

# Skript QT2

19. Juli 2021

# Inhaltsverzeichnis

<b>0</b>	<b>Grundstruktur der Quantenmechanik</b>	<b>4</b>
0.1	Postulate . . . . .	4
0.2	Ortsraum, Teilchen in 1D . . . . .	4
<b>1</b>	<b>Relativistische Quantenmechanik</b>	<b>5</b>
1.1	Kontinuierliche Symmetrien (Bsp. Rotationsinvarianz) . . . . .	5
1.1.1	Drehungen in 3D . . . . .	5
1.1.2	Darstellungen . . . . .	5
1.1.3	Drehungen in der Quantenmechanik . . . . .	6
1.2	Lorentzinvarianz . . . . .	7
1.2.1	Lorentzgruppe . . . . .	7
1.2.2	Darstellungen . . . . .	7
1.2.3	Diracspinoren und $\gamma$ -Matrizen . . . . .	8
1.3	Überblick über relativistische Wellengleichungen . . . . .	8
1.3.1	Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	9
1.3.2	Dirac-Gleichung . . . . .	10
1.4	Physik und Lösungen der Diracgleichung . . . . .	11
1.4.1	Freie Lösungen, Impuls-/Spin-Eigenzustände . . . . .	11
1.4.2	Mehr zum Drehimpuls . . . . .	12
1.4.3	Kopplung ans elektromagnetische Feld . . . . .	13
1.4.4	Nichtrelativistischer Limes . . . . .	13
1.4.5	Weitere Konsequenzen: Spin-Bahn-Kopplung . . . . .	15
<b>2</b>	<b>Ununterscheidbare Teilchen - Bosonen und Fermionen</b>	<b>19</b>
2.1	Unterscheidbare Teilchen . . . . .	19
2.1.1	Zustände . . . . .	19
2.1.2	Observablen/Operatoren . . . . .	20

2.2	Identische/Ununterscheidbare Teilchen . . . . .	20
2.2.1	Prinzipien . . . . .	20
2.2.2	Zustände . . . . .	21
2.3	Einfache Anwendungen . . . . .	23
2.3.1	Grund- und angeregte Zustände . . . . .	23
2.3.2	Direkter Prozess vs. Austauschterm . . . . .	24
2.3.3	Wasserstoffmolekül $H_2$ . . . . .	25
2.4	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren . . . . .	27
2.4.1	Fock-Raum . . . . .	27
2.4.2	Erzeuger/Vernichter für Bosonen . . . . .	27
2.4.3	Erzeuger/Vernichter für Fermionen . . . . .	28
2.4.4	Besetzungszahldarstellung . . . . .	29
2.4.5	Formulierung von Observablen . . . . .	30
2.4.6	Kurz-Überblick über Anwendungen . . . . .	32
2.5	Ortsraum, Impulsraum, QFT (Spin=0) . . . . .	33
2.5.1	Zur Interpretation der letzten Ergebnisse . . . . .	33
2.5.2	Ortsraum . . . . .	33
2.5.3	Quantenfeldtheorie und Ortsraum . . . . .	34
2.5.4	Quantenfeldtheorie und Impulsraum . . . . .	37
2.5.5	Relativistische Quantenfeldtheorie . . . . .	37
2.5.6	Ausblick auf QFT für Vielteilchensysteme . . . . .	39
<b>3</b>	<b>Streutheorie</b>	<b>40</b>
3.1	Grundbegriffe . . . . .	40
3.1.1	Motivation . . . . .	40
3.1.2	Übersicht . . . . .	40
3.1.3	Grundstruktur der 3-dimensionalen Streuung (nichtrelativisch, elastisch) . . . .	41
3.2	Detail-Analyse der Potentialstreuung . . . . .	42
3.2.1	Differentialgleichung, Greenfunktion, Integralgleichung . . . . .	42
3.2.2	Bornsche Näherung . . . . .	43
3.3	Mathematische Methoden - Funktionen in drei oder weniger dimensionaler Physik . .	44
3.3.1	Komplexe und reelle Analysis . . . . .	44
3.3.2	dreidimensionale Funktionen, Kugelkoordinaten . . . . .	45
3.4	Partialwellenmethode, Streuphasen . . . . .	46

3.4.1	Partialwellenentwicklung . . . . .	46
3.4.2	Optisches Theorem und Wirkungsquerschnitt . . . . .	48
3.4.3	Kleine Reichweite, kleine Energie . . . . .	48
3.4.4	Kurzzusammenfassung Partialwellenmethode und Ergänzungen . . . . .	49
3.5	Mathematische Methoden - Funktionalanalysis . . . . .	50
3.6	Formell, allgemein Streutheorie . . . . .	52
3.6.1	Motivation, Übersicht . . . . .	52
3.6.2	In-Zustände und S-Matrix . . . . .	52
3.6.3	Existenz der Møller-Operatoren . . . . .	54
3.6.4	Møller, Analyse von Jauch (1958) bzw. Bell (1960) . . . . .	55
3.6.5	Integralgleichung für $\Omega$ , Lippmann-Schwinger Gleichung . . . . .	57
3.6.6	Lippmann-Schwinger-Gleichung und S-Matrix . . . . .	58
3.6.7	Zusammenfassung mit $f(\theta, \phi)$ . . . . .	59
3.7	Weiteres zur allgemeinen Streutheorie . . . . .	60
3.7.1	Formulierung im Ww-Bild . . . . .	60

# 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:** (Korollar)  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

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

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

**Schrödinger-Bild**

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

**Heisenberg-Bild**

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

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

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

### 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  $\theta$  um  $z$ -Achse)

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

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

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

“Generatoren der zugehörigen Lie-Algebra”

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

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

#### 1.1.2 Darstellungen

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

mit Pauli-Matrizen  $\sigma_k$ .

## 1.2 Lorentzinvarianz

### 1.2.1 Lorentzgruppe

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

Boosts in x-Richtung:

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

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

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

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*)

**Partitüt/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.

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

Darstellung für Diracspinoren:

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

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  $S$ :

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

### 1.2.3 Diracspinoren und $\gamma$ -Matrizen

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

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

Weyl-Form:

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

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*:  $\bar{\psi} := \psi^\dagger \gamma^0$

Lorentz:

$$\psi \mapsto S(\Lambda) \psi$$

$$\bar{\psi} \mapsto \bar{\psi} S^{-1}(\Lambda)$$

$$\bar{\psi} \psi \mapsto \bar{\psi} \psi$$

$$\bar{\psi} \gamma^\mu \psi \mapsto \Lambda^\mu{}_\nu \bar{\psi} \gamma^\nu \psi$$

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

## 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:  $\partial_\mu = (\frac{\partial}{\partial x^\mu}) = (\partial_t, \nabla)$ ,  $\square = \partial_\mu \partial^\mu = \partial_t^2 - \Delta$
- 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  $\phi'(x') = \phi(x)$ ).

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

#### Interpretation?

- Einfachste relativistische Differentialgleichung
- “erraten aus QM” (mit QM Ersetzungsregeln  $E \rightarrow i\partial_t$ ,  $\mathbf{p} \rightarrow -i\nabla$ )
- Nichtrelativistischer Limes: ein Teilchen,  $E \approx m + \text{Korrektur}$ . 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:  $-\partial_t^2 \phi = (-\Delta + m^2) \phi$

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

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

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

Definiere 4-Stromdichte:

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

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

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

## Interpretation

- $\rho$  ist nicht positiv definit!  $\rho < 0$  möglich! Also kann  $\rho$  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  $\rho$  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.)
- $\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\partial_\mu\gamma^\mu - m)\psi$
- Adjungierte Dirac-Gl.  $i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu + m\bar{\psi} = 0$   
 $\Rightarrow \partial_\mu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) = 0$
- Def.  $j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ ,  $\rho = \psi^\dagger\psi$  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)

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

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

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

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

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  $\gamma^0$  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 $\psi$

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:  $L = \frac{1}{2}m \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx_\mu}{d\tau}$

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:

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

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

Kanonisch konjugierter Impuls:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^\mu &= \frac{\partial L}{\partial \frac{dx_\mu}{d\tau}} = m \frac{dx^\mu}{d\tau} - e A^\mu \\ \Rightarrow H &= \frac{1}{2m} (\mathcal{P}^\mu + e A^\mu)^2 \end{aligned}$$

Rezept: minimale Kopplung  $\mathcal{P}^\mu \rightarrow \mathcal{P}^\mu + e A^\mu$ , Klein-Gordon-Gleichung:

$$\boxed{[(i\partial^\mu + e A^\mu)(i\partial_\mu + e A_\mu) - m^2] \phi = 0}$$

Dirac-Gleichung:

$$\boxed{(i\cancel{\partial} + e\cancel{A} - m) \psi = 0}$$

Elektromagnetische Stromdichte:

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

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:  $D^\mu \psi := (\partial^\mu - ie A^\mu) \psi$ . 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:

$$[(i\partial^\mu + e A^\mu)(i\partial_\mu + e A_\mu) - m^2] \phi = 0$$

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

Ansatz:

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

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

Einsetzen in KG-Gl.:

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

Vernachlässigen von  $\partial_t \Phi$ :

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

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

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

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

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

Eliminiere

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

### Vereinfachung der $\sigma$ -Anteile

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{O}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{O}}) &= \sigma^i \hat{O}^i \sigma^j \hat{O}^j = \sigma^i \sigma^j \hat{O}^i \hat{O}^j \\ &= \left( \frac{1}{2} \{ \sigma^i, \sigma^j \} + \frac{1}{2} [ \sigma^i, \sigma^j ] \right) \hat{O}^i \hat{O}^j = \left( \delta^{ij} + i\epsilon^{ijk} \sigma^k \right) \hat{O}^i \hat{O}^j \\ &= \hat{\mathbf{O}}^2 + i\epsilon^{ijk} \sigma^k \frac{1}{2} [\hat{O}^i, \hat{O}^j] \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

**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)

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

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:

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi' &= i\partial_t(e^{iS}\psi) = (i\partial_t e^{iS})\psi + e^{iS}i\partial_t\psi \\ &= [(i\partial_t e^{iS})e^{-iS} + e^{iS}H_De^{-iS}]\psi' \\ H'_D &= i(i\dot{S} + \frac{i^2}{2}[S, \dot{S}] + \frac{i^3}{6}[S, [S, \dot{S}]] + \dots) + H_D + i[S, H_D] + \frac{i^2}{2}[S, [S, H_D]] + \dots \end{aligned}$$

Idee 2:  $H'_D$  soll blockdiagonal sein in 2-Spinoren (bis zu bestimmter Ordnung)  $\rightarrow$  Gleichung für  $\psi'_A$  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  $\psi'' = e^{iS''}\psi'''$  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

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

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

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

Der obere Block ist

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

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-Kopplung: 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:  $|n^{(1)}\rangle$ ,  $n = 1, 2, \dots$

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

$\Rightarrow$  vernünftige Annahme: Basiszustände für Teilchen 1+2:

$|n^{(1)}\rangle|m^{(2)}\rangle$ ,  $n, m = 1, 2, \dots$  “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:

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

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

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)  $|\dots\psi, \phi\dots\rangle = +|\dots\phi, \psi\dots\rangle$

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

## 2.2.2 Zustände

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

Permutationsoperator  $P_{ij}$ :

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

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

(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 Basisselement (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)

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

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

$$\implies |\psi_N^{\pm}\rangle \in \mathcal{H}_N,$$

$$P_{ij} |\psi_N^{\pm}\rangle = \pm |\psi_N^{\pm}\rangle \implies S_N^{\pm} |\psi_N^{\pm}\rangle = \pm |\psi_N^{\pm}\rangle$$

$$\implies |\psi_N^{\pm}\rangle = S_N^{\pm} \left( \int |n_1^1 \dots n_N^N\rangle \langle n_1^1 \dots n_N^N| \right) (S_N^{\pm})^{\dagger} |\psi_N^{\pm}\rangle$$

$$= \sum \int \underbrace{|n_1 \dots n_N\rangle}_{\text{Basiszustände}} \underbrace{\langle n_1 \dots n_N | \psi_N^{\pm} \rangle}_{\text{Koeffizienten}}$$

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

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

für jede sinnvolle Observable auf dem Raum der sinnvollen Zustände.

- Spezielle Observable  $A_N := |\psi_N\rangle\langle\psi_N|$  ergibt

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

Woraus schließlich folgt dass

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

.

- Das Symmetrisierungspostulat wird hierdurch suggeriert. 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	$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}; \mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_{\text{ges}}$ $H$ sinnvoll, $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ nicht sinnvoll
2 Teilchen ununterscheidbar	$\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ nicht sinnvoll, aber $\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2, (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)^2,  \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 ^2, \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2$ 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  $e_1, e_2, e_3, \dots$  und Eigenzuständen  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots$

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

### 2.3.2 Direkter Prozess vs. Austauschterm

Zwei Teilchen:  $|\psi\rangle, |\phi\rangle \rightarrow \text{Prozess} \rightarrow |n\rangle, |m\rangle$

Anfangszustand  $|i\rangle \rightarrow \text{Endzustand } |f\rangle$ . Frage: Was ist die Wahrscheinlichkeit?

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

Unterscheidbar: (entweder nur links oder nur rechts):

- “direkt”:

$$A_{i \rightarrow f}^d = \langle n^{(1)} m^{(2)} | \psi^{(i)} \phi^{(2)} \rangle = \langle n | \psi \rangle \langle m | \phi \rangle$$

- “Austauschterm”:

$$A_{i \rightarrow f}^a = \langle m^{(1)} n^{(2)} | \psi^{(i)} \phi^{(2)} \rangle = \langle m | \psi \rangle \langle n | \phi \rangle$$

- Gesamtwahrscheinlichkeit: “entweder  $\langle nm |$  oder  $\langle mn |$ ”

$$P_{i \rightarrow f} = |A_{i \rightarrow f}^d|^2 + |A_{i \rightarrow f}^a|^2$$

Bosonen:

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

$$A_{i \rightarrow f} = \langle f | i \rangle = \frac{1}{2} (\langle \psi | n \rangle \langle \phi | m \rangle + \langle \phi | n \rangle \langle \psi | m \rangle) \cdot 2 = A_{i \rightarrow f}^d + A_{i \rightarrow f}^a$$

$$P_{i \rightarrow f} = \left| A_{i \rightarrow f}^d + A_{i \rightarrow f}^a \right|^2$$

Fermionen (Analog):

$$P_{i \rightarrow f} = \left| A_{i \rightarrow f}^d - A_{i \rightarrow f}^a \right|^2$$

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

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

### 2.3.3 Wasserstoffmolekül H<sub>2</sub>

Chemische Bindung, gewisser Atomabstand  $R$  minimiert die Energie. Austauschwechselwirkung sehr wichtig → 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

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

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

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 $\mathbf{R}_a$

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

**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:  $[\mathbf{S}^2, S_z] = 0$ . Simultane Eigenzustände:

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

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  $|\psi_{\text{sinnvoll}}\rangle$

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

Auf jeden Fall:  $E_{\text{var}} \geq E_{\text{Grundzustand}}$  (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  $\phi_a$  und  $\phi_b$  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.

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

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  $L_{ab} = \langle \phi_a | \phi_b \rangle = \int d^3x \phi_a(\mathbf{x}) \phi_b(\mathbf{x})$  (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

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

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

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

Damit

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

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!),  $\langle 0|0\rangle = 1$   
→ Vakuum-Hilbertraum  $\mathcal{H}_0 = \{c|0\rangle, c \in \mathbb{C}\}$

- “Fockraum”

Bosonen:  $\mathcal{F} := \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2^{(+)} \oplus \mathcal{H}_3^{(+)} \oplus \dots$

Fermionen:  $\mathcal{F} := \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2^{(-)} \oplus \mathcal{H}_3^{(-)} \oplus \dots$

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  $|n\rangle$ ”

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

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

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

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

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

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

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

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

$$a_n |0\rangle = 0$$

$$a_n |m\rangle = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ |0\rangle & n = m \text{ (und Zustände normiert)} \end{cases}$$

$$a_n |m_1, \dots, m_N\rangle^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \delta_{nm_i} |m_1 \dots m_{i-1} m_{i+1} \dots m_N\rangle^{(+)}$$

**Vertauschungsrelation**

$$a_n a_m^\dagger |m_1 \dots m_N\rangle^{(+)} = a_n \sqrt{N+1} |mm_1 \dots m_N\rangle^{(+)} = \delta_{nm} |m_1 \dots m_N\rangle + \sum \delta_{nm_i} |mm_1 \dots m_{i-1} m_{i+1} \dots m_N\rangle^{(+)}$$

$$a_m^\dagger a_n |m_1 \dots m_N\rangle^{(+)} = \sum \delta_{nm_i} |mm_1 \dots m_{i-1} m_{i+1} \dots m_N\rangle^{(+)}$$

Differenz enthält nur  $\delta_{nm}$ -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

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

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

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

**Vertauschungsrelationen** Vorgehen analog zu Bosonen.

$$\{c_{n_1}^\dagger c_{n_2}^\dagger\} = 0$$

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

$$\{c_n, c_m^\dagger\} = \delta_{nm} := \langle n|m\rangle$$

$$\{c_n^\dagger, c_m^\dagger\} = 0$$

$$\{c_n, c_m\} = 0$$

Diese Vertauschungsrelationen beschreiben die Fermi-Statistik.

#### 2.4.4 Besetzungszahldarstellung

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

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

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

Häufig andere Normierung genutzt:

Bsp:

$$a_{\psi_1}^\dagger a_{\psi_2}^\dagger a_{\psi_3}^\dagger |0\rangle = \sqrt{3!} |\psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle^{(\pm)}$$

$$|\psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle^{(\pm)} = \frac{1}{3!} \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{\mathcal{P}} |\psi_1 \psi_3 \psi_6\rangle$$

$$\langle \psi_1 \psi_3 \psi_6 | \psi_1 \psi_3 \psi_6 \rangle^{(\pm)} = \frac{1}{3!}$$

$$a_{\psi_1}^\dagger a_{\psi_1}^\dagger a_{\psi_5}^\dagger |0\rangle = \sqrt{3!} |\psi_1 \psi_1 \psi_5\rangle^{(+)}$$

$$|\psi_1 \psi_1 \psi_5\rangle^{(+)} = \frac{1}{3!} \sum_{\mathcal{P}} |\psi_1 \psi_1 \psi_5\rangle$$

$$\langle \psi_1 \psi_1 \psi_5 | \psi_1 \psi_1 \psi_5 \rangle^{(+)} = \frac{2!}{3!}$$

Allgemein:

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

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

## Besetzungszahldarstellung normiert

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \pm \dots \frac{(a_{\psi_2}^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \frac{(a_{\psi_1}^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} |0\rangle$$

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:

$$\begin{aligned}\hat{n}_{\psi_k} &:= a_{\psi_k}^\dagger a_{\psi_k} \\ \hat{n}_{\psi_k} |0\rangle &= 0\end{aligned}$$

Vertauschungsrelation:

$$\begin{aligned}\hat{n}_{\psi_k} a_{\psi_l}^\dagger &= a_{\psi_k}^\dagger a_{\psi_k} a_{\psi_l}^\dagger = a_{\psi_l}^\dagger \hat{n}_{\psi_k} + \delta_{kl} a_{\psi_l}^\dagger \\ [\hat{n}_{\psi_k}, a_{\psi_l}^\dagger] &= \delta_{kl} a_{\psi_l}^\dagger \quad [\hat{n}_{\psi_k}, (a_{\psi_l}^\dagger)^{n_l}] = n_l \delta_{kl} (a_{\psi_l}^\dagger)^{n_l}\end{aligned}$$

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

Teilchenzahloperator:

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

Nebenrechnung:

$$a_{\psi_k}^\dagger a_{\psi_l} |\psi_{n_1}, \dots, \psi_{n_N}\rangle^{(\pm)} = \sum_{m=1}^N \delta_{ln_m} |\psi_{n_1}, \dots, \psi_k, \dots, \psi_{n_N}\rangle^{(\pm)}$$

(wobei  $\psi_k$  den Zustand  $\psi_{n_m}$  ersetzt)

Einteilchenobservablen: z.B. kinetische Energie:

$$\begin{aligned}T_1 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \\ T_N &= \sum_{m=1}^N T_1^{(m)}\end{aligned}$$

Matrizelement zw. 1-T.-Zuständen

$$\begin{aligned}\langle \psi_k | T_1 | \psi_l \rangle &=: T_{kl} \\ T_1 | \psi_l \rangle &= \sum_k T_{kl} | \psi_k \rangle\end{aligned}$$

Wirkung auf  $N$ -T.-Zustand:

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

Vergleich mit Nebenrechnung:

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

**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

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

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:

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

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

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

$$T = \int d^3p \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}}$$

2-Teilchen-Potentiale in Impulsbasis:

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

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

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

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

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



## 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:

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

Genereller Hamiltonian für Festkörperelektronen mit spinunabhängigem  $V_2$

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2L^3} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q} \sigma_1 \sigma_2} \tilde{V}(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}$$

Genereller Hamiltonian für Bosegas mit Wechselwirkung:

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

### Anwendung: Hartree-Fock-Näherung

$c_A^\dagger c_B^\dagger c_C c_D$  = Produkt aus Paar  $AB$  oder aus Paar  $A'B'$

$$A = c_A^\dagger c_D \quad B = c_B^\dagger c_C \quad A' = c_A^\dagger c_C \quad B' = c_B^\dagger c_D$$

*Mean-field-Näherung:*

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

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

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)

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

**Weitere Anwendungsbeispiele:** Supraleitung, Suprafluidität

## 2.5 Ortsraum, Impulsraum, QFT (Spin=0)

### 2.5.1 Zur Interpretation der letzten Ergebnisse

$$H = T + V$$

In Impulsbasis:

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

- 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  $n_{\mathbf{p}} = a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}}$
- Bedeutung der Oszillatoren: de Broglie-Wellen der Impuls-Eigenzustände
- Bedeutung von  $\sum$  bzw.  $\int d^3p$ : 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 Austauscheteilchen 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":  $a_{\mathbf{x}}^\dagger$ . Andere Bezeichnung  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ .

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

Zusammenhang mit Impulsdarstellung:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int d^3p a_{\mathbf{p}}^\dagger e^{-i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}} \\ \hat{\Psi}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int d^3p a_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}} \end{aligned}$$

Dann mit 2-Teilchen-Potential:

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

Dann freier 1-Teilchen-Hamiltonian:

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

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

$$= \int d^3x_1 d^3x_2 d^3p \frac{e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x}_2 - \mathbf{p}\mathbf{x}_1)}}{(2\pi)^3} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \cdot \frac{-\Delta}{2m} \hat{\Psi}(\mathbf{x}_1)$$

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

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

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

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

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:  $\psi^*$  und  $\psi$  als unabhängig betrachten)

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

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

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**  $H = \int d^3x \mathcal{H}$

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

### Poissonklammern

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

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

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

$$\{\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{y})\}_{PK} = 0$$

**Quantisierung** Rezept: “kanonische Quantisierung”

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

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

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

### 2.5.3. Anhang: Kanonische Quantisierung

Rezept, um eine sinnvolle Quantentheorie zu definieren.

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

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

#### Beispiel: Harmonischer Oszillator

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

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

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

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?  $\rightarrow$  Die so erzeugte QT reproduziert die ursprüngliche klassische Theorie im klassischen Limes!

Beispiel:

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle &= \langle \psi | i[\hat{H}, \hat{p}] | \psi \rangle \\ [\hat{H}, \hat{p}] &= m\omega^2 \hat{q} i\hbar \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= -m\omega^2 \langle \hat{q} \rangle\end{aligned}$$

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

### Ehrenfest-Theorem

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

(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  $a_{\mathbf{p}}$ :

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

simple Rechnung erzeugt Vertauschungsrelationen:

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}] = 0 \quad , \quad [a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}^\dagger] = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Hamiltonian wird zu

$$\hat{H} \int d^3p \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}}$$

[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  $\rightarrow$  nicht kausal!

## Umformulierung mit Feldoperatoren

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

Heisenberg-Bild:

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

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

Kausalität: Übergang von Ereignis am Koordinatenursprung zu Ereignis am Raumzeitpunkt  $\mathbf{x}, t$  (Orts-eigenzustände 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:

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

Lösungsmöglichkeiten:

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

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

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:

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

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

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

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

## Bedeutung

- relativistische QT muss QFT sein, um Kausalität zu ermöglichen
- Antiteilchen müssen existieren mit selber Ruhemasse  $\rightarrow$  Fundamentale Vorhersage  $\rightarrow$  bestätigt!
- Theorie aufgebaut aus kausalen Feldoperatoren, d.h.  $a_{\mathbf{p}} \leftrightarrow b_{\mathbf{p}}^\dagger$  tauchen immer gemeinsam auf, z.B. auch im Hamiltonian.  
 $\Rightarrow$  Teilchenvernichtung  $\leftrightarrow$  Antiteilchenerzeugung  
Teilchenzahl kann nicht konstant bleiben  $\rightarrow$  bestätigt!
- Das Vorzeichen in  $[ , ]^{(\pm)}$  muss  $-$  sein  $\rightarrow$  Bosonen!  
 $\Rightarrow$  fundamentale Vorhersage: Bosonen haben ganzzahligen Spin, Fermionen halbzahligen Spin  $\rightarrow$  bestätigt!

### 2.5.6 Ausblick auf QFT für Vielteilchensysteme

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

$$L = \sum_i \frac{m}{2} \dot{q}_i^2 - \sum_i \kappa \frac{(q_{i+1} - q_i)^2}{2}$$

$\Rightarrow$  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  $\rightarrow \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega}$
- 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  $t \rightarrow \infty | \sim$  freie Teilchen bei  $t \rightarrow -\infty, p_i \rangle$   
Relation  $S$ -Matrix  $\leftrightarrow$  Wirkungsquerschnitt  
optisches Theorem  
exakte Gleichungen: Lippmann-Schwinger-Gleichung, Greensche Funktionen  $\rightarrow$  Näherungen  
Näherungen: zeitabhängige Störungstheorie ( $\rightarrow$  Feynmandiagramme der Teilchenphysik)
- nichtrelativistische elastische Streuung an Potential  $V(\mathbf{x})$   
Spezialfall, in obigem enthalten  
Streuwellen  $\sim f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$   
Relation  $f \leftrightarrow$  Wirkungsquerschnitt  
Störungstheorie für kleines  $V \rightarrow$  Bornsche Näherung  
Partialwellenentwicklung  $\rightarrow$  insbesondere für kleine Reichweite
- (Themenreihenfolge von unten nach oben)

### 3.1.3 Grundstruktur der 3-dimensionalen Streuung (nichtrelativistisch, elastisch)

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

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

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

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

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  $x \rightarrow \infty$ .

*Beweis:*

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

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

$x \rightarrow \infty$ :

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

Das gilt trivialerweise für die einfallende Welle.

Gestreute Welle (Längere Rechnung  $\rightarrow$  schreibe  $\Delta$  in Kugelkoordinaten)

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

Damit haben wir die asymptotische Lösung durch einlaufendes  $\phi$  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  $d\Omega$  und zählen darin die Teilchen pro Zeit.  $:= dI_{\text{aus}}$  (auslaufender Strom)

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

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

und

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

Konkret mit obiger Streulösung:

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

Damit:

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

## 3.2 Detail-Analyse der Potentialstreuung

### 3.2.1 Differentialgleichung, Greenfunktion, Integralgleichung

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

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

Außerdem gewünscht ist die Randbedingung

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

Greensche-Funktion obigen Form der Schrödingergleichung:

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

Damit lässt sich die Schrödingergleichung zu einer Integralgleichung umformen:

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

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:

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = |\mathbf{x}| \left( 1 - \mathbf{e}_x \cdot \frac{\mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|} + \dots \right) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} |\mathbf{x}| - \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{x}'$$

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

Damit

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

### 3.2.2 Bornsche Näherung

Näherung für schwache Potentiale,  $V$ ="klein"

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

Variablen umbenennen:

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

Einsetzen der zweiten Gleichung in das erste Integral:

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

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

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + \psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{x}) + \dots$$

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

$$f = f^{(1)} + f^{(2)} + \dots$$

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

Besonders interessant: 1. Bornsche Näherung

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

### 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

$$\|f\|_p := \left( \int |f(x)|^p dx \right)^{1/p}$$
$$L^p := \left\{ f \mid \|f\|_p < \infty \right\}$$

mit gewissen Definitionsbereichen.

Interessant:

$$L^1 \quad \int |f(x)| dx < \infty$$
$$L^2 \quad \int |f(x)|^2 dx < \infty$$

##### Distributionen

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

##### Fourier Transformation

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

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

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

- falls  $f \in L^2$  **und**  $f \in L^1$  entspricht die Fouriertransformation  $\tilde{f}(k) = \int dx e^{-ikx} f(x)$
- $\tilde{f}$  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 Quantenmechanik ist mit der Wellenfunktion  $\Psi \in L^2$  im Hilbertraum der Quantenmechanik  $L^2$  und den entsprechenden Fouriertransformationen

$$\tilde{\Psi}(p) = \int dx e^{-ipx} \Psi(x)$$
$$\Psi(x) = \int dp e^{ipx} \tilde{\Psi}(p)$$

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  $G$ )

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

Eine wichtige, typische Anwendung ist die Integration im Reellen.

## Beispiel

Herleitung der Fouriertransformation der Greenfunktion

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

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

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

### 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 Legendrepolyomen  $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2 - 1)^l$ . Die Normierung ist dabei  $\int_{-1}^1 P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$ .

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

$$\begin{array}{ll} \xi(\rho) = j_l(\rho) & \text{sphärischen Besselfunktionen} \\ \xi(\rho) = n_l(\rho) & \text{sphärischen Neumannfunktionen, nicht regulär für } \rho \rightarrow 0 \end{array}$$

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

$$\begin{array}{ll} j_l(\rho) = \frac{\sin(\rho - l\pi/2)}{\rho} & \text{allgemein} \\ j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left(\frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} & \text{exakt} \end{array}$$

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

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

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

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

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

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  $r \rightarrow \infty$  mit  $v_{\text{eff}} \approx 0$  (kleine Reichweite) ist mit  $u_l = \sin kr$  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  $\delta_l$ .

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

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

Wir haben zusätzlich gefordert

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

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  $\delta_l$  bekannt gilt für  $r \rightarrow \infty$ :

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



### 3.4.2 Optisches Theorem und Wirkungsquerschnitt

$$\text{Differentieller Wirkungsquerschnitt} \quad \frac{d\sigma}{d\Sigma} = |f(\theta)|^2 = \sum_{l,l'} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{k^2} e^{i\delta_l - i\delta_{l'}} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l P_{l'}$$

$$\begin{aligned} \text{Totaler Wirkungsquerschnitt} \quad \sigma &= \int d\sigma = \int d\Sigma |f(\theta)|^2 = 2\pi \int_{-1}^1 d \cos \theta |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) 2 \sin^2 \delta_l \end{aligned}$$

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  $\delta_l$  bekannt  $\implies \sigma, d\sigma$  einfach erhaltbar
- $\delta_l$ -Bestimmung = Hauptarbeit
- oft ausreichend: nur kleine  $l$  betrachten, z.B. nur  $l=0$  ("s-Wellenstreuung")
- Ungleichung liefert absolute Obergrenze an  $\sigma_l$  (kann eventuell durch Bornsche Näherung verletzt sein)

### Optisches Theorem

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

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

- Relation Wahrscheinlichkeit  $\leftrightarrow$  Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude
- QM Wahrscheinlichkeit  $\leftrightarrow$  Wahrscheinlichkeitsamplitude
- Interpretation: Teilchenzahlerhaltung

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \xrightarrow{\text{nach Streuung}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f \frac{e^{ikr}}{r}$$

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  $k \rightarrow 0, kR_0 \ll 1$  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  $r = R_0$

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

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  $k \rightarrow 0$  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

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

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

Wir betrachten immer ein festes  $l$ :

einlaufend	$(e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}})_{l, \mathbf{x}  \rightarrow \infty} \approx \left( A_l^{(0)} \frac{e^{-ikr}}{r} + B_l^{(0)} \frac{e^{ikr}}{r} \right) P_l(\cos \theta)$
komplett	$\Psi_l \approx \left( A_l \frac{e^{-ikr}}{r} + B_l \frac{e^{ikr}}{r} \right) P_l(\cos \theta)$
	$f_l = b_l P_l(\cos \theta)$

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  $\delta_l$  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

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

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

**Konvergenz:**

- Starke Konvergenz:

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

- Schwache Konvergenz:

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

- 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  $x, p, H, \dots$ . 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

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)$$

$$dE(\lambda) = \text{operatorwertiges Integralma\ss}$$

$$E(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} dE(\lambda') = \text{Projektionsoperator}$$

$$E(+\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} dE(\lambda') = \mathbf{1}$$

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

$$A = \int \lambda |\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda| d\lambda$$

$$= \sum \lambda |\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda|$$

Spektrum  $\sigma(A)$  Wertebereich der  $\lambda$  mit  $dE(\lambda) \neq 0$ , d.h.

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

reicht aus.

- diskrete Eigenwerte bzw. diskretes Spektrum: Integral  $\rightarrow$  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  $|\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda| d\lambda = dE(\lambda)$  streng sinnvoll.

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

Wichtige Operatoren für Streuprobblem:

- 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 (Streu-zustände 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:

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

$$U(t) := e^{-iH t}$$

**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, analytische 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  $\propto G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$

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

Selbst wenn  $V$  und  $\psi$  quadratintegrabel sind, ist das Integral  $\propto \frac{1}{r}$  und das Ergebnis damit im Allgemeinen  $\notin L^2$ .

- Physikalisch: Wellenpakete mit kleinen  $\Delta x_{\text{trans}}$ ,  $\Delta x_{\text{long}}$  und  $\Delta p$  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-Matrix

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	$ \psi_{\mathbf{k}}\rangle$
	$\mathbf{p} \psi_{\mathbf{k}}\rangle = \mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}}\rangle$
	$H_0 \psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \psi_{\mathbf{k}}\rangle$
freies Wellenpaket	$ \psi_g(t)\rangle = \int d^3k g(\mathbf{k}) e^{-iE_{\mathbf{k}}t}  \psi_{\mathbf{k}}\rangle$
	$\int d^3k  g(\mathbf{k}) ^2 = 1$

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

Forderungen Streuzustände, präpariert von Experimentalphysiker:

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

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

Äquivalent:

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

und damit die Konvergenzbedingung:

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

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

### Entwicklung im Heisenberg-Bild

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} & |\psi_g(t)\rangle - |\phi_g(t)\rangle \rightarrow 0 (t \rightarrow +\infty) \\ & |\psi_g^H\rangle = \int d^3k g(\mathbf{k}) |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{out}}\rangle \end{aligned}$$

Diese Zustände werden von den Detektoren gemessen.

**S-Matrix**:

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

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

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

$\Omega_{\pm}$  := Møller-Operatoren

$$\begin{aligned} U(t) &= e^{-iHt} & |\psi^S(t)\rangle &= U(t)|\psi^H\rangle \\ U_0(t) &= e^{-iH_0t} & |\psi^I(t)\rangle &= U_0^\dagger(t)|\psi^S(t)\rangle \\ W(t) &= U^\dagger(t)U_0(t) \end{aligned}$$

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

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

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

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

existiert.

**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  $\int V^2 r^2 dr < \infty$ .
- Zustand  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  sei Gaußsches Wellenpaket

Wellenpaket:

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

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

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

$$\begin{aligned}
X &= (W(t_2) - W(t_1))|\psi\rangle = \left( \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{dW(t)}{dt} \right) |\psi\rangle \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt e^{iHt} (iH - iH_0) e^{-iH_0t} |\psi\rangle \\
\|X\| &\leq \int_{t_1}^{t_2} \|V e^{-iH_0t} |\psi\rangle\|
\end{aligned}$$

Wir benötigen wir

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x} | e^{-iH_0t} |\psi\rangle &=: \psi^0(t, \mathbf{x}) = \int d^3k \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | e^{-iH_0t} |\psi\rangle \\
\psi^0(\mathbf{x}, t) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2}\sigma + i\mathbf{k}\mathbf{x} - iE_k t} \\
&= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-\frac{\mathbf{k}^2}{2}(\sigma + \frac{i}{m}t) + i\mathbf{k}\mathbf{x}} \\
&= \text{const.} \left(\sigma + \frac{i}{m}t\right)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2}(\sigma + \frac{i}{2m}t)^{-1}} \\
|\psi^0(\mathbf{x}, t)| &\leq \text{const.}' t^{-\frac{3}{2}} \forall \mathbf{x}
\end{aligned}$$

Damit folgt schließlich

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

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:**

- $\lim_{t \rightarrow \mp\infty} W(t)|\psi\rangle =: |\psi_{\pm}\rangle$  existiert im starken Sinne  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$  Entsprechend existieren die Møller Operatoren, die physikalische Idee ist dass  $W(t)|\phi_{\mathbf{k}}\rangle \rightarrow |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in, out}}\rangle$
- 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**

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



- $\Omega_{\pm}$  erhält die Norm:  $\|\phi_{\pm}\| = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \|W(t)|\phi\rangle\| = \|\phi\rangle\|$
- $\Omega_{\pm}$  ist nicht unbedingt unitär: (falls  $R \subsetneq \mathcal{H}$ , 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:

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

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

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

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

$$\underbrace{\frac{d}{dt} W(t)}_{\rightarrow 0(t \rightarrow \mp\infty)} = i H W(t) - i W(t) H_0$$

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

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 $\Omega$ , Lippmann-Schwinger Gleichung

Integralgleichung:

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

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

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

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

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

Mit  $\tau = \epsilon t$ ,  $d\tau = \epsilon dt$  ergibt sich

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

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 existiert ein  $T$ , so dass  $\|W(t)|\psi\rangle - \psi_+\rangle\| \leq \frac{\delta}{4} \forall t < -T$ . 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  $\forall \epsilon < \frac{\delta}{4\pi} : \|\dots\| < \delta$ , 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

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

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

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

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

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:

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

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

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

LS-Gleichung allgemein:

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

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  $G_0 \equiv G_0(E_k + i\epsilon)$

$$\begin{aligned} |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle &= |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0 V |\psi_{\mathbf{k}}^{\text{in}}\rangle \\ &= |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0 V |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0 V G_0 V |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0 V G_0 V G_0 V |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + \dots \end{aligned}$$

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:

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

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’:

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

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

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:

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

Präparierter Anfangszustand:

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