

# Skript QT2

3. Juni 2021

# Inhaltsverzeichnis

<b>0</b>	<b>Grundstruktur der Quantenmechanik</b>	<b>3</b>
0.1	Postulate . . . . .	3
0.2	Ortsraum, Teilchen in 1D . . . . .	3
<b>1</b>	<b>Relativistische Quantenmechanik</b>	<b>4</b>
1.1	Kontinuierliche Symmetrien (Bsp. Rotationsinvarianz) . . . . .	4
1.1.1	Drehungen in 3D . . . . .	4
1.1.2	Darstellungen . . . . .	4
1.1.3	Drehungen in der Quantenmechanik . . . . .	5
1.2	Lorentzinvarianz . . . . .	6
1.2.1	Lorentzgruppe . . . . .	6
1.2.2	Darstellungen . . . . .	6
1.2.3	Diracspinoren und $\gamma$ -Matrizen . . . . .	7
1.3	Überblick über relativistische Wellengleichungen . . . . .	7
1.3.1	Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	8
1.3.2	Dirac-Gleichung . . . . .	9
1.4	Physik und Lösungen der Diracgleichung . . . . .	10
1.4.1	Freie Lösungen, Impuls-/Spin-Eigenzustände . . . . .	10
1.4.2	Mehr zum Drehimpuls . . . . .	11
1.4.3	Kopplung ans elektromagnetische Feld . . . . .	12
1.4.4	Nichtrelativistischer Limes . . . . .	12
1.4.5	Weitere Konsequenzen: Spin-Bahn-Kopplung . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Ununterscheidbare Teilchen</b>	
	<b>Bosonen und Fermionen</b>	<b>18</b>
2.1	Unterscheidbare Teilchen . . . . .	18
2.1.1	Zustände . . . . .	18

2.1.2	Observablen/Operatoren . . . . .	19
2.2	Identische/Ununterscheidbare Teilchen . . . . .	19
2.2.1	Prinzipien . . . . .	19
2.2.2	Zustände . . . . .	20
2.3	Einfache Anwendungen . . . . .	22
2.3.1	Grund- und angeregte Zustände . . . . .	22
2.3.2	Direkter Prozess vs. Austauschterm . . . . .	23
2.3.3	Wasserstoffmolekül $H_2$ . . . . .	24
2.4	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren . . . . .	26
2.4.1	Fock-Raum . . . . .	26
2.4.2	Erzeuger/Vernichter für Bosonen . . . . .	26
2.4.3	Erzeuger/Vernichter für Fermionen . . . . .	27
2.4.4	Besetzungszahldarstellung . . . . .	28
2.4.5	Formulierung von Observablen . . . . .	29

# 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:

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

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:

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

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:

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \implies |\psi_N^{\pm}\rangle &= S_N^{\pm} \left( \int |n_1^1 \dots n_N^N\rangle \langle n_1^1 \dots n_N^N| \right) (S_N^{\pm})^{\dagger} |\psi_N^{\pm}\rangle \\ &= \sum \int \underbrace{|n_1 \dots n_N\rangle}_{\text{Basiszustände}} \underbrace{\langle n_1 \dots n_N | \psi_N^{\pm} \rangle}_{\text{Koeffizienten}} \end{aligned}$$

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

- Normierung: per Konstruktion gilt die Vollständigkeitsrelation

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

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

## Observablen, weitere Motivation für Symmetrisierungspostulate

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

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

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

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:  $|\psi\rangle, |\phi\rangle \longrightarrow \text{Prozess} \longrightarrow |n\rangle, |m\rangle$

Anfangszustand  $|i\rangle \longrightarrow \text{Endzustand } |f\rangle$ . 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<sub>2</sub>-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  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$

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

Erzeuger/Vernichter, kontinuierlicher Index:

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

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

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

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