide Summanden im zweiten Integral abschätzen. Wähle $\sigma < \frac{\delta}{4}$, dann ist die Norm des linken Integrals $\leq \frac{\delta}{2}$. Nach den Voraussetzungen exisitert ein T, so dass $\|W(t)|\psi\rangle - \psi_+\| \leq \frac{\delta}{4}\ \forall t < -T$. Wählen wir schließlich $\frac{\sigma}{\epsilon} > T$, d.h. $\epsilon < \frac{\sigma}{T} < \frac{\delta}{4T}$ folgt dass die Norm des rechten Integrals $< \frac{\delta}{4}$ ist.

Es gilt also $\forall \epsilon < \frac{\delta}{4\pi} : \|\ldots\| < \delta$, d.h. der Limes ist bewiesen.

Beweisskizze für Lippmann-Schwinger-Gleichung

Integralgleichung auf $|\phi_\mathbf{k}\rangle$ liefert $H_0 = E_k = \frac{k^2}{2m}$.

$$\begin{aligned}
\Omega_+|\phi_\mathbf{k}\rangle &= \lim \epsilon \int_{-\infty}^{0} e^{iHt} e^{-i(E_k+i\epsilon)t} |\phi_\mathbf{k}\rangle \\
&= \lim \epsilon \int_{-\infty}^{0} e^{-i(E_k-H+i\epsilon)t} |\phi_\mathbf{k}\rangle \\
&= \lim \epsilon \left[\frac{1}{-i(E_k - H + i\epsilon)} e^{-i(E_k-H+i\epsilon)t} \right]_{-\infty}^{0} |\phi_\mathbf{k}\rangle \\
&= \lim i\epsilon \frac{1}{-i(E_k - H + i\epsilon)} |\phi_\mathbf{k}\rangle
\end{aligned}$$

Der entstandene Operator entspricht der Resolvente von H.

$$\boxed{\Omega_+|\phi_\mathbf{k}\rangle = \lim i\epsilon G(E_k + i\epsilon)|\phi_\mathbf{k}\rangle}$$

Resolventengleichung:

$$G - G_0 = G_0 V G = G V G_0$$

aus $G_0(G_0^{-1} - G^{-1})G$.

Hier aus $|\phi_\mathbf{k}\rangle$ angewandt:

$$\begin{aligned}
i\epsilon G(E_k + i\epsilon) = i\epsilon G_0(E_k + i\epsilon) + G_0 V i\epsilon G(E_k + i\epsilon) &= \frac{i\epsilon}{E_k + i\epsilon - E_k} + G_0 V i\epsilon G(E_k + i\epsilon) \\
&= \mathbf{1} + G_0 V i\epsilon G(E_k + i\epsilon)
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die oben eingerahmte Gleichung

$$\Omega_+|\phi_\mathbf{k}\rangle = |\phi_\mathbf{k}\rangle + G_0 V i\epsilon G|\phi_\mathbf{k}\rangle = |\phi_\mathbf{k}\rangle + G_0 V \Omega_+ |\phi_\mathbf{k}\rangle$$

mit $\Omega_+|\phi_\mathbf{k}\rangle = |\psi_\mathbf{k}^{\text{in}}\rangle$ folgt

$$|\psi_\mathbf{k}^{\text{in}}\rangle = |\phi_\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_k - H_0 + i\epsilon} V |\psi_\mathbf{k}^{\text{in}}\rangle$$

3.6.6 Lippmann-Schwinger-Gleichung und S-Matrix

Zur Erinnerung:

$$S_{\mathbf{k}\leftarrow\mathbf{k}'} = \langle \psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}} | \psi_\mathbf{k}^{\text{in}} \rangle$$

Aus der LS-Gleichung folgt

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in,out}} = |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G(E_k \pm i\epsilon)V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$$

und damit

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle = |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{out}}\rangle + \underbrace{(G(E_k + i\epsilon) - G(E_k - i\epsilon))}_{\text{Zeitentwicklung von } t=-\infty\ldots\infty} V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$$

Multiplizieren wir von links mit $|\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}}\rangle$ ergibt sich

$$S_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}} = \langle\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}}|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{out}}\rangle + |\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}}\rangle \underbrace{\left(\frac{1}{E_k + i\epsilon - E_{k'}} - \frac{1}{E_k - i\epsilon - E_{k'}}\right)}_{\text{Klammer}} V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$$

$$\text{Klammer} = \frac{-2i\epsilon}{(E_k - E_{k'})^2 + \epsilon^2} \to -2i\pi\delta(E_k - E_{k'})S_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}} \qquad = \langle\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}}|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{out}}\rangle - 2\pi i\delta(E_k - E_{k'})T_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}}$$

Die neue Größe T beschreibt dabei den interessanten Steuanteil

$$T_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}} = \langle\psi_{\mathbf{k}}^{\text{out}}|V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = \langle\phi_{\mathbf{k}'}|V|\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{in}}\rangle$$

3.6.7 Zusammenfassung mit $f(\theta, \phi)$

Wieder ein hinreichend schnell abfallendes V

Ortsraum:

$$\langle\mathbf{x}|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$$
$$\langle\mathbf{x}|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle = \psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}(\mathbf{x})$$
$$\langle\mathbf{x}|G_0(E_k + i\epsilon)|\mathbf{x}'\rangle = -\frac{2m}{4\pi}\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

Ortsraumdarstellung von $G_0(E_k + i\epsilon)$ ist gerade die auslaufende Kugelwelle aus 3.2 und 3.3!

Umgekehrt $\lim_{\epsilon\to 0_+} G_0(E_k + i\epsilon)$ ist die Operatorversion von $-\frac{2m}{4\pi}\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$.

LS-Gleichung allgemein:

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle = |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + \lim_{\epsilon\to 0_+} G_0(E_k + i\epsilon)V|\phi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle$$
$$\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} - \frac{2m}{4\pi}\int \mathrm{d}^3x' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}V(\mathbf{x}')\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}(\mathbf{x}')$$

Aus dem Vergleich zu 3.2.1 folgt

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi}T_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}}$$

Bornsche Näherung: iteriere LS-Gleichung mit $G_0 \equiv G_0(E_k + i\epsilon)$

$$\begin{aligned}|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle &= |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0V|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle \\ &= |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0VG_0V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0VG_0VG_0V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle + \ldots\end{aligned}$$

Optisches Theorem allgemein $\iff$ Unitarität der S-Matrix.

$$
\begin{aligned}
S^\dagger S &= \mathbf{1} \\
\iff (\mathbf{1} + iT^\dagger)(\mathbf{1} - iT) &= \mathbf{1} \\
\iff -i(T^\dagger - T) &= T^\dagger T
\end{aligned}
$$

mit $S = \mathbf{1} - iT$ wobei $\langle \phi_{\mathbf{k}'} | T | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = 2\pi\delta(E_{k'} - E_k)$.

3.7 Weiteres zur allgemeinen Streutheorie

3.7.1 Formulierung im Ww-Bild

Physikalische Frage:

$$S_{\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}} = \langle \phi^{\text{out}}_{\mathbf{k}'} | \phi^{\text{in}}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}'} | S | \phi_{\mathbf{k}} \rangle$$

Allgemeines Wechselwirkungsbild:

$$
\begin{aligned}
&\text{Schrö.-Bild:} & &|\phi^S(t)\rangle \\
&\text{Heis.-Bild:} & |\phi^H\rangle &= U^\dagger(t)|\phi^S(t)\rangle \\
&\text{Dirac/Ww.-Bild:} & |\phi^I(t)\rangle &= U_0^\dagger(t)|\phi^S(t)\rangle \\
& & &= W^\dagger(t)|\phi^H\rangle
\end{aligned}
$$

Zeitentwicklung im Ww.-Bild:

$$|\psi^I(t_1)\rangle = U_I(t_1, t_0)|\psi^I(t_0)\rangle$$

mit unitärem Operator $U_I(t_1, t_0)$.

Einerseits gilt per Definition

$$
\begin{aligned}
U_I(t_1, t_0) &= W^\dagger(t_1) W(t_0) \\
U_I(t_0, t_0) &= \mathbf{1}
\end{aligned}
$$

Andererseits gilt folgende "Schrödingergleichung":

$$
\begin{aligned}
i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U_I(t, t_0) &= i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(e^{iH_0 t} e^{-iHt} W(t_0)) \\
&= e^{iH_0 t}(-H_0 + H)e^{-iHt} W(t_0) \\
&= e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} \underbrace{e^{iH_0 t} e^{-iHt} W(t_0)}_{U_I}
\end{aligned}
$$

$$\boxed{i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U_I = V(t) U_I(t, t_0)}$$

mit $V_I(t) = e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}$

Zusammenhang mit Streuproblem

$$S_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}} = \langle \phi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}} | \phi_{\mathbf{k}}^{\text{in}} \rangle$$

Schreibe:

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle = W(t_0)|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in},I}(t_0)\rangle$$
$$|\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out}}\rangle = W(t_1)|\psi_{\mathbf{k}'}^{\text{out},I}(t_1)\rangle$$

$$\implies S_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}} = \langle \phi_{\mathbf{k}'}^{\text{out},I}(t_1)|U_I(t_1,t_0)|\phi_{\mathbf{k}}^{\text{in},I}(t_0)\rangle$$

Präparierter Anfangszustand:

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in},I}(t_0)\rangle = W^\dagger(t_0)\Omega_+|\phi_{\mathbf{k}}\rangle \to |\phi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (t \to -\infty)$$