

Theorie D
Skriptum zur Vorlesung von
Prof. Hollik im SS 1995

Ralf Müller
Universität Karlsruhe

16. Juli 1996

Inhaltsverzeichnis

0.1	Grundstrukturen der Quantenmechanik	5
1	Quantenmechanische Streutheorie	8
1.1	Grundbegriffe	8
1.1.1	Streuexperimente und theoretische Konzepte	8
1.1.2	2-Teilchen-Streuproblem	11
1.1.3	Stromdichte und Wirkungsquerschnitt	11
1.2	Optisches Theorem	13
1.3	Streutheorie mit Integralgleichungen	15
1.3.1	Greensche Funktionen	15
1.3.2	Integralgleichung für Streutheorie	15
1.3.3	Bornsche Näherung	17
1.3.4	Darstellungsfreie Formulierung	21
1.4	Partialwellenzerlegung	24
1.4.1	Sphärische Lösungen der freien Schrödingergleichung	24
1.4.2	Streulösungen bei $V \neq 0$	26
1.4.3	Streuamplitude, Wirkungsquerschnitt	31
1.5	Zusammenfassung der Streutheorie	39
2	Symmetrien in der Quantenmechanik	40
2.1	Transformationen von Observablen und Zuständen (auf \mathcal{H})	40
2.2	Symmetrien	42
2.3	Erhaltungsgrößen	47
2.4	Darstellungen und Eigenwertproblem	50
2.4.1	Gruppendarstellungen	50
2.4.2	Eigenwertproblem bei Symmetrie	53
2.5	Drehungen	57
2.5.1	Irreduzible Darstellungen	57
2.5.2	Produktdarstellung, Addition von Drehimpulsen	59
2.5.3	Tensor-Operatoren	62

3	Zeitabhängige Probleme der Quantenmechanik	65
3.1	“Bilder” der Quantenmechanik	65
3.2	Zeitabhängige Störungsrechnung	68
3.2.1	Wechselwirkungsbild (Dirac)	69
3.2.2	Bestimmung von $U_I(t, 0)$	71
3.2.3	Periodische Zeitabhängigkeit	75
4	Quantisierung des elektro-magnetischen Feldes	80
4.1	Klassisches e-m-Feld	80
4.2	Quantisierung des freien Feldes	81
4.3	Photonen	85
4.4	Wechselwirkung von Strahlung mit Materie	88
5	Relativistische Quantenmechanik	95
5.1	Lorentz-Transformationen, klassische Physik	95
5.2	Relativistische “Wellengleichungen”	99
5.2.1	Die Klein-Gordan-Gleichung	100
5.2.2	Die Dirac-Gleichung	102
5.3	Darstellungen der Lorentz-Gruppe	107
5.3.1	Spinor-Darstellungen	107
5.3.2	Kovarianz unter Lorentz-Transformationen	113
5.3.3	Drehungen und Drehimpuls	116
5.4	Lösungen der freien Dirac-Gleichung	118
5.4.1	Impuls- und Helizitätszustände	118
5.4.2	Lösungen zu negativer Energie, Positronen	122
5.5	Dirac-Teilchen im e-m-Feld	123
5.6	Nicht-relativistischer Limes der Dirac-Gleichung	124
5.7	Dirac-Teilchen im Zentralfeld, H-Atom	126

Vorwort

Sehr geehrter Leser,

das hier vorliegende Skriptum zur Theorie D (Quantenmechanik 2) auf der Grundlage einer Vorlesung von Professor Hollik befindet sich noch in einem frühen BETA-Stadium. Es erleichtert einem das Verständnis der Vorlesung, da man sich auf den Inhalt einer Vorlesung konzentrieren kann und sich nicht auf das Abschreiben langer Formeln konzentrieren muß. Es kann auf gar keinen Fall eine Vorlesung ersetzen, da sich mit Sicherheit einige Fehler und unzureichende Erklärungen eingeschlichen haben und viele Erklärungen sehr unverständlich sind, die vom jeweiligen Professor sicherlich verständlicher dargelegt werden. Hier ist Ihre Mithilfe gefragt.

Bitte schreiben Sie mir (ralf@krisal.physik.uni-karlsruhe.de), falls Sie Fehler finden, oder Anregungen haben, wie sich Erklärungen verbessern lassen. Ich hoffe, mit Ihrer Mithilfe schon bald eine neue Auflage dieses Skripts herausbringen zu können.

Ich möchte mich hier vor allem bei Sigrid Rausch bedanken, die zahllose Fehler in meinem Skript aus dem ALPHA-Stadium verbesserte, bei Regina Hoffmann, die mir zahlreiche Hinweise über Fehler und Gestaltung des Skriptes gab, die zur besseren Lesbarkeit beitrugen, bei Dominik Stöckinger, der viele Anregungen für bessere Erklärungen der Sachverhalte gab, und bei vielen anderen, die zur Fehlerkorrektur beigetragen haben.

Es sei darauf hingewiesen, daß von mir demnächst auch ein Skriptum zur Festkörperphysik auf der Grundlage einer Vorlesung von Professor von Löhneysen herauskommen wird. Ferner gibt es von Gerrit Jahn sehr gute Skripte zur Physikalischen Chemie, Theorie A (klassische Mechanik) und Theorie B (klassische Elektrodynamik) und von Wolfgang Voss zur Theorie C (Quantenmechanik I).

Das Skript wurde ausschließlich auf meinem Linux-Rechner mit EMACS, AUC-TEX und L^AT_EX produziert. Die Bilder wurden allesamt mit xfig gemalt und als pictex-Makros in den Text eingebunden. Dies ermöglichte, Formeln im L^AT_EX-Outfit in die Graphiken einzubinden.

Ralf Müller

0.1 Grundstrukturen der Quantenmechanik

1. **Zustände** eines physikalischen Systems lassen sich abbilden auf die Vektoren eines Hilbert-Raumes \mathcal{H} . Bezeichnung:

$$|\varphi\rangle, |\psi\rangle, \dots \in \mathcal{H}, \text{ „ket“}$$

Die Grundidee der Quantenmechanik ist, daß es eine Abbildung A gibt, die dem Hilbertraum \mathcal{H} eine Menge von Zuständen zuordnet, die das betrachtete System einnehmen kann. Diese Abbildung ist nicht bijektiv, sondern es gilt: $A(c|\psi\rangle) = A(|\psi\rangle)$, $\forall c \neq 0$. Aber es gibt eine bijektive Abbildung zwischen den Zuständen und den Einheitsvektoren.

2. Hilbertraum

- Er ist ein linearer Raum und die Dimension ist im allgemeinen unendlich.
- Skalarprodukt $\langle \varphi | \psi \rangle \in \mathcal{C}$, (duale Vektoren: $\langle \varphi |$ („bra“), Linearform: $|\psi\rangle \mapsto \langle \varphi | \psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$.)
- \mathcal{H} ist vollständig in der Norm $\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$
- \mathcal{H} ist separabel: d. h. es gibt eine abzählbare Basis: $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots$

3. Die **Observablen** des physikalischen Systems lassen sich abbilden auf die linearen selbstadjungierten Operatoren auf \mathcal{H} .

$$A^\dagger = A : \langle A\varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | A\psi \rangle$$

Jeder Observablen entspricht ein hermitescher Operator, aber nicht umgekehrt (z.B. das Vektorpotential \vec{A}).

4. **Meßwerte** einer Observablen A sind die Eigenwerte von A .

$$A|\varphi_n\rangle = a_n|\varphi_n\rangle, \quad a_n : \text{Eigenwerte von } A$$

Satz: Eigenwerte sind reell. Eigenvektoren sind orthogonal, wenn $a_n \neq a_m$, und vollständig (sie bilden eine Basis).

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle, \quad c_n = \langle \varphi_n | \psi \rangle \quad \text{falls } \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm}$$

$$|\psi\rangle = \left(\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\right)|\psi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle$$

Vollständigkeit: $\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1$

$|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$ projiziert auf $|\varphi_n\rangle$.

$|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle$ ist die Komponente von $|\psi\rangle$ in Richtung von $|\varphi_n\rangle$.

Die Menge der Eigenwerte ist das Spektrum von A. Man unterscheidet zwischen einem diskreten Spektrum und einem kontinuierlichen Spektrum des Operators A. $A|a\rangle = a|a\rangle$, $a \in R$ (z.B. Q, P) sind nicht normierbar im eigentlichen Sinne. Aber es gilt: $\langle a'|a\rangle = \delta(a - a')$. Die Vollständigkeit lautet jetzt:

$$\int_{\text{Spektrum}} da |a\rangle\langle a| = 1$$

Beispiel: Ort: $\vec{X}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle$, Impuls: $\vec{P}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$

5. **Kanonische Vertauschungsregeln:** x_k , $k = 1, 2, 3$ sei der Ortsoperator, P_k , $k = 1, 2, 3$ sei der Impulsoperator. Dann gilt:

$$[x_k, P_j] = i\hbar\delta_{kj}$$

Dies entspricht den Poisson-Klammern aus der klassischen Mechanik. ($\{x_k, P_j\} = \delta_{kj}$).

6. **Zeitentwicklung:** Sie wird beschrieben durch:

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad H: \text{Hamilton-Operator}$$

H erhält man zunächst aus der klassischen Hamilton-Funktion durch Ersetzen von den Orten und Impulsen durch die entsprechenden Operatoren.

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{x}), \quad \text{falls ein Potential } V \text{ existiert.}$$

bei e-m-Feldern: $H = \frac{(\vec{P} - e\vec{A})^2}{2m} + e\Phi$, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, $\vec{E} = -\partial_t\vec{A} - \nabla\phi$

7. Die Wahl der Basis führt auf die **Darstellung**. Wenn $|a_n\rangle$ die Eigenvektoren zu A sind, dann nennt man $|\psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle$ die A-Darstellung. Für $\langle a_n | A a_m \rangle = a_m \delta_{nm}$ schreibt man auch: $\langle a_n | A | a_m \rangle$.

- **Ortsdarstellung:** Sei $|\vec{x}\rangle$ Eigenvektor von \vec{x} :

$$|\psi\rangle = \int d^3x \underbrace{\langle \vec{x} | \psi \rangle}_{=: \psi(\vec{x}, t)} |\vec{x}\rangle$$

Wellenfunktion

Die Bewegungsgleichung lautet jetzt:

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = H \psi(\vec{x}, t), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}), \quad \vec{P} = -i\hbar \nabla$$

Dies beschreibt ein Teilchen der Masse m im Potential V . Die Eigenfunktion zu \vec{P} ist:

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{P}}{\hbar}$$

- **Impulsdarstellung:** $\vec{P} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle$.

$$|\psi\rangle = \int d^3p \underbrace{\langle \vec{p} | \psi \rangle}_{\varphi(\vec{p}, t) \longleftrightarrow \psi(\vec{x}, t)} |\vec{p}\rangle$$

$$\langle \vec{x}' | \vec{X} | \vec{x} \rangle = \vec{x} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$\langle \vec{x}' | V(\vec{x}) | \vec{x} \rangle = V(\vec{x}) \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$$

Alle Punkte sind unabhängig vom "Bild" der Quantenmechanik. Aber 6. stimmt nur im Schrödingerbild. Im Heisenbergbild gilt: $\partial_t |\psi\rangle = 0$, $\frac{d}{dt} A = \frac{1}{2\hbar} [A, H] + \partial_t A$.

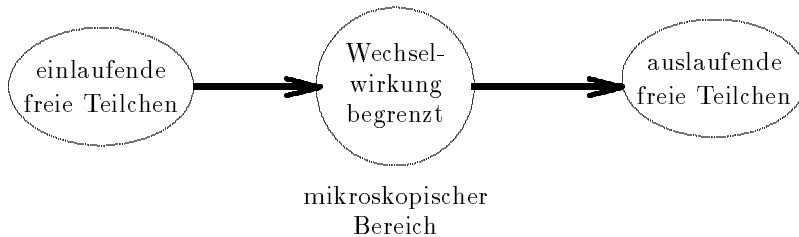
1 Quantenmechanische Streutheorie

1.1 Grundbegriffe

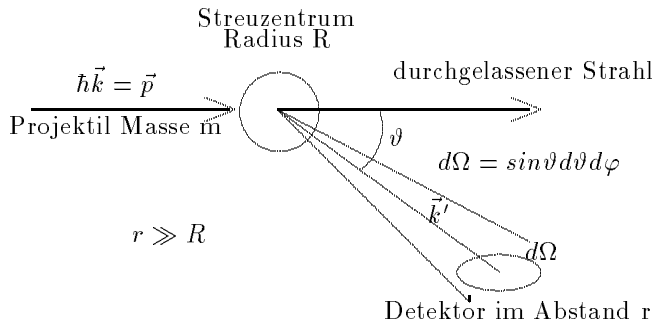
1.1.1 Streuexperimente und theoretische Konzepte

Typisch sind :

- Streuung von (festen) Teilchen an festem Target (z.B. Potential)
- Teilchen–Teilchen–Streuung



Wir betrachten jetzt eine idealisierte Situation: Der einfallende Strahl sei aus gleichartigen Teilchen (gleiche Energie und Richtung) und wird gestreut an einem Potential endlicher Reichweite R .



Wenn nun $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ gilt, so sprechen wir von elastischer Streuung. Wenn dagegen $|\vec{k}| \neq |\vec{k}'|$ gilt, so sprechen wir von inelastischer Streuung. Man kann anhand der Streuung also zum Beispiel feststellen, ob man an einem Target, welches ein zusammengesetztes System ist, gestreut hat (z.B. Atome, Kerne, Nukleonen, Quarks...).

Energie–Impuls–Zusammenhang:

$$(i) \text{ nicht-relativistisch } E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = E_k$$

$$(ii) \text{ relativistisch } E = \sqrt{c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4} \quad , p = \hbar |\vec{k}|$$

Im folgenden betrachten wir nicht-relativistische, elastische Streuung (die Substrukturen sind vernachlässigt). Für die zeitabhängige Beschreibung benutzen wir ein einlaufendes Wellenpaket:

$$t \rightarrow -\infty : \quad \psi_0(\vec{x}, t) = \int d^3 k e^{i\vec{k}\vec{x}} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} A_{k_0}(\vec{k})$$

$$A_{k_0}(\vec{k}) : \quad \text{Peak bei } \vec{k} = \vec{k}'$$

Für das gestreute Wellenpaket gilt: ($r = |\vec{x}|$, $\hat{x} = \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}$)

$$t \rightarrow \infty : \quad \psi_s(\vec{x}, t) = \int d^3 k \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} A_{k_0}(\vec{k}) F(\vec{k}, \hat{x})$$

Annahme: Das Wellenpaket bleibt scharf.

$$\psi_0(\vec{x}, t) = \int d^3 k e^{i\vec{k}\vec{x}} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} A_{k_0}(\vec{k})$$

$$\begin{aligned} \psi_s(\vec{x}, t) &= \int d^3 k \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} A_k(\vec{k}) \underbrace{F(\vec{k}, \hat{x})}_{\text{WW: starke, } \vartheta, \varphi\text{-Abhängigkeit}} \\ &\simeq \frac{1}{r} \underbrace{F(\vec{k}_0, \hat{x})}_{=: f_{E_0}(\vartheta, \varphi)} \cdot \underbrace{\int d^3 k e^{ikr} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} A_{k_0}(\vec{k})}_{\text{festgelegt durch Anfangszustand } \psi_0} \end{aligned}$$

$f_{E_0}(\vartheta, \varphi)$ ist die Streuamplitude.

Warum hat eigentlich die gestreute Welle die Form einer winkelabhängigen Kugelwelle $\frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi)$? Es stellt sich also die Frage, ob die Wellenfunktion so aussehen muß, damit sich dies ergibt. Die Antwort ist: nein, denn z.B. für $\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{e^{2ikr}}{r} f$ erhält man asymptotisch das gleiche. Die Bedingung $\psi = e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi)$ ist also nicht ableitbar, sondern ein Ansatz. Eine Randbedingung, an die Gestalt der Wellenfunktion im Unendlichen. Es wären auch andere Randbedingungen möglich (trivial ist die Summe aus zwei solchen Streulösungen) z.B. auch Bindungszustände, Drehimpulseigenzustände, usw.

Ziel der Streutheorie ist es:

- Bestimmung der Streuphase $f_E(\vartheta, \varphi)$ aus gegebenem Potential

- Bestimmung der Eigenschaften der WW aus Kenntnis von $f_E(\vartheta, \varphi)$ aus dem Experiment.

Übliche Behandlung:

- Idealisierung: scharfes $\vec{k}(\vec{p})$
- Energie-Eigenzustand: stationär $\psi_0(\vec{x}, t) \sim e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$, $\psi_s \sim e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$
- Das Problem ist separierbar \rightarrow stationäre Schrödingergleichung.

Stationäre Behandlung des Streuproblems:

$$\psi_0(\vec{x}, t) = \psi_k(\vec{x})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \psi_k(\vec{x}) = N e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

$$\text{Normierung: } \int d^3x \psi_k^*(\vec{x})\psi_{k'}(\vec{x}) = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \iff N = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}$$

Die stationäre Schrödingergleichung lautet: $H_0\psi_k = E\psi_k$.

Für $V(\vec{x}) \neq 0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Für die Reichweite R eines Potentials gilt: $V(\vec{x}) \simeq 0$, $|\vec{x}| > R$.

Die Lösung für große Werte von r lautet nun:

$$\psi_k(\vec{x}) = N \left\{ e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right\}$$

Zur Begründung: asymptotisch $\implies V \equiv 0$:

$$\begin{aligned} H_0\psi_s &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \partial_r^2 (r\psi_s) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} \psi_s \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} (\partial_r^2 e^{ikr}) f(\vartheta, \varphi) + \frac{e^{ikr}}{2mr^3} \overbrace{\vec{L}^2 f(\vartheta, \varphi)}^{\text{r-unabhängig}} \\ &\quad \sim \frac{1}{r^3} \approx 0 \\ &= \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{=E} \underbrace{\left[\frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \varphi) \right]}_{\psi_s} \end{aligned}$$

1.1.2 2-Teilchen-Streuproblem

Wenn das Potential nur vom Abstand der beiden Teilchen abhängt, so kann man eine Koordinatentransformation in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten bzw. -Impulse vonehmen. $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2}$, $\vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$, $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$, $\vec{p} = \frac{m_1 \vec{p}_1 + m_2 \vec{p}_2}{m_1 + m_2}$, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, $M = m_1 + m_2$.

Der Hamilton ist jetzt eine Summe aus einem Schwerpunktsterm und einem Relativterm: $H_{tot} = H_s + H_r$, $H_s = \frac{\vec{P}^2}{2M}$, $H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r})$, und die Wellenfunktion ist ein Produkt aus zwei Faktoren: $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$.

Es folgen daraus zwei Gleichungen. Eine für die freie Bewegung des Schwerpunktes und eine für das effektive 1-Teilchen-Problem, das Streuproblem eines Teilchen der Masse μ an einem Potential $V(\vec{r})$. Im folgenden wird stets diese 1-Teilchen Streuung behandelt.

$$H_s \phi(\vec{R}) = E_s \phi(\vec{R}); \quad H_r \psi(\vec{r}) = E_r \psi(\vec{r})$$

1.1.3 Stromdichte und Wirkungsquerschnitt

Wir betrachten einen 1-Teilchenzustand mit der Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$, die normiert sein soll.

Wir definieren die **Stromdichte** (Wahrscheinlichkeitsstromdichte):

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] = \Re \left\{ \psi^* \frac{\vec{p}}{m} \psi \right\}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich zu: $\rho(\vec{x}, t) = \psi^* \psi$

Es ergibt sich die **Kontinuitätsgleichung** (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit):

$$\boxed{\nabla \vec{j} + \partial_t \rho = \mathbf{0}}$$

$$\implies \frac{d}{dt} \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = 0, \quad \text{da} \quad \oint d\vec{o} \vec{j} \rightarrow 0, \quad \text{für } r \rightarrow \infty$$

Die asymptotische Wellenfunktion ist eine Summe aus der einlaufenden Wellenfunktion und der gestreuten Wellenfunktion für große Entfernungen

($\psi_k(\vec{k}) = \psi_{in} + \psi_s$). Die zu diesen Wellenfunktionen gehörenden Stromdichten sind:

$$\vec{j}_{in} = N^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = \text{const.}$$

$$\vec{j}_s = N^2 \frac{\hbar}{m} \Re \left\{ f^*(\vartheta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{ir} \nabla f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right\}$$

Der Gradient in Kugelkoordinaten lautet: $\nabla = \vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \partial_\vartheta + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \vartheta} \partial_\varphi$

Nun ergibt sich \vec{j}_s zu:

$$\vec{j}_s = \frac{N^2 \hbar}{m} |f|^2 \Re \left\{ \frac{e^{-ikr}}{ir} \partial_r \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \vec{e}_r + \vec{e}_\vartheta \left(\sim \frac{1}{r^3} \right) + \vec{e}_\varphi \left(\sim \frac{1}{r^3} \right)$$

Dominant für große r ist also nur der erste Term:

$$\vec{j}_s = \vec{e}_r N^2 \left(\frac{\hbar \vec{k}}{m} \right) \frac{|f(\vartheta, \varphi)|^2}{r^2} + o\left(\frac{1}{r^3}\right)$$

$$\vec{j}_s = \vec{e}_r |j_{in}| \frac{|f(\vartheta, \varphi)|^2}{r^2} + o\left(\frac{1}{r^3}\right)$$

Damit ist $\int d\vec{\sigma} \vec{j}_s = \int r^2 d\Omega \vec{e}_r = \int d\Omega |f(\vartheta, \varphi)|^2$ unabhängig von r .

Der **differentielle Wirkungsquerschnitt** oder Streuquerschnitt ist definiert als:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Zahl der gestreuten Teilchen pro Zeit und Raumwinkel}}{\text{Anzahl der einlaufenden Teilchen pro Zeit und Fläche}}$$

Er hat die Dimension einer Fläche.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\vec{j}_s \vec{e}_r r^2 d\Omega}{|j_{in}| d\sigma} = |f(\vartheta, \varphi)|^2$$

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

Der **totale Wirkungsquerschnitt** (auch integrierter Wirkungsquerschnitt) ist definiert als:

$$\boxed{\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma(\vartheta, \varphi)}{d\Omega}}$$

1.2 Optisches Theorem

Der einlaufende Strom ist divergenzfrei (d.h. $\nabla \vec{j} = 0$), da für jedes Volumen V gilt:

$$\oint_{\partial V} d\vec{\sigma} \vec{j}_{in} = 0$$

Da aber für den gestreuten Strom \vec{j}_s gilt: $\oint d\vec{\sigma} \vec{j}_s \neq 0$, wäre die Summe der Integrale $\oint d\vec{\sigma} (\vec{j}_{in} + \vec{j}_s) \neq 0$. Man muß also die Interferenz zwischen dem einlaufenden Strahl (hinter dem Target) und dem gestreuten Strahl berücksichtigen. Es gilt also:



$$\vec{j} = \vec{j}_{in} + \vec{j}_s + \vec{j}_{int}$$

Interferenz gibt es auch vor dem Streuzentrum (sie hängt von $|f(\vartheta, \varphi)|^2$ ab), aber sie ist klein.

Für die Wellenfunktion gilt also: $\psi = N(e^{i\vec{k}\vec{x}} + f \frac{e^{ikr}}{r})$, mit $\vec{k} = k\vec{e}_z$.

Nun lautet der Strom unter Vernachlässigung aller Terme $\sim \frac{1}{r^2}$ und $\sim \frac{e^{ik(r-z)}}{r^2}$:

$$\vec{j} = N^2 \frac{\hbar k}{m} \left[\vec{e}_z + \frac{|f|^2}{r} \vec{e}_r + \Re \left\{ f \frac{e^{ik(r-z)}}{r} (\vec{e}_r \vec{e}_z) \right\} \right]$$

Es muß gelten:

$$\oint d\vec{\sigma} (\vec{j}_{int} + \vec{j}_s) = 0 \quad \iff \quad \oint d\vec{\sigma} \vec{j}_{int} = - \oint d\vec{\sigma} \vec{j}_s$$

Wir rechnen nun zunächst $\oint d\vec{\sigma} \vec{j}_{int}$ aus und vergleichen es dann mit $\oint d\vec{\sigma} \vec{j}_s$. Sei $\vartheta =$ Winkel zwischen \vec{e}_r und \vec{e}_z und ϵ beliebig klein:

$$\begin{aligned} \oint d\vec{\sigma} \vec{j}_{int} &= |j_{in}^{\vec{}}| \Re \left\{ \int r^2 d\Omega f \frac{e^{ik(r-z)}}{r} (\vec{e}_z + \vec{e}_r) \vec{e}_r \right\} \\ &= |j_{int}^{\vec{}}| r \Re \left\{ \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d\cos\vartheta e^{ikr(1-\cos\vartheta)} (\cos\vartheta + 1) f(\vartheta, \varphi) \right\} \end{aligned}$$

Für $r \rightarrow \infty$ geht dies über in:

$$\begin{aligned} & |j_{int}^{\vec{r}}| + \Re \left\{ 2\pi 2f(0) \int_{1-\epsilon}^1 dx e^{ikr(1-x)} \right\} \\ &= -|j_{int}^{\vec{r}}| r 4\pi \Re \left\{ f(0) \frac{1}{ikr} (1 - e^{ikr\epsilon}) \right\} \end{aligned}$$

$e^{ikr\epsilon}$ trägt nach Faltung mit $A_{k_0}(\vec{k})$ nichts bei.

$$\oint d\vec{\omega} j_{int}^{\vec{r}} = -\frac{4\pi}{k} \Im \{f(0)\} |j_{in}^{\vec{r}}|$$

Der Vergleich mit $\oint d\vec{\omega} j_s^{\vec{r}} = |j_{in}^{\vec{r}}| \sigma$ liefert nun das **optische Theorem**:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \Im \{f(\mathbf{0})\}$$

Die Analogie zur Optik besteht durch Ersetzen von f durch n (Brechungsindex). $\Im\{f\} \leftrightarrow \Im\{n\}$ entspricht der Absorption.

Anmerkungen:

- Bei Streuung besitzt f stets einen Imaginärteil ($\Im\{f(0)\} \neq 0$).
- Das optische Theorem gilt auch bei inelastischer Streuung (Streuung mit Absorption). $\sigma \rightarrow \sigma_{tot} = \sigma_{elast} + \sigma_{inel}$, $\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \Im\{f_{el}(0)\}$.
- Das optische Theorem ist nur sinnvoll bei Potentialen mit endlicher Reichweite. Wenn $R = \infty$, dann ist auch $\sigma_{tot} = \infty$ (z.B. beim Coulomb-Potential).

Im folgenden wenden wir uns der Bestimmung der $f(\vartheta, \varphi)$ zu. Dabei gibt es im wesentlichen zwei Methoden.

1. Lösen der Schrödingergleichung mit Randbedingungen
2. Umwandlung der Schrödingergleichung in eine äquivalente Integralgleichung, die man iterativ löst (Bornsche Reihe).

1.3 Streutheorie mit Integralgleichungen

1.3.1 Greensche Funktionen

Sei D ein linearer Differentialoperator. Gesucht ist die Lösung der folgenden Gleichung, wenn $f(\vec{x})$ eine gegebene Funktion ist.

$$D\psi(\vec{x}) = f(\vec{x})$$

Die allgemeine Lösung lautet:

$$\psi(\vec{x}) = \underbrace{\psi_0(\vec{x})}_{\text{homogen}} + \int d^3x' G(\vec{x}, \vec{x}') f(\vec{x}') \quad (1)$$

G ist die Lösung von:

$$D_x G(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

Man nennt G die **Greenfunktion** des Operators D . G ist nicht eindeutig bestimmt, $G' = G + H$, mit $DH = 0$ ist ebenfalls Greenfunktion.

G ist bestimmt durch:

- den Operator D
- die Wahl der Randbedingungen gemäß der physikalischen Problemstellung.

1.3.2 Integralgleichung für Streutheorie

Wir betrachten ein stationäres Problem, elastische Streuung, ein Teilchen ohne Spin, das eine Wechselwirkung erfährt durch ein Potential $V(\vec{x})$ endlicher Reichweite.

Die Schrödingergleichung lautet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Mit $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $E > 0$ und $U(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{x})$ wird sie zu:

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{x}) = U(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

Sei nun $G(\vec{x}, \vec{x}')$ die Greenfunktion von $D = \Delta + k^2$. Dann gilt:

$$(\Delta + k^2)G(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

Infolgedessen kann man die Schrödingergleichung in eine Integralgleichung umwandeln, indem man $f(\vec{x}) = U(\vec{x})\psi(\vec{x})$ aus der Gleichung (1) setzt.

$$\psi(\vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) + \int d^3 \mathbf{x}' \mathbf{G}(\vec{x}, \vec{x}') \mathbf{U}(\vec{x}') \psi(\vec{x}')$$

ψ_0 entspricht hierbei der Lösung der freien Schrödingergleichung zu $U = 0$. Der Vorteil dieser Umwandlung liegt darin, daß sie ein einfaches Näherungsverfahren erlaubt. Als Greensche Funktion wird (wie später gezeigt werden wird) gewählt:

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i k |\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

G_+ stellt eine auslaufende, G_- eine einlaufende Kugelwelle dar. Da die Lösung eines Streuproblems wohl einer auslaufenden Welle entspricht, wird G_+ gewählt. Die Integralgleichung für ein Streuproblem mit einer einlaufenden ebenen Welle $\psi_0(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}}$ lautet nun:

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 \mathbf{x}' \frac{e^{i k |\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \mathbf{V}(\vec{x}') \psi(\vec{x}')$$

Dies ist die **Lippmann–Schwinger–Gleichung** (LS–Gleichung).

Wenn $V(\vec{x}')$ um $\vec{x}' = 0$ lokalisiert ist, dann gilt für große $|\vec{x}| =: r$, $|\vec{x}'| =: r'$:

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec{x}\vec{x}'} \simeq r \left(1 - \frac{\vec{x}\vec{x}'}{r^2} \right)$$

Wir vereinfachen nun das Integral in der LS–Gleichung:

$$\begin{aligned} \int d^3 x' \frac{e^{i k |\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}') &= \frac{e^{i k r}}{r} \int d^3 x' \frac{e^{-i k \frac{\vec{x}\vec{x}'}{r}}}{1 - \underbrace{\frac{\vec{x}\vec{x}'}{r^2}}_{\simeq 0}} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}') \\ &= \frac{e^{i k r}}{r} \int d^3 x' e^{-i \vec{k}' \vec{x}'} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}') \end{aligned}$$

Durch Vergleich mit:

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

ergibt sich $f(\vartheta, \varphi)$ zu:

$$\boxed{f(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\vec{k}'\vec{x}'} \mathbf{V}(\vec{x}') \psi(\vec{x}')} \quad (2)$$

1.3.3 Bornsche Näherung

Die Lippmann–Schwinger–Gleichung kann (näherungsweise) durch Iteration gelöst werden. Die LS-Gleichung lautet:

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi(\vec{x}')$$

Wir starten bei $\psi_1(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}}$. Nun gilt für $\psi_2(\vec{x})$:

$$\psi_2(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\vec{x}} + \int d^3x' G_+(\vec{x}-\vec{x}') U(\vec{x}') \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{x}'}}_{\psi_1(\vec{x}'')}$$

$$\psi_3(\vec{x}) = \psi_2(\vec{x}) + \int d^3x' \int d^3x'' G_+(\vec{x}-\vec{x}') U(\vec{x}') G_+(\vec{x}'-\vec{x}'') U(\vec{x}'') e^{i\vec{k}\vec{x}''}$$

Und so weiter... Analog geht es für $f(\vartheta, \varphi)$. Wenn wir nun die ψ_i in die Gleichung (2) einsetzen, so bekommen wir die f_i in i -ter Bornschen Näherung.

1. Bornsche Näherung:

$$\boxed{f_1(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{x}'} V(\vec{x}')} \quad (2)$$

f_1 ist die Fouriertransformierte des Potentials V .

$$f_1 = \tilde{V}(\vec{k}-\vec{k}') \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2} (2\pi)^{\frac{3}{2}}\right).$$

Anmerkungen:

- f_1 (1. Bornsche Näherung) ist reell, d.h. $\Im \{f_1(0)\} = 0$. Das optische Theorem ist verletzt. Es erlangt jedoch durch die höheren Ordnungen wieder seine Gültigkeit.
- Jede Ordnung liefert einen Faktor $V(\vec{x})$. Daher sind schwache Potentiale ($V \ll E$) geeignete Anwendungsgebiete.

Nun holen wir die **Bestimmung der Greenschen Funktion** G_+ nach:

Wir wollen die Greenfunktion, welche die folgende Gleichung löst, bestimmen:

$$(\Delta + k^2)G(\vec{x} - \vec{x}') = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \quad (3)$$

Wir kennen die Fouriertransformierte der Deltafunktion:

$$\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\vec{q}(\vec{x} - \vec{x}')}$$

Also machen wir jetzt einen Fourier-Ansatz für G_+ :

$$G(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3q \tilde{G}(q) e^{i\vec{q}(\vec{x} - \vec{x}')}$$

(3) ist nun äquivalent zu:

$$\int d^3q \underbrace{\left[(-q^2 + k^2)\tilde{G}(q) - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \right]}_{=0} e^{i\vec{q}(\vec{x} - \vec{x}')} = 0$$

$$\Leftrightarrow \tilde{G} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}(k^2 - q^2)}$$

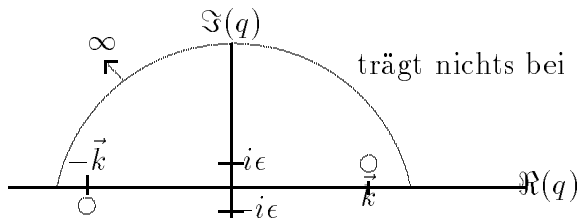
Diese Äquivalenz ist allerdings eine “Physikeräquivalenz”, mathematisch ist das gar nicht definiert, daher benötigt man $\pm\epsilon$. Die Fourier-Rücktransformation liefert jetzt G_+ . Um G_+ integrieren zu können, führen wir im Nenner ein $\pm i\epsilon$ ein und berechnen $\lim_{\epsilon \rightarrow 0}$:

$$G_{\pm}(\vec{x} - \vec{x}') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{1}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} e^{i\vec{q}(\vec{x} - \vec{x}')}$$

Diese Funktion hat Pole bei $|\vec{k}| = |\vec{q}|$, daher können wir das Integral mit Hilfe des Residuensatzes berechnen. Sei nun $|\vec{x} - \vec{x}'| =: r$ und der Winkel zwischen \vec{q} und $(\vec{x} - \vec{x}') = \vartheta$, so gilt:

$$\begin{aligned} G_{\pm} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dq q^2 \int_{-1}^1 d\cos\vartheta \frac{e^{i r \cos\vartheta q}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \\ &= \frac{2}{4\pi^2 i r} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{q}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} e^{iqr} \end{aligned}$$

Die Pole liegen jetzt bei $q = \pm\sqrt{k^2 \pm i\epsilon}$ —für $G_+ : q = \pm(k + i\epsilon)$.



Aus dem Residuensatz folgt nun:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \underbrace{\frac{e^{iqr} q}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon}}_{=: f(q)} = 2\pi i \text{Res}\{f(q = k + i\epsilon)\} = i\pi e^{ikr} \underbrace{e^{-i\epsilon r}}_{\rightarrow 0} \implies G_+$$

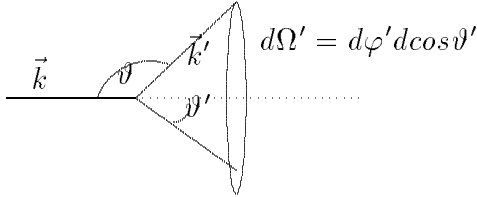
Analog geht man bei der Bestimmung von G_- vor.

Wir wenden nun die Bornsche Näherung auf die Streuung am Yukawa- und Coulomb-Potential an:

- Yukawa-Potential:** $V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{r}$, $\mu > 0$ Die Reichweite ist $R = \frac{1}{\mu}$. Es enthält also als Grenzfall das Coulomb-Potential ($\mu = 0$).

1. Bornsche Näherung:

$$f_1(\vartheta) = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} dr r^2 \int d\Omega \frac{e^{-\mu r}}{r} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}} \quad (4)$$



Jetzt setzen wir: $\vec{q} := \vec{k} - \vec{k}'$, $q\vec{x} := qr\cos\vartheta'$ und den Winkel zwischen $(\vec{k}$ und \vec{k}' als ϑ

ACHTUNG: nicht ϑ' und ϑ verwechseln! ϑ ist die Winkelabhängigkeit von $f(\vartheta)$ und ϑ' ist die Integrationsvariable von $d\Omega$.

$$q^2 = k^2 + k'^2 - 2kk'(\cos\vartheta) = 4k^2 \left(\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right)$$

Jetzt wird (4) zu:

$$\begin{aligned} f_1(\vartheta) &= -\frac{mV_0}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r e^{-\mu r} \underbrace{\int_{-1}^1 d\cos\vartheta' e^{iqr\cos\vartheta'}}_{= \frac{1}{iqr}(e^{iqr} - e^{-iqr})} \\ &= -\frac{mV_0}{i\hbar^2 q} \left[\frac{1}{\mu - iq} - \frac{1}{\mu + iq} \right] \end{aligned}$$

$$f(\vartheta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{1}{4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} + \mu^2}$$

Der Wirkungsquerschnitt lautet:

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} \right| = |f(\vartheta)|^2 = \frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{(4k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2} + \mu^2)^2}$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist endlich für $\mu \neq 0$.

2. Coulomb-Potential:

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\mu=0} = \frac{m^2 V_0^2}{4|\vec{p}|^4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} = \infty$$

Kuriositäten des Coulomb-Potentials:

- $\sigma = \infty$ (\Leftrightarrow unendliche Reichweite)
- Ein quantenmechanisches Ergebnis entspricht einem klassischen Ergebnis (\hbar tritt nicht auf)
- Die 1. Bornsche Näherung liefert bereits das exakte Ergebnis für den Wirkungsquerschnitt. Der Grund ist, daß alle höheren Ordnungen in die Phase der Streuamplitude gehen.
- Alle Probleme mit $R = \infty$ sind in der Phase von $f(\vartheta)$.

1.3.4 Darstellungsfreie Formulierung

Die stationäre Schrödingergleichung lautet:

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} \quad (5)$$

Ein freier Zustand $|\vec{k}\rangle$ erfüllt: $H_0 |\vec{k}\rangle = E |\vec{k}\rangle$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Wir können nun die Schrödingergleichung umschreiben:

$$(E - H_0) |\psi\rangle = V |\psi\rangle$$

Nun dividieren wir formal durch den Operator $(E - H_0)$. Bei der Division müssen wir bedenken, daß die freie Lösung $|\vec{k}\rangle$ hinzukommt, da $(E - H_0) |\vec{k}\rangle = 0$.

$$|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle + \underbrace{(E - H_0)^{-1} V |\psi\rangle}_{=: G_E}$$

Es gilt: $(E - H_0)G_E = 1$ analog zur Greenfunktion. G_E existiert nicht, wenn $E \notin \text{Spektrum}(H_0) \equiv R_+$. Aber es gibt eine Funktion R , mit (symbolisch Schreibweise):

$$R(Z) = \frac{1}{Z - H_0}, \quad \forall Z \in \mathbb{C}, Z \notin \text{Spektrum}(H_0)$$

$R(Z)$ ist tatsächlich ein Operator, da eben $Z \notin \text{Spektrum}(H_0)$. R nennt man die **Resolvente** von H_0 . Wir definieren jetzt:

$$G_E^\pm := \lim_{Z \rightarrow E \pm i\epsilon} R(Z) = \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}, \quad \epsilon > 0$$

G_E^+ entspricht dem auslaufenden Streuzustand, daher ist dies die natürliche Wahl für das Streuproblem. Wir können jetzt also die darstellungsfreie Lippmann–Schwinger–Gleichung aufstellen:

$$\boxed{|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |\psi\rangle} \quad (6)$$

Die Ortsdarstellung erhalten wir jetzt durch multiplizieren mit $\langle \vec{x} |$:

$$\underbrace{\langle \vec{x} | \psi \rangle}_{\psi(\vec{x})} = \underbrace{\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle}_{e^{i\vec{k}\vec{x}}} + \langle \vec{x} | G_E^+ V |\psi\rangle$$

Durch Einschreiben von $|x'\rangle\langle x'|$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &= e^{i\vec{k}\vec{x}} + \int d^3x' \underbrace{\langle \vec{x} | G_E^+ | \vec{x}' \rangle}_{\sim G_+(\vec{x}-\vec{x}')} \underbrace{\langle \vec{x}' | V | \psi \rangle}_{V(\vec{x}')\psi(\vec{x}')} \\ \langle \vec{x}' | V | \psi \rangle &= \int d^3x'' \underbrace{\langle \vec{x}' | V | \vec{x}'' \rangle}_{V(\vec{x}')\delta^3(\vec{x}'-\vec{x}'')} \underbrace{\langle \vec{x}'' | \psi \rangle}_{\psi(\vec{x}'')} \end{aligned}$$

Die Lösung von (6) erhalten wir wieder durch Iteration und ist die Bornsche Reihe:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\vec{k}\rangle + G_E^+ V |\vec{k}\rangle + G_E^+ V G_E^+ V |\vec{k}\rangle + \dots \\ &= (1 + G_E^+ V + (G_E^+ V) G_E^+ V + \dots) |\vec{k}\rangle \end{aligned}$$

Das ist eine geometrische Reihe. Wir erhalten die LSG durch formales Aufsummieren:

$$\boxed{|\psi\rangle = \frac{1}{1 - G_E^+ V} |\vec{k}\rangle}$$

$$\frac{1}{1 - G_E^+ V} =: \Omega^+ \text{ nennt man auch den } \mathbf{M\ddot{o}ller\text{-}Operator}.$$

Wir können jetzt auch noch den T-Operator einführen:

$$\boxed{T_E := V \Omega^+ = V \frac{1}{1 - G_E^+ V}}$$

Formal gilt also: $T_E = V + T_E G_E^+ V$ (Den Nachweis führt man durch Entwicklung in eine Reihe. Das führt auf die Bornsche Reihe für $f(\vartheta, \varphi)$).

$$\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle =: T_E(\vec{k}', \vec{k})$$

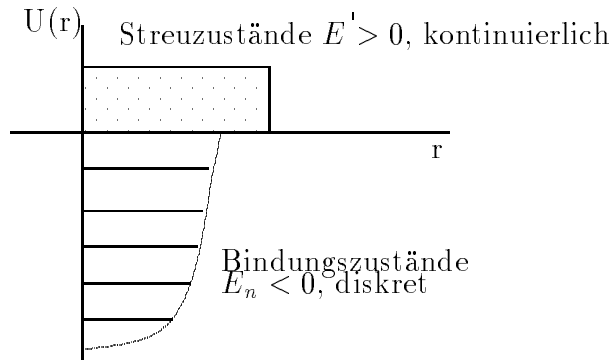
$$f(\vartheta, \varphi) \sim T_E(\vec{k}', \vec{k}) \Big|_{|\vec{k}'|=|\vec{k}|}$$

Dies führt auf die formale Streutheorie und auf die analytischen Eigenschaften von f (Dispersions-Relation)

Wichtige Eigenschaften von T_E :

T_E als Funktion von E ist singulär, das heißt existiert nicht, hat Polstelle oder ähnliches, also die Inverse einer nicht invertierbaren Abbildung bildet, wenn

$$\det[1 - G_E^+ V] = 0 = \frac{1}{\det[E - H_0 - V]} \det[E - H_0 - V], \quad H_0 + V \equiv H$$



- $E > 0$: Eigenwert von H_0 und H , gemeinsame Nullstellen von Zähler und Nenner
- $E < 0$: $E = E_1 < 0$ aus diskretem Spektrum. E_n ist Eigenwert von H , nicht von $H_0 \implies T_E$ ist singulär.

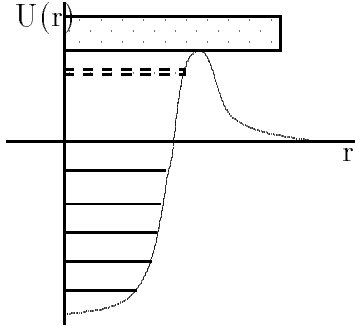
$\implies f_E$ hat Pole bei E_n : $f_e \sim \frac{1}{E - E_n}$ Die Streuamplitude als Funktion von E hat Pole bei $E = E_n$, wobei $E_n < 0$ die Energie der Bindungszustände ist.

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f_E \frac{e^{ikr}}{r}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$E < 0 : \sqrt{E} : \rightarrow k \rightarrow i|\vec{k}| = i\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f_E \frac{e^{-kr}}{r}$$

Das ist eine exponentiell abfallende, getrennte Welle. Das entspricht einer gebundenen Welle. $\Rightarrow f$ als Funktion von k hat Pole auf der positiven Imaginären Achse für Bindungszustände. Die Umkehrung gilt nicht, d.h. nicht jeder Pol von f_E entspricht einem Bindungszustand, z.B. Resonanzen.



1.4 Partialwellenzerlegung

Entwicklung der Wellenfunktion nach Eigenfunktionen von \vec{L}^2, L_z

1.4.1 Sphärische Lösungen der freien Schrödingergleichung

Wir schreiben zunächst den Hamilton-Operator um, so daß er einen Term hat, der nur nach r ableitet und einen Term, der nur nach ϑ, φ ableitet:

$$\text{stationäre SRG: } H_0\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}), \quad H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

$$H_0\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \partial_r^2 (r\psi) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} \psi$$

$$[H_0, \vec{L}^2] = [H_0, L_z] = 0 \implies H_0, \vec{L}^2, L_z \text{ haben gemeinsame Eigenfunktionen.}$$

Daher können wir jetzt die Wellenfunktion zerlegen:

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$\begin{aligned}\vec{L}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \dots \\ L_z Y_{lm} &= m \hbar Y_{lm}, \quad m = -l, -l+1, \dots, l\end{aligned}$$

Die Radialgleichung für die $R(r)$ lautet nun:

$$\frac{1}{r} \partial_r^2 (rR) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad E > 0$$

Wir setzen: $kr =: \rho$ und $R(r) = R(\frac{\rho}{k}) =: \chi(\rho)$ und erhalten so die **sphärische Bessel-Differentialgleichung**:

$$\boxed{\frac{d^2 \chi}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\chi}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \chi = 0} \quad (7)$$

Diese DGL hat zwei linear unabhängige Lösungen:

1. **Sphärische Besselfunktionen** $j_l(\rho)$:

$$j_l(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow 0}{\simeq} \frac{\rho^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1)} = \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}$$

2. **Sphärische Neumannfunktionen** $n_l(\rho)$:

$$n_l(\rho) \stackrel{\rho \rightarrow 0}{\simeq} \frac{(2l+1)!!}{2l+1} \frac{1}{\rho^{l+1}}$$

Die asymptotischen Lösungen für große ρ lauten:

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right) \quad n_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right)$$

Die Randbedingung für ein physikalisches System lautet: $\lim_{r \rightarrow 0} rR(r) = 0$. das ist der Fall, wenn: $R \stackrel{r \rightarrow 0}{\rightarrow} const$. Daher sind die Neumannfunktionen keine Lösung des Eigenwertproblems. Der Grund ist, daß die n_l keine Eigenfunktionen von H_0 sind. (Beispiel: $n_0 = \frac{\cos kr}{kr} \simeq \frac{1}{kr}$, für $r \rightarrow 0$. $\Delta(\frac{1}{r}) = -4\pi\delta^3(0)$). Für physikalische Probleme kommen also nur die j_l in Betracht.

$$l = 0 : \quad j_0(\rho) = \frac{u(\rho)}{\rho} \longrightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} + u = 0 \implies u = \begin{cases} \sin \rho \\ \cos \rho \end{cases}$$

$$j_0 = \frac{\sin \rho}{\rho}, \quad n_0 = \frac{\cos \rho}{\rho}$$

$$l \geq 1: \quad j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}$$

(Beweis durch vollständige Induktion)

Die **normierten Eigenfunktionen** von H_0 lauten jetzt:

$$\psi_{\mathbf{k}lm}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Das sind freie sphärische Wellen. Sie sind:

- orthonormiert: $\int d^3x \psi_{klm}^*(\vec{x}) \psi_{k'l'm'}(\vec{x}) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(k - k')$
- vollständig: $\sum_{l,m} \int d^3x \psi_{klm}^*(\vec{x}') \psi_{klm}(\vec{x}) = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')$

Wir entwickeln nun $e^{i\vec{k}\vec{x}}$ nach sphärischen Wellen:

$$e^{i\vec{k}\vec{x}} = \sum_{l,m} c_{lm} \psi_{klm}(\vec{x}), \quad c_{lm} = \int d^3x \psi_{klm}^*(\vec{x}) e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

Es sei $\vec{k} = k\vec{e}_z$. Daher existiert keine φ -Abhängigkeit:

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

1.4.2 Streulösungen bei $V \neq 0$

Es werden hier zwei verschiedene Zugänge zu diesem Kapitel gegeben. Der erste ist der, den Prof Hollik in der Vorlesung brachte, der zweite ist ein Zugang, der auf einen Vorschlag von Dominik Stöckinger zurückgeht.

1. Sei V ein Potential mit endlicher Reichweite. Die SRG lautet:

$$[H_0 + V(\vec{x})]\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

Wir beschränken uns auf ein $V(\vec{x}) = V(r)$, es muß gelten: $[H, \vec{L}^2] = [H, L_z] = 0$. Nun gilt:

$$\phi_{klm}(\vec{x}) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Es sei $E > 0$, das entspricht den Streuzuständen ($E < 0$ entspricht den Bindungszuständen). Lösen der Radialgleichung für $R_{kl}(r)$ zusammen mit der Randbedingung $\lim_{r \rightarrow 0} rR(r) = 0$ liefert die **Partialwellen** $\phi_{klm}(\vec{x})$:

Wir machen einen Ansatz $R_{kl} = \frac{u_{kl}(r)}{r}$:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{kl} = \left[U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{kl}, \quad U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$$

Die asymptotischen Lösungen sind: $\frac{\sin kr}{r}$ und $\frac{\cos kr}{r}$, (für große r). Die allgemeine asymptotische Lösung (ohne Nenner) ist eine Linearkombination mit beliebigen Konstanten c_l, δ_l :

$$\mathbf{u}_{kl}(\mathbf{r}) = \mathbf{c}_l \sin(\mathbf{kr} - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$$

Der einzige Unterschied zu den freien Lösungen ist die Phasenverschiebung δ_l , welche man die **Streuphase** nennt.

Wie bestimmt man nun diese δ_l ? Zunächst löst man die Radialgleichung zu gegebenen $V(r)$ mit der Randbedingung $u_{kl}(0) = 0$. Dies führt auf eine Lösung, die bis auf die Normierung eindeutig ist. Man muß die Lösung stetig differenzierbar an die asymptotische Lösung $\sim \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$ anschließen.

Wir rechnen nun ein **Beispiel**: $V(r) = 0, \quad r > R_0$

Sei u_i die Lösung im Innenraum und u_a die Lösung im Außenraum. Dann lauten die Anschlußbedingungen:

$$u_i(R_0) = u_a(R_0), \quad u'_i(R_0) = u'_a(R_0)$$

Im folgenden seien die δ_l bekannt. Die asymptotische Form der Streulösungen lautet:

$$\psi_a = \sum_l c_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} \cdot \underbrace{\sum_m \alpha_m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)}_{P_l(\cos\vartheta) \text{ bei Kugelsymmetrie}} \quad (8)$$

Andererseits gilt auch für die Streuphase:

$$\psi_a \simeq e^{ikz} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$f(\vartheta) = \sum_l b_l P_l(\cos\vartheta)$$

Dies ist eine Entwicklung einer beliebigen Funktion nach Legendrepoly-nomen.

$$e^{ikz} \simeq \sum_l i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos\vartheta)$$

$$\psi_a(r, \vartheta, \phi) \simeq \frac{1}{r} \sum_l \left(\left[\frac{2l+1}{2k} (-i)^l + b_l \right] e^{ikr} - \frac{2l+1}{2k} i^{2l-1} e^{-ikr} \right) P_l(\cos\vartheta)$$

Die asymptotische Form lautet andererseits nach (8):

$$\psi_a \simeq \sum_l c_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos\vartheta)$$

$$= \frac{1}{r} \sum_l \frac{c_l}{2} [(-i)^{l+1} e^{i\delta_l} e^{ikr} - i^{l-1} e^{-i\delta_l} e^{-ikr}] P_l(\cos\vartheta)$$

Koeffizientenvergleich liefert (nach b_l bzw. c_l aufgelöst):

$$c_l = \frac{2l+1}{k} i^l e^{i\delta_l}, \quad b_l = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l$$

$$\mathbf{f}(\vartheta) = \sum_l \mathbf{b}_l \mathbf{P}_l(\mathbf{cos}\vartheta)$$

(9)

$$\psi_a = \sum_l \frac{2l+1}{k} \left\{ (-i)^l e^{2i\delta_l} \frac{e^{ikr}}{r} - i^{2l-1} \frac{e^{-ikr}}{r} \right\} P_l$$

$$e^{ikz} \simeq \sum_l \frac{2l+1}{k} \left\{ (-i)^l \frac{e^{ikr}}{r} - i^{2l-1} \frac{e^{-ikr}}{r} \right\} P_l$$

Man sieht durch den Vergleich mit der freien Lösung den Effekt des Potentials. Es bewirkt eine Phasenverschiebung der auslaufenden l-Welle.

2. Nun der zweite Weg. Zunächst wird versucht, plausibel zu machen, warum der erste Weg nicht so gelungen ist:

- Die Herleitungen sind sehr verschlungen, kompliziert und unsystematisch.
- Wozu wird etwa Φ_{klm} eingeführt, was vorher und nachher **nie** benutzt wird?
- Der Ansatz $\psi_{klm} = R_{kl}Y_{lm}$ wird sooft gemacht und wieder aufgehoben, daß es nicht zu durchschauen ist.
- Was hat es mit dem Beispiel auf sich? Die Bedingung, die dann folgt, ist ja allgemeingültig.

Das Ziel des Kapitels ist:

- Streuphasen δ_l einführen
- mit den δ_l die asymptotische Form der ψ aufschreiben
- daraus die Form von $f(\vartheta)$ ableiten (siehe 1.4.3)

V habe unendliche Reichweite und sei kugelsymmetrisch. $V = V(r)$. Dann ist $[H, \vec{L}^2] = [H, \vec{L}] = 0$. Dann kann man jede Lösung der Schrödingergleichung nach Drehimpulseigenzuständen entwickeln. Die Drehimpulseigenzustände haben die Form:

$$R_{kl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \phi)$$

wobei R_{kl} die Radialgleichung löst.

$$(\partial_r^2 + k^2)u_{kl} = \left(U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{kl}$$

Sie wird einfach mit dem Ansatz:

$$R_{kl} = \frac{u_{kl}}{r}$$

Diese Gleichung hat asymptotisch die beiden Lösungen $\sin kr$ und $\cos kr$. Aber insgesamt hat sie wegen der Randbedingung $\lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$ nur **eine** eindeutige Lösung (bis auf Verfielfachung). Diese eine Lösung

$u_{kl}(r)$ muß als asymptotischen Verlauf eine Linearkombination von $\sin kr$ und $\cos kr$ besitzen, also:

$$u_{kl}(r) \simeq c_l \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$$

mit eindeutigem δ_l .

Diese eindeutig durch $U(r)$ und die Randbedingung bestimmte δ_l heißt **Streuphase**.

Um die Streuphase zu bestimmen, muß man prinzipiell die Schrödingergleichung exakt lösen. Dies läuft darauf hinaus, eine exakte Lösung $u_i(r)$ im Innenbereich zu finden und daran die Außenlösung $u_a(r) = c_l \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)$ stetig differenzierbar anzuschließen. Also folgende Gleichungen zu lösen:

$$\begin{aligned} \frac{u'_i(R)}{u_i(R)} &= \frac{u'_a(R)}{u_a(R)} \\ u_i(R) &= u_a(R) \end{aligned}$$

Im folgenden seien die δ_l bekannt. Ganz allgemein ergibt sich also für eine beliebige Lösung der Schrödingergleichung folgende asymptotische Form:

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_l c_l \frac{u_{kl}(r)}{kr} \underbrace{\sum_m \alpha_m Y_{lm}}_{P_l(\cos \vartheta)} \\ &\simeq \sum_l c_l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l)}{kr} P_l(\cos \vartheta) \end{aligned} \quad (10)$$

Zum einen fordert man aber von "Streulösungen" die ganz bestimmte asymptotische Form:

$$\psi \simeq e^{ikz} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11)$$

Beide Gleichungen (10),(11) müssen also gelten. Da (10) für jede Lösung der Schrödingergleichung gilt und (11) nicht, ergeben sich daraus Bedingungen für c_l, b_l, δ_l :

$f(\vartheta)$ läßt sich nach Legendre-Polynomen entwickeln:

$$f(\vartheta) = \sum b_l P_l(\cos \vartheta)$$

Damit wird (10) und (11) auf die entsprechende Form gebracht: wenn man in (10) $\sin x = \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix})$ setzt wird (10) zu:

$$(10) \iff \psi \simeq \sum \frac{c_l}{2ik} \left[e^{(-l\frac{\pi}{2} + \delta_l)i} \frac{e^{ikr}}{r} - e^{(l\frac{\pi}{2} - \delta_l)i} \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l$$

$$(11) \iff \psi \simeq \sum \left[\left(\frac{2l+1}{2ik} + b_k \right) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{2l+1}{2k} i^{2l+1} \frac{e^{-ikr}}{r} \right] P_l$$

Dies ist die gleiche asymptotische Entwicklung. Also gilt:

$$\frac{c_l}{2ik} e^{il\frac{\pi}{2}i} e^{-i\delta_l} = \frac{2l+1}{2k} i^{2l-1}$$

und:

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

Daraus folgt also insbesondere:

$$\mathbf{f}(\vartheta) = \sum \mathbf{b}_l \mathbf{P}_l = \sum \frac{2l+1}{k} \mathbf{e}^{i\delta_l} \sin \delta_l \mathbf{P}_l$$

Und daraus der asymptotische Ausdruck für ψ .

1.4.3 Streuamplitude, Wirkungsquerschnitt

Für die Streuamplitude gilt, wenn man in (9) b_l einsetzt:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta)$$

Für den differentiellen und den totalen Wirkungsquerschnitt gilt nun:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 = \left| \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l P_{l'} \right|^2$$

$$\sigma = \int d\Omega |f(\vartheta)| = \sum_{l,l'} \dots \cdot 2\pi \underbrace{\int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x)}_{=\delta_{ll'} \frac{2}{2l+1}}$$

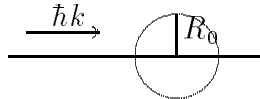
$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l$$

Jede Partialwelle liefert einen Beitrag σ_l .

$$\sigma_l \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$$

- Ergebnisse sind einfach, wenn δ_l bekannt sind.
- Die Hauptarbeit besteht darin, die Radialgleichung zu lösen und so die δ_l zu bestimmen.
- Dieses Verfahren ist dann nützlich, falls nur wenige l signifikant beitragen (bei niedrigen Energien).

Wir führen nun eine **Abschätzung für die l** durch (halb-klassisch).



Bei einem kugelsymmetrischen Potential endlicher Reichweite ($V(r) = 0, \quad r > R_0$) kann der Drehimpuls des einlaufenden Teilchens maximal $\hbar k R_0$ sein.

$$\iff \hbar \sqrt{l_{max}(l_{max} + 1)} \leq \hbar k R_0$$

Dies ist ganz grob der Fall, wenn $l_{max} \leq k R_0$.

Relevante l -Beiträge gibt es also nur bei **kleinen Energien** oder bei **kleinen Reichweiten**. Bei sehr kleinen Energien trägt nur die $l = 0$ (s-Welle) bei (eventuell auch die $l = 1$ (p-Welle)). Im folgenden sei nur die s- und p-Welle relevant:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} [e^{i\delta_0} \sin \delta_0 + 3e^{i\delta_1} \cos \vartheta] \sin \delta_1$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{1}{k^2} [\sin^2 \delta_0 + 6 \sin \delta_0 \sin \delta_1 \cos \vartheta + 9 \sin^2 \delta_1 \cos^2 \vartheta]$$

Dies ist ein Polynom in $\cos \vartheta$. Messungen liefern die δ_0, δ_1 . ($\Im\{f(0)\} > 0$) \rightarrow $f(\vartheta)$ als komplexe Größe. Bei verschiedenen k erhält man $\delta_l(k), f(\vartheta, k)$.

Anmerkungen und Ergänzungen:

1. **Optisches Theorem** (bei elastischer Streuung): ($P_l(1) = 1$)

$$\Im\{f(0)\} = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{k}{4\pi} \underbrace{\frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l}_{=\sigma}$$

$$\Leftrightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k} \Im\{f(0)\}$$

2. **Streuung mit Absorption:** Zunächst für elastische Streuung:

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |1 - e^{2i\delta_l}|^2$$

Wir führen jetzt das Streumatrixelement ein:

$$S_l(E) := e^{2i\delta_l}$$

Die Verallgemeinerung auf Streuung mit Absorption lautet:

$$S_l(E) = \eta_l e^{2i\delta_l}, \quad 0 \leq \eta_l \leq 1$$

$\eta_l = 1$ entspricht der elastischen Streuung, $\eta_l < 1$ entspricht einer Dämpfung. Absorption bedeutet, daß Teilchen aus der elastisch getreten Gesamtheit in andere Kanäle verschwinden.

Der elastische Wirkungsquerschnitt und die Streuamplitude lauten:

$$\sigma_{\text{el}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |1 - \eta_l e^{2i\delta_l}|^2$$

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \frac{\eta_l e^{2i\delta_l} - 1}{2i} P_l(\cos \vartheta)$$

$$\int d\Omega |f(\vartheta)|^2 = \sigma_{el} = \dots \text{ (obiges Ergebnis)}$$

Das Optische Theorem gilt auch für inelastische Streuung

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \Im\{f(0)\} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \underbrace{(1 - \eta_l \cos 2\delta_l)}_{1 - \Re\{\eta e^{2i\delta_l}\}}$$

Der inelastische Wirkungsgrad lautet nun:

$$\sigma_{inelast} = \sigma_{tot} - \sigma_{elast} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1)(1 - \eta_l^2) \geq 0$$

Betrachten wir nun die Extremfälle:

- $\eta_l = 1$: $\sigma_{inelast} = 0$, $\sigma_{tot} = \sigma_{elast}$ rein elastische Streuung.
- $\eta_l = 0 (l \leq L)$: $\sigma_{inelast} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l^L (2l+1) = \sigma_{elast}$ ein total absorbierendes "Potential". Allerdings ist im Gegensatz zur klassischen Physik, bei der bei Totalabsorption keine elastische Streuung auftritt ($\sigma_{tot} = 0$), $\sigma_{tot} = 2\sigma_{elast}$.

In der Quantenmechanik gibt es immer elastische Streuung. Das optische Analogon ist die Beugung an einer schwarzen Scheibe.

3. **Praktische Bestimmung der δ_l : ($\eta_l = 1$)** durch Lösen der Radialgleichung:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = \frac{2mV(r)}{\hbar^2} u = 0, \quad V(r) = 0, r > R$$

Wir gehen in 3 Schritten vor:

- (a) Lösung im Bereich $r < R$ mit Randbedingung $u(0) = 0$. Die Lösung ist bis auf die Normierung eindeutig: $u_i(r)$. Man erhält sie im allgemeinen numerisch.

(b) Lösung für $r > R$:

$$u_a(r) = AF_l(r) - BG_l(r)$$

$$F_l(r) = krj_l(kr); \text{ (Besselfunktionen)}$$

$$G_l(r) = krn_l(kr); \text{ (Neumannfunktionen)}$$

Für große r ist $u_a(r)$ (Normierung irrelevant):

$$u_a(r) \simeq A \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) - B \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right)$$

$$= C \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right), \quad \text{mit } \tan\delta_l = -\frac{B}{A}$$

(c) Festlegung von $\frac{B}{A}$ durch Anschlußbedingung bei $r = R$

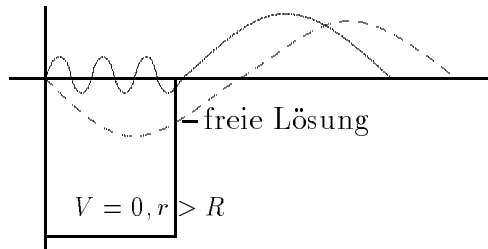
$$u_i(R) = u_a(R) = AF_l(R) - BG_l(R)$$

$$u'_i(R) = u'_a(R) = AF'_l(R) - BG'_l(R)$$

Dividieren dieser beiden Gleichungen bringt uns auf die Bedingung für $\tan\delta_l$:

$$\underbrace{\mathcal{L}(R)}_{= \frac{d}{dr} \log u(r)|_R} := \frac{u'(R)}{u(R)} = \frac{F'_l(R) - \frac{B}{A}G'_l(R)}{F_l(R) - \frac{B}{A}G_l(R)} \iff$$

$$\tan\delta_l = \frac{-F'_l(\mathbf{R}) - \mathcal{L}F_l(\mathbf{R})}{G'_l(\mathbf{R}) - \mathcal{L}G_l(\mathbf{R})}$$



4. Streuung bei niedrigen Energien:

$$k \rightarrow 0, \quad kR \rightarrow 0, \quad F'_l, F_l \sim k^{l+1}, \quad G_l, G'_l \sim k^{-l}$$

\mathcal{L} ist für $k \rightarrow 0$ (also kleine Energie) unabhängig von k . Die Lösungen $u_i(r)$ sind also durch V bestimmt. Wenn a_l k -unabhängige Konstanten sind, gilt:

$$\tan \delta_l = a_l k^{2l+1}$$

Bei kleinen k ist die s -Welle dominant. Für $l = 0$ gilt:

$$\tan \delta_0 = a_0 k$$

Mit a_0 als **Streulänge**. Für die Streuamplitude und den Wirkungsquerschnitt gilt:

$$f_0 = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 = \frac{a_0}{1 - ia_0 k}$$

$$\sigma = \sigma_0 = 4\pi \frac{a_0^2 + a_0^4 k^2}{(1 + a_0^2 k^2)^2} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi a_0^2$$

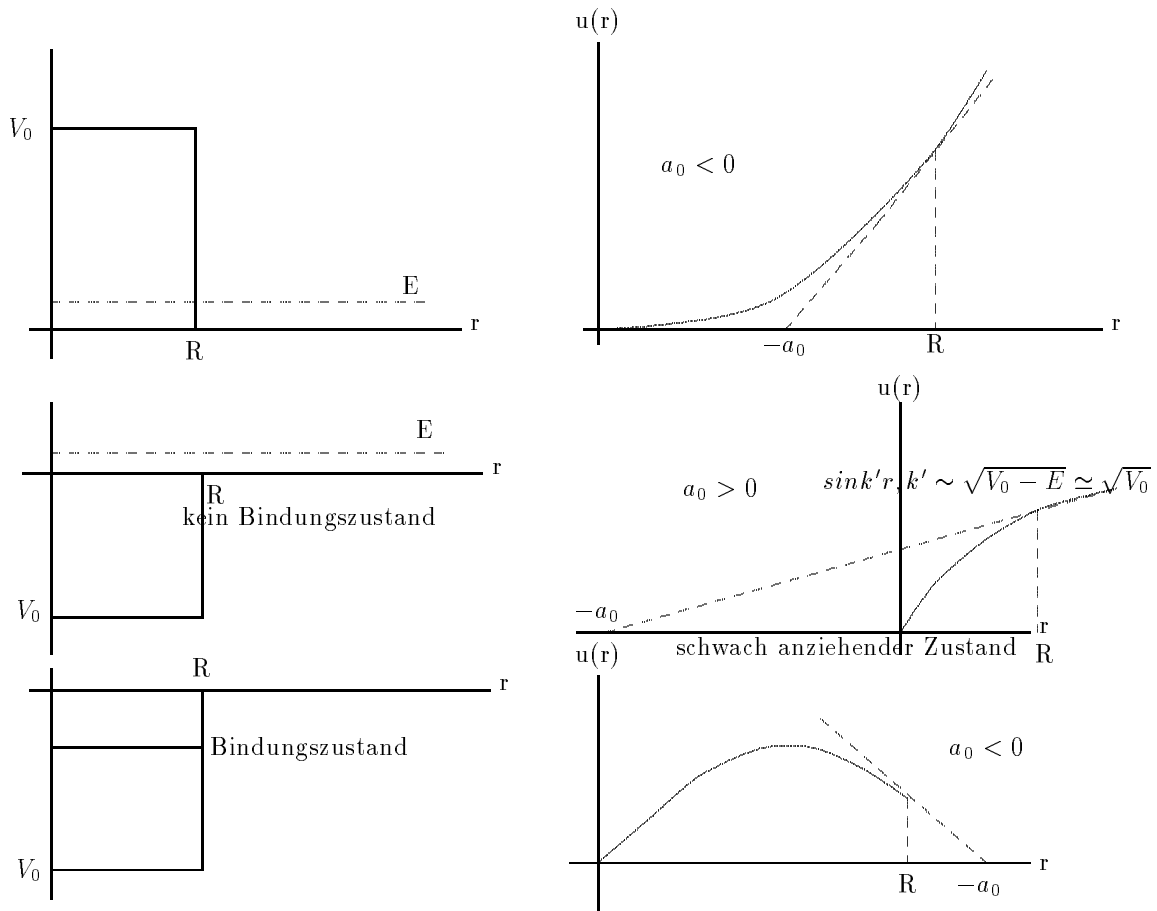
f_0 hat einen Pol bei $k_0 = -\frac{i}{a_0}$. Wenn $a_0 < 0$, dann ist der Pol auf der positiven imaginären Achse. Falls ein Bindungszustand existiert, gilt für die Bindungsenergie:

$$E_B = -\frac{\hbar^2 |k_0|^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}, \quad (\text{s-Zustand})$$

Warnung: hängt von der Qualität der Näherung $\tan \delta_0 = a_0 k$ ab. Diese ist gut, falls E_B nahe bei 0 ist (große Streulänge).

Die geometrische Bedeutung von a_0 :

$r < R$: $u_0 = \sin(kr + \delta_0) \simeq \sin k(r + a_0) \simeq k(r + a_0)$ Tangente im Punkt R

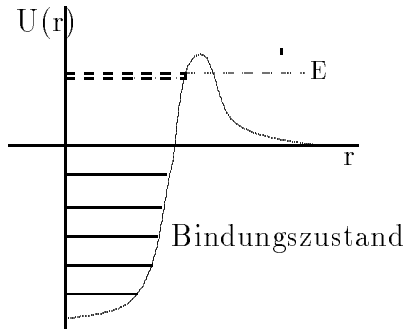


5. Resonanzen:

Fall: ein δ_l bei $E = E_0$: $\delta_l = \frac{\pi}{2}$ in der Umgebung von E_0 : $\tan \delta_l = \frac{\frac{\Gamma_l}{2}}{E_0 - E}$, $\Gamma_l = \text{const.}$

$$f_l(\vartheta) = \underbrace{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}_{\frac{\tan \delta_l}{1 - i \tan \delta_l} = \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_0 - E - i \frac{\Gamma}{2}}} \cdot \frac{2l + 1}{k} P_l(\cos \vartheta)$$

Pol bei $E_0 = E - i \frac{\Gamma_l}{2}$. Wenn die l-Welle dominant ist, gilt:



$$\sigma \simeq \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\frac{\Gamma_l^2}{4}}{(E_0 - E)^2 + \frac{\Gamma_l^2}{4}}$$

$\Gamma_l \ll E_0 : k^2 \rightarrow k_0^2 = \frac{2mE_0^2}{\hbar^2}$ (Mechanik: Resonanz bei Schwingungen)
 $\sigma_{max} = \sigma_l(E_0), \quad \sigma_l(E_0 \pm \frac{\Gamma_l}{2}) = \frac{\sigma_{max}}{2}$.

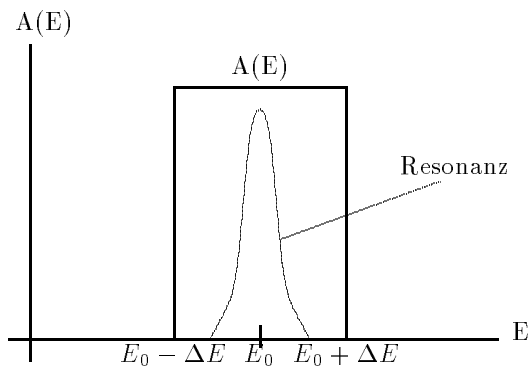
- $\delta_l(E_0) = \frac{\pi}{2}, \quad f_l(E_0)$ ist rein imaginär.
- $\delta_l(E_0) = \sigma_{max} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1)$
- Pol von f_l bei $E = E_0 - i\frac{\Gamma_l}{2}$

Zeitverhalten von Resonanzen:

$$\psi = \underbrace{e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l' \neq l} f_{l'}}_{\text{nicht resonant}} + \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r} \frac{\frac{\Gamma_l}{2}}{E_0 - E - i\frac{\Gamma_l}{2}} \frac{2l+1}{k} P_l(\cos\vartheta)}_{\text{resonant, } =: \psi_{res}(E, \vartheta)}$$

Ein Wellenpaket:

$$\int dE A(E) \psi_{res}(E, \vartheta) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$



Wenn $E_0 \ll \Delta E \ll \Gamma_l$ (hinreichend klein).

$$\begin{aligned} &\sim \int_{E_0-\Delta E}^{E_0+\Delta E} dE \frac{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{E_0 - E - i\Gamma_l/2} \frac{2l+1}{k_0} \frac{e^{ik_0 r}}{r} \simeq \frac{e^{ik_0 r}}{k_0 r} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{E_0 - E - i\frac{\Gamma_l}{2}} (2l+1) \\ &= \psi(E_0, \vec{x}) \phi(t) \end{aligned}$$

Für $t > 0$ gilt:

$$\phi(t) \sim \underbrace{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}_{\text{stat. Zustand}} \underbrace{e^{-\frac{\Gamma_l}{2\hbar}t}}_{\text{Dämpfung}}$$

$$|\phi|^2 \longrightarrow \text{Lebensdauer } \tau = \frac{\hbar}{\Gamma_l} \iff \tau \Gamma_l = \hbar$$

Eine Resonanz ist ein temporärer bindingsartiger Zustand mit endlicher Lebensdauer.

1.5 Zusammenfassung der Streutheorie

Wir wollen nochmal zusammenfassen, wie wir in der Streutheorie vorgegangen sind:

- Zunächst haben wir das zeitabhängige Problem in ein stationäres Problem umgewandelt durch Abseparieren von $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$.
- Dann beschränkten wir uns auf die asymptotische Lösung $\psi \simeq e^{ikz} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}$.
- Der Wirkungsquerschnitt lautet: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2$
- Zur Berechnung gab es zwei Möglichkeiten:
 1. Lösen der Lippmann–Schwinger–Gleichung durch Born–Iteration. Die 1. bornsche Näherung entspricht der Fouriertransformation des Potentials $f \sim \tilde{V}$.
 2. Durch Partialwellenzerlegung: $f = \sum_l b_l P_l(\cos\vartheta)$, $b_l(E)$

2 Symmetrien in der Quantenmechanik

In der klassischen Mechanik lieferte eine (kontinuierliche) Symmetrie eine Erhaltungsgröße (Integral der Bewegung). Je höher die Symmetrie war, desto einfacher wurde die Lösung der Bewegungsgleichung. In der Quantenmechanik liefert eine Symmetrie zum einen ebenfalls eine Erhaltungsgröße, aber zum andern auch Aussagen über die Eigenwerträume von Observablen. Dabei geht man in zwei Richtungen vor:

1. Wenn H bekannt und gegeben ist, erhält man über die Symmetrie die physikalischen Eigenschaften. Die Symmetrie stellt eine Vereinfachung des Problems dar.
2. Andererseits kann man, wenn man empirische Eigenschaften eines Systems kennt, die eine bestimmte Symmetrie zeigen, einen Ansatz für den Hamilton-Operator bekommen. Die Dynamik wird so (teilweise) erschließbar.

2.1 Transformationen von Observablen und Zuständen (auf \mathcal{H})

Einer Observablen entspricht ein Meßapparat, einem Zustand ein Präparierapparat. Unter der Transformation \mathcal{T} transformiert sich eine Observable: $A \longrightarrow \mathcal{T}(A) = A'$. Ein Zustand transformiert sich: $|\psi\rangle \longrightarrow \mathcal{T}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$. Eine Messung von A im Zustand $|\psi\rangle$ und eine Messung von A' im Zustand $|\psi'\rangle$ beinhalten dieselben physikalischen Aussagen.

Bedingung:

- Das Spektrum von A muß gleich dem Spektrum von A' sein.
- Für die Erwartungswerte muß gelten: $\langle \psi' | A' | \psi' \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$
- Für die Wahrscheinlichkeiten muß gelten: $|\langle \psi | \varphi \rangle|^2 = |\langle \psi' | \varphi' \rangle|^2$

Diese Bedingungen sind erfüllt, wenn \mathcal{T} durch einen unitären Operator \mathcal{U} dargestellt wird. Unitär bedeutet:

$$\mathcal{U}\mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}^\dagger\mathcal{U} = 1 \quad , \mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}^{-1}$$

Damit werden die Transformationen zu:

$$\boxed{|\psi\rangle \longrightarrow \mathcal{U}|\psi\rangle \quad , \mathbf{A} \longrightarrow \mathcal{U}\mathbf{A}\mathcal{U}^{-1} \quad , \langle\psi| \longrightarrow \langle\psi|\mathcal{U}^\dagger}$$

Der Beweis, daß die Bedingungen erfüllt sind, ist einfach:

$$\begin{aligned} \langle\varphi'|\psi'\rangle &= \langle\varphi|\overbrace{\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U}}^{=1}|\psi\rangle \\ \langle\psi'|A'|\psi'\rangle &= \langle\psi|\underbrace{\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U}}_{=1}A\underbrace{\mathcal{U}^\dagger\mathcal{U}}_{=1}|\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\text{Spektrum}(\mathcal{U}A\mathcal{U}^{-1}) = \text{Spektrum}(A)$$

Anmerkung: Die Bedingungen werden auch durch anti-unitäre Operatoren erfüllt. (Sie treten bei Zeitumkehr auf.)

$$\hat{U} \quad , \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = 1, \quad \text{anti-linear}$$

$$\hat{U}(\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha^*\hat{U}|\psi\rangle + \beta^*\hat{U}|\psi\rangle$$

Schauen wir uns nun an, wie sich die **Eigenvektoren von A** transformieren:

$$A|\varphi_\lambda\rangle = a_\lambda|\varphi_\lambda\rangle \implies \mathcal{U}|\varphi_\lambda\rangle = |\varphi'_\lambda\rangle$$

$|\varphi'_\lambda\rangle$ ist Eigenvektor von A' zum **gleichen** Eigenwert a_λ .

$$A'|\varphi'_\lambda\rangle = \mathcal{U}A\mathcal{U}^{-1}|\varphi'_\lambda\rangle = \mathcal{U}\underbrace{A|\varphi_\lambda\rangle}_{=a_\lambda|\varphi_\lambda\rangle} = a_\lambda\mathcal{U}|\varphi_\lambda\rangle = a_\lambda|\varphi'_\lambda\rangle$$

Die **Vertauschungsrelationen** gehen über in:

$$[A, B] = C \longrightarrow [A', B'] = C'$$

(Ausnahme bei anti-unitären Operatoren: $\hat{U} : [A', B'] = -C'$).

Von vorrangigem physikalischen Interesse ist entweder die Transformation von Observablen oder von Zuständen. Betrachten wir die Zustandstransformation:

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \mathcal{U}|\psi\rangle$$

$$\langle \psi' | A | \psi' \rangle = \langle \psi | \underbrace{\mathcal{U}^{-1} A \mathcal{U}}_{A'} | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi\rangle \quad ; A \longrightarrow \mathcal{U}^{-1} A \mathcal{U} \iff |\psi\rangle \longrightarrow \mathcal{U} |\psi\rangle \quad ; A \longrightarrow A$$

Wie lauten die **Gruppeneigenschaften von Transformationen**?

- Eine **Verknüpfung** $\mathcal{T}_1 \circ \mathcal{T}_2$ entspricht einer Hintereinanderausführung.
- Verknüpfungen sind **assoziativ**: $\mathcal{T}_1 \circ (\mathcal{T}_2 \circ \mathcal{T}_3) = (\mathcal{T}_1 \circ \mathcal{T}_2) \circ \mathcal{T}_3$
- Die **Identität** \mathcal{I} bewirkt nichts.
- Es existiert eine **inverse** Transformation mit: $\mathcal{T} \cdot \mathcal{T}^{-1} = \mathcal{I}$.

Daher bilden die Transformationen eine **Gruppe**. Wie wirken nun die Operatoren auf \mathcal{H} ?

- $\mathcal{U}(\mathcal{T}_1 \circ \mathcal{T}_2) = \mathcal{U}(\mathcal{T}_1)\mathcal{U}(\mathcal{T}_2)$
- $\mathcal{U}(\mathcal{I}) = 1$
- $\mathcal{U}(\mathcal{T}^{-1}) = \mathcal{U}(\mathcal{T})^{-1}$

2.2 Symmetrien

Falls für A gilt:

$$A^{-1} = A = \mathcal{U}(\mathcal{T})^{-1} A \mathcal{U}(\mathcal{T})$$

so heißt A **invariant** (oder symmetrisch) unter \mathcal{T} . Wenn nun \mathcal{T} eine Symmetrietransformation ist, $\mathcal{T} \in$ Gruppe ist, so heißt diese Gruppe Symmetriegruppe (von A).

$$\mathbf{A} \text{ symmetrisch unter } \mathcal{T} \iff [\mathbf{A}, \mathcal{U}(\mathcal{T})] = \mathbf{0}$$

1. Diskrete Symmetrien:

Diskrete Symmetrien können durch eine endliche Anzahl von $\mathcal{T}_1, \dots, \mathcal{T}_n$ bewirkt werden. Es existieren also endliche Transformationsmatrizen $\mathcal{U}(\mathcal{T}_1), \dots, \mathcal{U}(\mathcal{T}_n)$

Beispiele:

- **Spiegelungen** ($\vec{x} \longrightarrow -\vec{x}$)

Wir definieren den **Paritätsoperator** P :

$$\psi(\vec{x}, t) \longrightarrow P\psi(\vec{x}, t) = \psi(-\vec{x}, t)$$

Die Eigenschaften sind: $P^2 = 1 \iff P = P^{-1}$. Unabhängig davon gilt: $P = P^\dagger$. P ist eine Observable mit den Eigenwerten ± 1 . Es gibt zwei Eigenfunktionen von P :

- (a) $P\psi_+(\vec{x}, t) = +\psi_+(\vec{x}, t) = \psi_+(-\vec{x}, t)$ symmetrische Wellenfunktion.
- (b) $P\psi_-(\vec{x}, t) = -\psi_-(\vec{x}, t) = \psi_-(-\vec{x}, t)$ anti-symmetrische Wellenfunktion.

A ist genau dann symmetrisch unter P , wenn gilt: $[A, P] = 0$. Dann haben A und P gemeinsame Eigenzustände, daher sind die Eigenfunktionen von A entweder symmetrisch oder anti-symmetrisch.

Beispiel: Harmonischer Oszillator: $A = H$

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

Die Eigenfunktionen von H sind also entweder symmetrisch oder anti-symmetrisch.

- **Permutationen bei Mehrteilchensystemen**

Wir betrachten das Verhalten eines 2-Teilchen-Systems mit der Wellenfunktion $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ unter Teilchenaustausch (Permutation). Sei Π der Permutationsoperator:

$$\Pi\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) \quad , \Pi^2 = 1, \quad \Pi = \Pi^\dagger, \quad \text{Eigenwerte } \pm 1$$

Zum Eigenwert $+1$ gehört die symmetrische Wellenfunktion ψ_s , zum Eigenwert -1 gehört die anti-symmetrische Wellenfunktion ψ_a .

Für identische (nicht unterscheidbare) Teilchen gilt das **Pauli-Prinzip**, welches besagt: Für einen Operator $A' = A$ mit $[A, \Pi] = 0$ gilt:

Die Eigenfunktionen von A sind:

$$\begin{cases} \text{symmetrisch, für Teilchen mit Spin} = 0, 1, 2, \dots \\ \text{anti-symmetrisch, für Teilchen mit Spin} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \end{cases}$$

Bei größeren Teilchenzahlen bewirkt die Permutation:

$$\Pi_{ab}\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_a, \dots, \vec{x}_b, \dots, \vec{x}_n) = \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_b, \dots, \vec{x}_a, \dots, \vec{x}_n)$$

Wenn die Symmetrie in allen Paaren gleich ist, spricht man von **totaler** (Anti-) Symmetrie.

2. Kontinuierliche Symmetrien:

Kontinuierliche Symmetrien sind zum Beispiel Translationen, Drehungen, Zeitverschiebungen und die inneren Symmetrien: Eichtransformationen, Symmetriegruppen für Elementarteilchen und SUSY (Super-Symmetrien).

Wir betrachten jetzt Symmetrien, bei denen man die Transformation als unitäre Matrix darstellen kann (z.B. Translationen oder Drehungen):

$$\mathcal{T}(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \longrightarrow \mathcal{U}(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$$

Wir betrachten nun infinitesimale Transformationen $(\delta\alpha_1, \dots, \delta\alpha_n)$, so daß wir $(\delta\alpha_1)^2, \dots, (\delta\alpha_n)^2$ vernachlässigen können. Wir stellen nun \mathcal{U} dar:

$$\mathcal{U}(\delta\alpha_1, \dots, \delta\alpha_n) = 1 + \underbrace{iT_1}_{=\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \alpha_1}} \delta\alpha_1 + \dots + iT_n \delta\alpha_n + o((\delta\alpha_i)^2)$$

Die T_k nennen wir die **Erzeugenden**. Sie sind hermitisch ($T_k = T_k^\dagger$). Wenn A symmetrisch unter der Transformation $\mathcal{U}(\delta\alpha_1, \dots, \delta\alpha_n)$ ist, gilt:

$$[A, 1 + \sum_j \delta\alpha_j T_j] = 0 \quad \implies \quad [A, T_k] = 0, \quad k = 1, \dots, n$$

Nun betrachten wir vier Beispiele:

(a) **Räumliche Translation:** $\mathcal{U}\psi(x) = \psi(x - a)$

$$\begin{aligned} \psi(x - a) &= \psi(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\right)^n}_P \psi(x) = \underbrace{e^{-i\frac{a}{\hbar}P}}_{\mathcal{U}(a)} \psi(x) \end{aligned}$$

$$\mathcal{U} = e^{-i\frac{a}{\hbar}P}$$

Wenn a infinitesimal ist, so gilt: $\mathcal{U} = 1 - i\frac{\delta a}{\hbar}P$.

P ist Erzeugende der Ortstranslation.

$$\mathcal{U}^{-1}X\mathcal{U} \stackrel{!}{=} X - a :$$

$$\left(1 + \frac{i}{\hbar}\delta a P\right)X\left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta a P\right) = X + \frac{i}{\hbar}\delta a(PX - XP) \stackrel{!}{=} X - \delta a$$

$$[X, P] = -i\hbar$$

Aus dieser Vertauschungsrelation folgt: P erzeugt Translation.

Dies ermöglicht einem einen umgekehrten Zugang zur Quantenmechanik. Man definiert den Impuls als den Erzeugenden von Translationen und erhält die kanonischen Vertauschungsrelationen. Die Verallgemeinerung auf drei Dimensionen lautet:

$$\mathcal{U}(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{a}\vec{P}}$$

(b) **Zeittranslation:** Die SRG lautet: $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$.

$$|\psi(t + \delta t)\rangle = |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\delta t H|\psi(t)\rangle =$$

$$\underbrace{\left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta t H\right)}_{=\mathcal{U}(\delta t)}|\psi(t)\rangle$$

H ist Erzeugende der Zeittranslation

Postulat: Die Zeitentwicklung eines Systems läßt sich durch einen kontinuierlichen unitären Operator mit H als Erzeugende beschreiben \implies SRG

(c) **Drehungen:** für feste Achse (z-Achse)

$$\psi(\varphi) \longrightarrow \mathcal{U}\psi(\varphi) = \psi(\varphi - \gamma)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\partial_{\varphi}(-\gamma)]^n \psi(\varphi) = e^{-\gamma\partial_{\varphi}}\psi(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_z}\psi(\varphi)$$

$$\mathcal{U}(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma L_z}$$

Infinitesimale Drehungen werden mit $\mathcal{U}(\gamma) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\gamma L_z$ dargestellt. Beliebige Drehungen werden durch drei aufeinander folgende Drehungen mit den Euler-Winkeln zusammengesetzt.

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$$

$$\mathcal{U}(\alpha, \beta, \gamma) = 1 - \frac{i}{\hbar}(\delta\alpha L_z + \delta\beta L_y + \delta\gamma L_z)$$

$$\vec{v}' = R\vec{v} = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)\vec{v}$$

$$= \left[1 + \alpha \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \vec{v}$$

$$= [1 + \delta R]\vec{v}$$

$$\begin{cases} v'_1 = v_1 - (\alpha + \gamma)v_2 + \beta v_3 \\ v'_2 = v_2 + (\alpha + \gamma)v_1 \\ v'_3 = v_3 - \beta v_1 \end{cases}$$

Dies gilt nur infinitesimal! Für den Drehimpuls gilt:

$$\vec{L}' = \mathcal{U}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) \vec{L} \mathcal{U}(\alpha, \beta, \gamma) = (1 + \delta R) \vec{L}$$

$$\begin{cases} L'_x = L_x - (\alpha + \beta)L_y + \beta L_z \\ L'_y = L_y + (\alpha + \gamma)L_x \\ L'_z = L_z - \beta L_x \end{cases}$$

\vec{L} hat das gleiche Transformationsverhalten wie das eines Vektors.

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k$$

\vec{L} ist Erzeugende von Drehungen.

(d) **Innere Symmetrien:**

Dies sind zusätzliche nicht Raum-Zeit-Symmetrien (z.B. Isospin). Bezüglich der starken Wechselwirkung sind die Drehungen im 2-dimensionalen durch $|p\rangle, |n\rangle$ (Proton und Neutron) aufgespannten Isospin-Raum Symmetrie-Transformationen.

$$e^{-\frac{i}{2}\sigma_3\alpha} e^{-\frac{i}{2}\sigma_2\beta} e^{-\frac{i}{2}\sigma_3\gamma} \equiv R(\alpha, \beta, \gamma), \quad \sigma_i : \text{Pauli-Matrizen.}$$

$$R = 1 - \frac{i}{2}\sigma_3\delta\alpha \dots \quad ; \text{Erzeugende: } \frac{\sigma_{1,2,3}}{2} \implies [H, \sigma_i] = 0$$

2.3 Erhaltungsgrößen

Die zeitliche Entwicklung eines Zustandes $\psi(t)$ ist durch die SRG gegeben:

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

Für die Erwartungswerte von Observablen A im Zustand $\psi(t)$ gilt nach Ehrenfest:

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad ; \quad \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \partial_t A \rangle$$

Wir definieren jetzt eine Erhaltungsgröße: Falls $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0, \forall |\psi(t)\rangle$, dann nennen wir A Erhaltungsgröße. Falls $\partial_t A = 0$, gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle \\ [A, H] = 0 &\iff \frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0 \end{aligned}$$

1. Systeme mit diskreter Symmetrie: $S = P, \Pi, \dots, [H, S] = 0, \quad S = S^\dagger$
2. Systeme mit kontinuierlicher Symmetrie: $\mathcal{U}(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ erzeugt durch $T_i, [H, \mathcal{U}] = 0 \rightarrow [H, T_i] = 0 \forall i$, d.h. T_i sind Erhaltungsgrößen.

Spezialfälle:

- $\partial_t H = 0, \quad [H, H] = 0 \implies H$ ist erhalten. $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(x) \implies$ die Energie ist erhalten.
- $[H, P_k] = 0 \implies P_k$ sind erhalten \implies Impulserhaltung.
- $[H, L_z] = 0 \implies L_z$ ist erhalten \implies Drehimpulserhaltung.
- $[H, P] = 0$
- $[H, \Pi] = 0$

Zeitentwicklung eines Zustandes $|\psi(t_0)\rangle$: Sei $t_0 = \text{const}$ Die Zeitentwicklung eines Zustandes bekommt man durch Anwenden des Zeitentwicklungsoperators $\mathcal{U}(t, t_0)$ auf diesen Zustand:

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Aus der SRG folgt:

$$H\mathcal{U}|\psi\rangle = i\hbar\partial_t\mathcal{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = H\mathcal{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad \mathcal{U}(t_0, t_0) = 1$$

Integrieren dieser Gleichung liefert:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \mathcal{U}(t', t_0) \quad (1)$$

H ist symmetrisch unter einer Gruppe von Transformationen \mathcal{T} , beschrieben durch unitäre Operatoren $\mathcal{U}(\mathcal{T})$ im quantenmechanischen Zustandsraum ($[H, \mathcal{U}(\mathcal{T})] = 0$). Wir multiplizieren nun Gleichung (1) von links mit $\mathcal{U}^{-1}(\mathcal{T})$ und von rechts mit $\mathcal{U}(\mathcal{T})$:

$$\underbrace{\mathcal{U}^{-1}(\mathcal{T})\mathcal{U}(t, t_0)\mathcal{U}(\mathcal{T})}_{\bar{\mathcal{U}}(t, t_0)} = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \underbrace{\mathcal{U}^{-1}(\mathcal{T})\mathcal{U}(t', t_0)\mathcal{U}(\mathcal{T})}_{\bar{\mathcal{U}}(t', t_0)}$$

Der rechte Teil ist nach Gleichung (1) $= \mathcal{U}(t, t_0)$. Also gilt: $\bar{\mathcal{U}}(t, t_0) = \mathcal{U}(t, t_0)$ und damit $[\mathcal{U}(t, t_0), \mathcal{U}(T)] = 0, \quad \forall T \in G$ (Gruppe). Was sind nun die **Konsequenzen?**

1. Bei diskreten Symmetrien $\mathcal{U} = S \in (P, Pi)$, mit $S = S^\dagger$ ($[\mathcal{U}(t, t_0), S] = 0$) hermitische Observable gilt:

Ist $|\psi(t_0)\rangle$ ein Eigenzustand von S mit Eigenwert s , so bleibt $|\psi(t)\rangle$ auch Eigenzustand zu s . Denn:

$$\begin{aligned} S |\psi(t_0)\rangle &= s |\psi(t_0)\rangle \\ \underbrace{\mathcal{U}(t, t_0)S}_{=S\mathcal{U}(t, t_0)} |\psi(t_0)\rangle &= s \underbrace{\mathcal{U}(t, t_0)}_{|\psi(t)\rangle} |\psi(t_0)\rangle \\ \iff S |\psi(t)\rangle &= s |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

2. Bei kontinuierlichen Symmetrien mit den Erzeugenden T_1, \dots, T_n , $T_i = T_i^\dagger$ (, die hermitische Observablen sind) gilt:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(T) = \mathcal{U}(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \text{ und nach Voraussetzung: } [H, \mathcal{U}(\alpha_1, \dots, \alpha_n)] &= 0 \\ \implies [\mathcal{U}(t, t_0), \mathcal{U}(\alpha_1, \dots, \alpha_n)] &= 0 \end{aligned}$$

Da die α_i unabhängig sind gilt für infinitesimale α_i :

$$[\mathcal{U}(t, t_0), T_i] = 0, \quad \forall i = 1, \dots, n$$

Daraus folgt nun ebenfalls (Schlußweise analog zu (1.)), daß $|\psi(t)\rangle$ ein Eigenzustand von T_i bleibt, falls $|\psi(t_0)\rangle$ ein Eigenzustand von T_i war. Im allgemeinen ist $[T_i, T_k] \neq 0$. Es gibt einen maximalen Satz von kommutierenden $T_k : T_1, \dots, T_m, m \leq n$. Ist nun $|\psi(t_0)\rangle$ ein simultaner Eigenvektor $|\tau_1, \dots, \tau_m\rangle$, so ist es $|\psi(t)\rangle$ auch. τ_1, \dots, τ_m sind erhaltene Quantenzahlen.

Beispiele:

- (a) Translationsinvarianz: $[H, P_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3.$ $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ sind erhaltene Quantenzahlen, da $[P_i, P_k] = 0$.
- (b) Drehinvarianz: $[H, L_i] = 0, \quad [L_i, L_k] \neq 0$, daher ist maximal eine Komponente des Drehimpulses erhalten (wähle L_z). m ist eine erhaltene Quantenzahl. Zusätzlich gilt noch: $[H, \vec{L}^2] = [\vec{L}^2, L_z] = 0$, daher ist l eine erhaltene Quantenzahl. Die Eigenvektoren lauten also: $|l, m\rangle$.

2.4 Darstellungen und Eigenwertproblem

2.4.1 Gruppendarstellungen

Gegeben sei eine Gruppe G , Elemente $g \in G$ und eine Verknüpfung $g_1 \circ g_2$. Wir definieren:

Eine **Darstellung** der Gruppe G ist eine Abbildung, die der Gruppe eine Menge von Matrizen ($\Gamma : G \longrightarrow \{n \times n\text{-Matrizen}\}$), einem Element der Gruppe eine Matrix zuordnet (nur quadratische Matrizen haben eine Determinante und können eine Gruppe bilden).

$$g \in G \longrightarrow D(g) \quad (n \times n \text{ Matrix}), \det(D) \neq 0,$$

so daß gilt: $g_1 \circ g_2 \longrightarrow D(g_1) \cdot D(g_2)$ im Sinne der Matrizenmultiplikation, wobei $n = \dim(\Gamma)$ die Dimension der Darstellung ist.

- Identität wird als $1 = D(I)$ dargestellt.
- Die Inverse stellt g^{-1} als $D^{-1}(g)$ dar.
- Die $n \times n$ -Matrizen entsprechen linearen Transformationen auf den n -dimensionalen Raum bei vorgegebenen Basisvektoren dar. Dies ist der **Darstellungsraum**.
- Γ ist genau dann eine unitäre Darstellung, wenn $D(g)$ für alle $g \in G$ unitäre Matrizen sind.
- $\bar{\Gamma}$ ist die zu Γ **konjugierte Darstellung**, für die gilt: $\bar{D}(g)$ von $\bar{\Gamma} : \bar{D}(g) = D^*(g)$.

Zwei Darstellungen Γ, Γ' heißen **äquivalent**, wenn gilt:

- $\dim(\Gamma) = \dim(\Gamma')$
- es gibt eine Matrix S , mit $D'(g) = SD(g)S^{-1}, \quad \forall g \in G$

Die Matrix S bewirkt einen Basiswechsel im Darstellungsraum.

Beispiel: Räumliche Drehungen $R(\alpha, \beta, \gamma)$:

Darstellung: $\vec{x}' = R\vec{x}, \quad R^{-1} = R^T, \quad \det(R) = 1$

$R \rightarrow R$ ist eine 3×3 -Matrix. Die Darstellung ist 3-dimensional. Die Matrizen bilden eine Drehgruppe (räumlich), welche isomorph zu $SO(3)$ ist.

Zusammenhang mit der Quantenmechanik:

Sei A eine Observable, G eine Symmetriegruppe mit $g \in G$ und $\mathcal{U}(g)$ auf \mathcal{H} , mit $[A, \mathcal{U}(g)] = 0 \quad \forall g \in G$.

$$A |a_\lambda^r\rangle = a_\lambda |a_\lambda^r\rangle, \quad r = 1, \dots, n_\lambda$$

Das heißt: $|a_\lambda^r\rangle$ ist ein Eigenvektor zum Eigenwert a_λ . Wenn $n_\lambda > 1$, dann ist a_λ ein n -fach entarteter Eigenwert. Der Eigenraum zu a_λ wird durch die $|a_\lambda^r\rangle$ aufgespannt. Die $|a_\lambda^r\rangle$ können senkrecht gewählt werden.

Da nun $[A, \mathcal{U}(g)] = 0$, ist auch $\mathcal{U}(g) |a_\lambda^r\rangle$ Eigenvektor zu a_λ , denn:

$$\begin{aligned} A[\mathcal{U}(g), |a_\lambda^r\rangle] &= \mathcal{U}(g) \underbrace{A |a_\lambda^r\rangle}_{= a_\lambda |a_\lambda^r\rangle} = a_\lambda [\mathcal{U}(g), |a_\lambda^r\rangle] \\ \implies \mathcal{U}(g) |a_\lambda^r\rangle &= \sum_{r'=1}^{n_\lambda} \underbrace{D(g)_{r,r'}}_{n_\lambda \times n_\lambda\text{-Matrix}} |a_\lambda^{r'}\rangle \end{aligned}$$

Auf jedem Eigenraum von A läßt sich eine Darstellung der Symmetriegruppe G definieren. $D(g)$ ist gerade die Abbildungsmatrix der Abbildung $\mathcal{U}(g)$, eingeschränkt auf den Eigenraum.

Die Eigenräume von $A \equiv$ Darstellungen von G

Reduzible Darstellungen:

Wann ist D reduzibel? Wenn die Matrizen $D(g)$, $g \in G$ gemeinsame invariante Unterräume besitzen, die den ganzen Darstellungsraum aufspannen.

Gegeben seien $\Gamma_i : g \rightarrow D_i(g)$, $i = 1, 2, \dots \rightarrow$ neue Darstellung:

$$D(g) := \begin{pmatrix} \boxed{D_1(g)} & & & \\ & \boxed{D_2(g)} & & \\ & & \boxed{D_3(g)} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (2)$$

Schreibweise: $\Gamma = \Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus \dots$, $D(g) = D_1(g) \oplus D_2(g) \oplus \dots$, $\dim = \sum_i \dim \Gamma_i$.

Nach einem Basiswechsel mit $D(g) \rightarrow SD(g)S^{-1}$ ist D nicht mehr von der Form (2).

Wichtig ist meistens die umgekehrte Frage: Gibt es zu einer gegebenen Darstellung $D(g) \quad \forall g$, eine Matrix S , so daß $SD(g)S^{-1} \quad \forall g$ von der Form (2) ist? Die Antwort ist: Im allgemeinen nicht. Falls eine solche Matrix existiert, nennt man die Darstellung **reduzibel**. Man erhält durch eine Basistransformation die Form (2), welche invariante Teilräume beinhaltet. Existiert keine solche Matrix, so heißt die Darstellung **irreduzibel**. Man erhält durch Ausreduktion (also geeignete Basiswahl) aus einer reduzierbaren Darstellung lauter irreduzible.

Wenn man die irreduzible Darstellung kennt, kann man sich andere Darstellungen konstruieren, indem man direkte Summen und Äquivalenztransformationen durchführt.

Produktdarstellung:

Wenn wir zwei Darstellungen gegeben haben mit: $\Gamma_i : g \longrightarrow D_i(g)$, $\dim \Gamma_i = n_i$, $i = 1, 2$, dann definieren wir die **Produktdarstellung** mit Hilfe des *Kronecker-Produktes* (Dieses Produkt heißt auch oft Tensorprodukt. Es ist zu unterscheiden vom karthesischen Produkt):

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 : g \longrightarrow D(g) = D_1(g) \otimes D_2(g) \text{ auch } D_1(g) \times D_2(g)$$

$$D(g)_{rr'ss'} = D_1(g)_{rr'} \cdot D_2(g)_{ss'}, \quad r, r' = 1, \dots, n \quad s, s' = 1, \dots, m$$

$D_1 \otimes D_2$ können als $(n_1 n_2) \times (n_1 n_2)$ -Matrix geschrieben werden, durch "Einsetzen" der zweiten Matrix in die erste:

$$D_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \otimes D_2 = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots \\ b_{21} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}D_2 & a_{12}D_2 & \cdots \\ a_{21}D_2 & \ddots & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$$

Wenn $|e_r\rangle$ eine Basis von Γ_1 und $|\bar{e}_s\rangle$ eine Basis von Γ_2 ist, so gilt für die **Produktbasis** für $\Gamma_1 \times \Gamma_2$: $|e_r\rangle |\bar{e}_s\rangle \equiv |E_{rs}\rangle$. Die Basisvektoren haben folgende Gestalt:

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, |e_{n_1}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Bigg\} n_1, \quad \text{analog für } |\bar{e}_s\rangle, s = 1, \dots, n_2$$

Die Basisvektoren der Produktbasis erhalten wir nun durch "Einsetzen" der $|\bar{e}_s\rangle$ in die $|e_r\rangle$:

$$\begin{aligned}
 |E_{11}\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \\ 0 & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \\ \vdots & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \left. \vphantom{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}} \right\} n_1 \cdot n_2 \text{Komponenten} \\
 \vdots & \\
 |E_{n_1, n_2}\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Produktdarstellungen sind im allgemeinen reduzibel. Seien Γ_a, Γ_b irreduzibel, so ist:

$$\Gamma_a \times \Gamma_b = \Gamma_1^{irr} \oplus \Gamma_2^{irr} \oplus \dots$$

Eine **Anwendung** hat das ganze bei der **Kopplung von Drehimpulsen**.

2.4.2 Eigenwertproblem bei Symmetrie

Sei A eine Observable, G eine Symmetriegruppe, die Eigenräume von A sind die Darstellung Γ von G , die Entartung von $a_\lambda = \dim \Gamma$, dann folgt daraus: **Die Entartung von Eigenwerten ist (mindestens) die Dimension einer irreduziblen Darstellung.** Wir betrachten nun **zusammengesetzte Systeme**, zum Beispiel 2-Teilchen-Probleme, Spin-Bahn-Kopplung, ...

Betrachten wir zunächst die beiden Teilsysteme: Die Zustandsräume sind \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 , die jeweilige Basis lautet: $|\psi_n^{(1)}\rangle$ und $|\psi_m^{(2)}\rangle$ und die Observablen: $A_1, B_1, \dots, A_2, B_2, \dots$. Im Gesamtsystem lautet der Zustandsraum: $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$, die Produktbasis: $|\psi_n^{(1)}\rangle \cdot |\psi_m^{(2)}\rangle$ und die Observablen: $A_1 \otimes 1, 1 \otimes B_2, A_1 \otimes B_2, \dots$

Wie ist nun die Wirkungsweise solcher Operatoren definiert?

$$A_1 \otimes B_2 |\psi_n^{(1)}\rangle |\varphi_n^{(2)}\rangle := \underbrace{A_1 |\psi_n^{(1)}\rangle}_{|\psi^{(1)}\rangle} \underbrace{B_2 |\varphi_n^{(2)}\rangle}_{|\varphi^{(2)}\rangle}$$

Ein Beispiel wäre der Spin und der Bahndrehimpuls (\vec{L}, \vec{S} : \mathcal{H}_1 entspricht der Bahnbewegung, \mathcal{H}_2 dem 2-dimensionalen Spinraum. \vec{L} wirkt auf \mathcal{H}_1 , und \vec{S} auf \mathcal{H}_2 . Im Produktraum lauten die Operatoren eigentlich: $\vec{L} = \vec{L} \otimes 1$ und $\vec{S} = 1 \otimes \vec{S}$. Der Gesamtdrehimpuls ist also: $\vec{J} = \vec{L} \otimes 1 + 1 \otimes \vec{S} = \vec{L} + \vec{S}$ in der üblichen Schreibweise.

Wir betrachten nun den **Hamilton-Operator des Gesamtsystems**. Dabei gehen wir schrittweise vor, indem wir zunächst keine Wechselwirkung zulassen.

1. $H = H_1 + H_2 = H_1 \otimes 1 + 1 \otimes H_2$, keine Wechsewirkung, H_1 wirkt auf \mathcal{H}_1 , H_2 auf \mathcal{H}_2 .

Das bedeutet: Die H_i seien invariant unter G . Es sei $\mathcal{U}_1(g)$ Symmetriegruppe auf \mathcal{H}_1 und $\mathcal{U}_2(g)$ Symmetriegruppe auf \mathcal{H}_2 . Daher gilt: $[H_i, \mathcal{U}_i(g)] = 0$, $\forall g \in G$. Daraus folgt nun, daß H auf $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ symmetrisch ist, $[H, \mathcal{U}(g)] = 0$, $\mathcal{U}(g) = \mathcal{U}_1(g) \otimes \mathcal{U}_2(g)$. (Zum Beweis verwende $A_1 B_1 \otimes A_2 B_2 = (A_1 \otimes A_2)(B_1 \otimes B_2)$.) Daher sind die Eigenräume von H die Darstellungsräume von G .

Wir betrachten zunächst das Eigenwertproblem auf den Einzelräumen und dann das auf dem Produktraum:

- $H_1 |E_\lambda^r\rangle = E_\lambda |E_\lambda^r\rangle$, $r = 1, \dots, n_1$; Die Darstellung Γ_1 wird aufgespannt durch die $|E_\lambda^r\rangle$, sei ε_λ^1 ein Teilraum.
- $H_2 |\epsilon_\kappa^s\rangle = \epsilon_\kappa |\epsilon_\kappa^s\rangle$, $s = 1, \dots, n_2$; Die Darstellung Γ_2 wird aufgespannt durch die $|\epsilon_\kappa^s\rangle$, sei ϵ_κ^2 ein Teilraum.

Eigenwertproblem auf $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ ist separierbar:

$$(H_1 + H_2) |E_\lambda^r\rangle |\epsilon_\kappa^s\rangle = (E_\lambda + \epsilon_\kappa) \underbrace{|E_\lambda^r\rangle |\epsilon_\kappa^s\rangle}_{\text{Produktbasis}}$$

Der Eigenraum $\varepsilon_\lambda^1 \times \epsilon_\kappa^2$ hat die Dimension $n_1 n_2$.

Da $[H, \mathcal{U}(g)] = 0$, ist $\mathcal{U}(g) |E_\lambda^r\rangle |\epsilon_\kappa^s\rangle$ Eigenvektor zu $E_\lambda + \epsilon_\kappa$.

$$\implies \sum_{r's'} \underbrace{D_1(g)_{rr'}}_{\in \Gamma_1} \underbrace{D_2(g)_{ss'}}_{\in \Gamma_2} |E_\lambda^r\rangle |\epsilon_\kappa^s\rangle, \quad |E_\lambda^r\rangle |\epsilon_\kappa^s\rangle \text{ Basis von } \Gamma_1 \times \Gamma_2$$

Der Eigenraum $\varepsilon_\lambda^1 \times \varepsilon_\kappa^2$ ist Darstellungsraum von $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ (im allgemeinen reduzibel). Ausreduktion liefert:

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 = \Gamma_1^{irr} \oplus \Gamma_1^{irr} \oplus \dots \equiv \sum_{\Lambda} T_{\Lambda}^{irr}$$

T_{Λ}^{irr} besitzt die Basisvektoren $|\Lambda\sigma\rangle$, $\sigma = 1, \dots, \dim T_{\Lambda}^{irr}$. Die Basis-
transformation lautet:

$$|E_\lambda^r\rangle |\varepsilon_\kappa^s\rangle = \sum_{\Lambda, \sigma} \underbrace{C_{rs}^{\Lambda\sigma}}_{\text{Zahlen}} |\Lambda\sigma\rangle$$

Die Entartung ist $n_1 n_2$. Man kann die Energie-Zustände nun klassifizieren nach:

- den Quantenzahlen λ, r, κ, s aus den Produktzuständen, oder
- den Quantenzahlen $\lambda, \kappa, \Lambda, \sigma$ aus den irreduziblen Zuständen.

2. $H = H_1 + H_2 + H_{WW}$ wirkt auf beide Einzelräume (z.B. $\vec{L}\vec{S}$ -Kopplung. Sei H invariant unter G : $[H, \mathcal{U}(g)] = 0 \quad \forall g \in G$, daher betrachten wir nun die Eigenräume von H : Darstellungen von G .

$$H |E_\lambda^\sigma\rangle = E_\Lambda |E_\lambda^\sigma\rangle, \quad \sigma = 1, \dots, n, \quad n = \dim(\Gamma)$$

Die $|E_\lambda^\sigma\rangle$ können nicht als $|E_\lambda^r\rangle |\varepsilon_\kappa^s\rangle$ geschrieben werden. Jedoch wenn Γ (mindestens) eine irreduzible Darstellung ist, dann gilt: **Eigenräume von $H \equiv$ irreduzible Darstellung von G .**

$$\Gamma_1 \times \Gamma_2 = \sum_{\Lambda} \Gamma_{\Lambda}^{irr}, \quad \dim \Gamma_{\Lambda}^{irr} \leq n_1 n_2$$

Das bedeutet, daß im allgemeinen eine geringere Entartung vorhanden ist. Dies führt zu einer Term-aufspaltung.

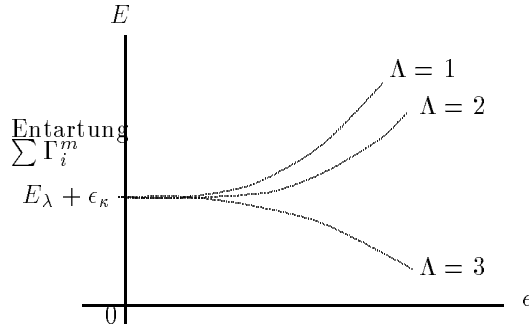
Wenn $H_{12} = \epsilon h$, $\epsilon \rightarrow 0$ gilt für H (wenn ein stetiger Übergang möglich ist):

$$H \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} H_1 + H_2 \quad \text{die Eigenräume von } H \longrightarrow \text{Eigenräume von } H_1 + H_2$$

Eine irreduzible Darstellung geht für $\epsilon \rightarrow 0$ in eine reduzible Darstellung und nicht in eine Produktdarstellung über. Wir betrachten nun die Eigenzustände von H :

$$|E, \Lambda\sigma\rangle \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} |E_\lambda + \varepsilon_\kappa, \Lambda\sigma\rangle \text{ und nicht gegen } |E_\lambda^r\rangle |\varepsilon_\kappa^s\rangle$$

Wichtig für die Störungsrechnung ist nun: Der Ausgangspunkt ist die Basis $|E_\lambda + \epsilon_\kappa, \Lambda\sigma\rangle$ und die Aufspaltung $\Delta E_{\kappa\Lambda} = \langle E_\lambda + \epsilon_\kappa, \Lambda\sigma | H_{12} | E_\lambda + \epsilon_\kappa, \Lambda\sigma \rangle$ ist unabhängig von σ aber abhängig von Λ .



Die Entartung ist $\dim\Gamma_1^{irr}, \dim\Gamma_2^{irr}, \dim\Gamma_3^{irr}$.

Symmetrieverminderung:

Habe H_0 eine Symmetriegruppe G und $H = H_0 + \epsilon h$ eine Symmetriegruppe $G' \subset G$, mit $\dim\Gamma^{irr}(G') < \dim\Gamma^{irr}(G)$. Also ist auch die Entartung von H kleiner als die Entartung von H_0 .

Eine **Anwendung** ist das H-Atom im homogenen \vec{B} -Feld (**Zeemann-Effekt**).

- $\vec{B} = 0$: Es gilt die volle Drehsymmetrie, die Entartung ist $2J + 1$ -fach.
- $\vec{B} \neq 0$: Die Drehsymmetrie ist nur noch bezgl. der \vec{B} -Achse (z-Achse). Die Darstellung lautet (mit J_z als Erzeugende):

$$D(\alpha) = e^{-i\alpha J_z} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha J} & & & & \\ & e^{-i\alpha(J-1)} & & & 0 \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & \ddots & \\ & & & & e^{i\alpha J} \end{pmatrix}$$

Die Darstellung ist irreduzibel. $\dim\Gamma^{irr} = 1$, der Entartungsgrad ist 1.

Satz: ist G eine abelsche Symmetriegruppe, so existieren 1-dimensionale irreduzible Darstellungen (hier: $R_r(\alpha)R_z(\alpha') = R_z(\alpha') = R_z(\alpha)$).

2.5 Drehungen

2.5.1 Irreduzible Darstellungen

Die Gruppe der (räumlichen) Drehungen sind eine kontinuierliche Gruppe. Die Erzeugenden J_k , $k = 1, 2, 3$ erfüllen die kanonischen Vertauschungsregeln:

$$[J_k, J_l] = i\epsilon_{klm}J_m \quad (3)$$

Die Erzeugende sind bis auf einen Faktor \hbar identisch mit dem Drehimpuls. Die Darstellungen von J_k für infinitesimale Drehungen lauten:

$$1 - i(\delta\omega_1 J_x + \delta\omega_2 J_y + \delta\omega_3 J_z)$$

Durch Exponenzieren erhalten wir die Darstellung für endliche Drehungen. Die Darstellungen der J_k sind Matrizen, die die kanonischen Vertauschungsregeln (3) erfüllen. **Notation:** Die Darstellungsmatrizen werden mit demselben Symbol J_k bezeichnet.

Für endliche Drehungen lautet die Darstellung mit den Eulerwinkeln α, β, γ :

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}$$

Anmerkung: Die Erzeugenden J_k bilden zusammen mit den Vertauschungsrelationen (3) eine **Lie-Algebra**.

Wir erklären den allgemeinen Begriff der Lie-Algebra: Seien T_1, \dots, T_n hermitesche Operatoren ($T_k^\dagger = T_k$) und es gelten folgende Vertauschungsregeln:

$$[T_k, T_l] = \sum_{m=1}^n i f_{klm} T_m$$

Die f_{klm} sind Zahlen und werden **Strukturkonstanten** genannt. Die T_k sind die Erzeugenden einer kontinuierlichen Gruppe, einer **Lie-Gruppe**. Für die Transformationsmatrix gilt:

$$\mathcal{U}(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = e^{i(\alpha_1 T_1, \dots, \alpha_n T_n)} \xrightarrow{\text{infin.}} 1 + i \sum_{k=1}^n \alpha_k T_k$$

Beispiele von physikalischer Bedeutung sind:

(Spinor–Darstellungen):

$$J_{\pm} = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \boxed{2 \times 2} & & \\ & 0 & \boxed{3 \times 3} & \\ & & & \boxed{4 \times 4} \end{pmatrix}$$

Die Darstellungen von $\vec{J}^2 = \sum_k J_k^2$: Für festes j gilt:

$$\boxed{\vec{J}^2 = j(j+1)1 \quad , [\vec{J}^2, J_{\pm}] = 0}$$

Die irreduziblen Darstellungen sind klassifiziert durch die Eigenwerte von \vec{J}^2 .

Allgemein gilt für Lie–Gruppen das **Schursche Lemma**:

Wenn $C(T_1, \dots, T_n)$ ein Polynom in T_k ist, mit $[C, T_k] = 0$, $k = 1, \dots, n$, dann gilt in einer irreduziblen Darstellung mit λ als Zahl: $C = \lambda 1$.

Wir betrachten die **Poincaré–Gruppe**: Sei $P_{\mu} P^{\mu} = P^2 \equiv m^2$ der Masse der Teilchen und $\vec{S}^2 \rightarrow \text{Spin}$, mit $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$, dann gilt für Spin $\frac{1}{2}$:

$$D_z(\alpha) = e^{-i\alpha \frac{\sigma_z}{2}} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}$$

Bei einer Drehung von 2π , gilt **für alle halbzahligen Darstellungen**: $D_z(2\pi) = -1$. Das heißt, eine Drehung um 2π führt einen Spinor nicht wieder auf sich selber zurück:

$$(\psi_+ \psi_-) \xrightarrow{2\pi} -(\psi_+ \psi_-)$$

2.5.2 Produktdarstellung, Addition von Drehimpulsen

Gegeben sei ein System \mathcal{H}_1 , mit \vec{J}_1^2 und ein System \mathcal{H}_2 , mit \vec{J}_2^2 , das Gesamtsystem $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ besitzt den Gesamt–Drehimpuls: $\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \vec{J}_2 =: \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ und die J_i erfüllen die Vertauschungsrelation: $[J_k, J_l] = i\epsilon_{klm} J_m$, d.h. \vec{J} ist Erzeugende von Drehungen auf $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$, Die irreduzible Darstellung Γ_{j_1} wirke auf dem Teilraum von \mathcal{H}_1 .

$$\vec{J}_1^2 |j_1 m_1\rangle = j_1(j_1 + 1) |j_1 m_1\rangle$$

Γ_{j_2} wirke auf Teilraum von \mathcal{H}_2 :

$$\vec{J}_2^2 |j_2 m_2\rangle = j_2(j_2 + 1) |j_2 m_2\rangle$$

$|j_i m_i\rangle$ ist die Basis.

Wir schauen uns nun die **Produkt-Darstellung** auf $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ an: $\Gamma_{j_1} \times \Gamma_{j_2}$:
Die Produktbasis $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ ist $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -dimensional

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} : \quad J_z |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = \underbrace{(m_1 + m_2)}_{=:M} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

$$\boxed{M := m_1 + m_2}$$

Die Produkt-Basis beinhaltet jedoch keine Eigenvektoren von \vec{J}^2 . Die Eigenzustände von \vec{J}^2 (\equiv irred. Darstellung, $(2J + 1)$ -dimensional):

$$\vec{J}^2 |JM\rangle = J(J + 1) |JM\rangle, \quad J = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots, \quad M = -J, \dots, J$$

Wir wollen nun $\Gamma_{j_1} \times \Gamma_{j_2}$ nach Γ_J ausreduzieren:

$$\Gamma_{j_1} \times \Gamma_{j_2} = \sum_{J=J_{min}}^{J_{max}} \Gamma_J = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \Gamma_J$$

$$\left(\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} 2J + 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \right)$$

Die Matrizen J_z, J_{\pm} ($\sim J_x, J_y$) in der Basis $|JM\rangle$ haben folgende Gestalt:

$$\begin{pmatrix} \boxed{J_{min} \times J_{min}} & & & 0 \\ & \ddots & & \\ 0 & & & \boxed{J_{max} \times J_{max}} \end{pmatrix}$$

Beispiel: $j_1 = 2, \quad j_2 = 1$

J=3	J=2	J=1
3		
2	2	
1	1	1
0	0	0
-1	-1	-1
-2	-2	
-3		

Die möglichen Werte von J sind: $j_1 + j_2, \dots, |j_1 - j_2|$. Die zugehörigen M -Werte sind $-J, \dots, J$. Die physikalische Bedeutung ist: $J(J+1)$ ist die Gesamtdrehimpulsquantenzahl, m ist die Quantenzahl der z -Komponente des Gesamtdrehimpulses.

Basis-Transformationen: orthogonal \longrightarrow orthogonal (unitär).

Für feste j_1, j_2 berechnen sich die $|JM\rangle$:

$$|JM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizient}} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind nur für $m_1 + m_2 = M$ verschieden von Null. Sie sind Elemente einer unitären Matrix und bis auf eine Phasenwahl eindeutig. Wir führen jetzt eine **Konvention** ein (Messiah):

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jj \rangle \geq 0, \quad m_1 = j_1$$

Die anderen CG-K sind durch die J_{\pm} bestimmt. Wie geht man nun vor, wenn man die CG-K bestimmen will?

1. Berechnung für maximales $J = j_1 + j_2$:

$$\begin{aligned} |JJ\rangle &= |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle; & |JM\rangle \text{ durch Anwenden von } J_- \\ &\vdots \\ |J, -J\rangle &= |j_1, -j_1\rangle |j_2, -j_2\rangle \end{aligned}$$

2. kleinere $J = j_1 + j_2 - 1, \dots$ durch Normierung, Orthogonalität und Phasenkonvention.

Das 3-j-Symbol:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} := \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m}}{\sqrt{2j + 1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j, -m \rangle$$

- ist symmetrisch unter zyklischen Permutationen.
- ist antisymmetrisch bei Transposition von Spalten

Anwendungen: Spin–Bahn–Kopplung

Ein Elektron sei im Zentralfeld. Der wechselwirkungsfreie Hamilton–Operator sei $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$. Wenn \vec{L} der Bahndrehimpuls, \vec{S} der Spin und $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ der Gesamtdrehimpuls ist, lautet der gesamte Hamilton–Operator:

$$H = H_0 + \underbrace{\xi \vec{L} \vec{S}}_{H_1}$$

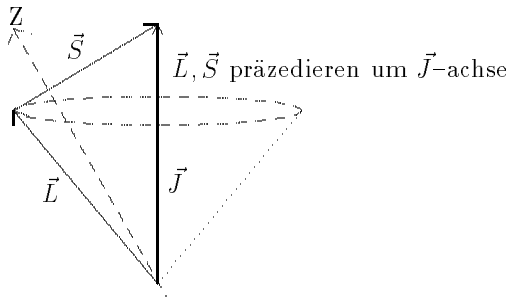
Es gelten folgende Vertauschungsregeln:

$$[\vec{L}^2, J_k] = [\vec{S}^2, J_k] = [\vec{L}^2, \vec{J}^2] = [\vec{S}^2, \vec{J}^2] = 0$$

$$[\vec{L} \vec{S}, J_k] = \frac{1}{2} [\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2, J_k] = 0$$

Daraus folgt, daß $[H, J_k] = 0$, also der Gesamtdrehimpuls erhalten ist. J, M sind also erhaltene Quantenzahlen, $H, \vec{J}^2, J_z, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ haben gemeinsame Eigenzustände $|E, J, M, l, s\rangle$.

Andererseits ist $[H, L_k] \neq 0$ und $[H, S_k] \neq 0$, d.h. \vec{L}, \vec{S} sind nicht separat erhalten, m_l, m_s sind keine erhaltenen Quantenzahlen. Also sind $|lm_l\rangle |sm_s\rangle$ keine Eigenzustände von H .



Korrekturen zu den Energieniveaus $\sim \langle E, JM | \vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 | E, JM \rangle$. Da $j = l \pm \frac{1}{2}$, $l \neq 0$ und $j = s$, $l = 0$, sind die Korrekturen $\sim J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)$.

2.5.3 Tensor–Operatoren

Definition: Ein Satz von $2k + 1$ Operatoren:

$$T_m^{(k)}, \quad m = -k, -k + 1, \dots, +k$$

heißt **irreduzibler Tensor-Operator k-ter Stufe**, wenn unter Drehungen gilt:

$$\mathcal{U}(R)T_m^{(k)}\mathcal{U}^{-1}(R) = \sum_{m'=-k}^k D_{mm'}^{(k)}(R)T_m^{(k)}$$

Das heißt er transformiert sich wie die $|km\rangle$

Eine äquivalente Formulierung ist:

$$[J_z, T_m^{(k)}] = mT_m^{(k)}, \quad [J_{\pm}, T_m^{(k)}] = \sqrt{k(k+1) - m(m\pm 1)}T_{m\pm 1}^{(k)}$$

Beispiele:

- $k = 0$: $T^{(0)}$: $[J_{\pm}, T^{(0)}] = [J_z, T^{(0)}] = 0$
- $k = 1$: Vektor $V_0 = T_0^{(1)} = z$, $V_1 = T_1^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y)$, $V_{-1} = T_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y)$ $\vec{x} = (x, y, z)$; $\vec{J} \longrightarrow (J_{\pm}, J_z)$ das heißt in $(T_{\pm 1}^{(1)})$
- $k = 2$: Tensor 2-ter Stufe mit 5 Komponenten. Karthesisch hat er 9 Komponenten — Symmetrie — $\text{Sp}(\dots) = 0$ ergibt 5 Komponenten. Ein Beispiel ist der elektrische Quadrupoltensor.
- Allgemein: $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, $l = 0, 1, 2, \dots$ ist ein Tensoroperator l -ter Stufe (bzgl. Multiplikation).

Wir machen jetzt **wichtige Aussagen über Matrixelemente**. Allen voran das

Wigner-Eckart-Theorem

Seien $|\alpha, JM\rangle$ Basisvektoren einer $(2J+1)$ -dimensionalen irreduziblen Darstellung mit α einer weiteren simultanen Quantenzahl (z.B. Energie) und entsprechend $|\alpha', J'M'\rangle$ diejenigen für eine irreduzible Darstellung zu J' . $T^{(k)}$ seien Komponenten eines irreduziblen Tensoroperators. Dann gilt:

$$\langle \alpha, JM | T_m^{(k)} | \alpha', J'M' \rangle = \underbrace{\langle J'M', km | JM \rangle}_{\text{CG-K}} \underbrace{\langle \alpha', J' || T^{(k)} || \alpha, J \rangle}_{\text{“red. Matrixelement”}} \underbrace{\frac{1}{2J+1}}_{\text{Konvention}}$$

Die CG-K sind für $(J'M')(km) \rightarrow (JM)$, die reduzierten Matrixelemente sind unabhängig von M, M' und m .

Wenn man nun das reduzierte Matrixelement aus der einfachsten Konfiguration (z.B. $M = M' = m = 0$) berechnet, so sind alle Matrixelemente durch die CG-K bestimmt. Diese kann man aus einer Tabelle ablesen (Man kann sie sich auch jedesmal ausrechnen, wenn man gerade zuviel Zeit hat, oder sie auf ein Übungsblatt stellen).

$$\begin{pmatrix} l = 2 & l' = 3 & k = 2 \\ 5 & 7 & 5 \end{pmatrix}$$

Da nun die CG-K nur für bestimmte Übergänge von Null verschieden sind, bekommt man so die **Auswahlregeln** für Übergänge.

Anwendung in der Spektroskopie:

- Dipolstrahlung: $\langle \vec{x} \rangle \sim T_m^{(1)}$, $k = 1$
- Quadrupolstrahlung: $\langle Q_{ik} \rangle \sim \langle T_m^{(2)} \rangle$, $k = 2$

Allgemein gelten für k-Pol-Strahlung die folgenden Auswahlregeln

$$|J - J'| \leq k \leq |J + J'|, \quad M - M' = 0, \pm 1$$

Jedoch können noch weitere Einschränkungen zum Beispiel durch die Parität hinzukommen. So ist zum Beispiel bei $k = 1$, $J - J' = 0$ nicht erlaubt (Q-Zweig).

3 Zeitabhängige Probleme der Quantenmechanik

3.1 “Bilder” der Quantenmechanik

1. Schrödinger-Bild:

Im Schrödinger-Bild sind die Zustände $|\psi(t)\rangle$ zeitabhängig und die Observablen A zeitunabhängig. Wenn $\partial_t A \neq 0$, d.h. bei expliziter Zeitabhängigkeit ist: $\frac{dA}{dt} = \partial_t A$.

Die Bewegungsgleichung ist die Schrödinger-Gleichung (SRG):

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

Die Lösung dieser SRG lautet:

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad \mathcal{U}(t_0, t_0) = 1$$

- Falls $\partial_t H = 0$ ist, lautet: $\mathcal{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}$.

Die Lösung von $i\hbar \frac{d\mathcal{U}}{dt} = H\mathcal{U}$, bzw $i\hbar \frac{d\mathcal{U}^\dagger}{dt} = \mathcal{U}^\dagger H$ lautet:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle E_n | \psi(t_0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n} |E_n\rangle$$

wobei im diskreten Spektrum $H |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$ gilt.

Im kontinuierlichen Spektrum gilt:

$$|\psi(t)\rangle = \int dE \langle E | \psi(t_0) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E} |E\rangle$$

- Falls $\partial_t H \neq 0$ sei $H = H_0 + H_1(t)$, mit $\partial_t H_0 = 0$, wähle $H_1 = 0$, $t < t_0 = 0$.

– Für $t < 0$ gilt nun :

$$|\psi(t_0)\rangle = |E_n^0\rangle, \quad H_0 |E_n^0\rangle = E_n |E_n^0\rangle \quad (\text{sei gelöst})$$

– Für $t > 0$ gilt

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |E_n^0\rangle \quad (\text{Entartung sei ausgeschlossen})$$

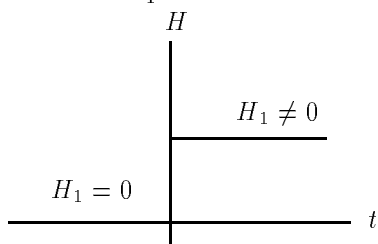
$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \sum_{k'} i\hbar \dot{c}_k(t) |E_n^0\rangle = H |\psi(t)\rangle = \\
 &= \sum_k c_k(t) (H_0 + H_1) |E_n^0\rangle
 \end{aligned}$$

Durch Multiplizieren von $\langle E_n^0 |$ von links wird dies zu:

$$\boxed{i\hbar \dot{c}_k(t) = E_k^0 c_k + \sum_{k'} c_{k'}(t) \langle E_k^0 | H_1 | E_{k'}^0 \rangle} \quad (1)$$

Dies ist ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen. Diese sind exakt lösbar z.B. für Systeme mit endlich vielen Energie-Niveaus (z.B. Spin im Magnetfeld).

Sei nun $H_1 = const$:



Nun ist (1) ein lineares homogenes System von gewöhnlichen Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Der Ansatz zur Lösung dieses Systems lautet mit Ω den Eigenwerten und n_i den Eigenvektoren:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_1 \\ \vdots \\ n_n \end{pmatrix} e^{-i\Omega t}$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |E_k^0\rangle \quad \text{sei gelöst.}$$

Die **Übergangswahrscheinlichkeit** also die Wahrscheinlichkeit, daß das System zur Zeit t im Zustand $|E_m^0\rangle$ angetroffen wird, ergibt sich zu:

$$W(t) = |\langle E_m^0 | \psi(t) \rangle|^2 = |c_m(t)|^2$$

2. Heisenberg-Bild:

Im Heisenberg-Bild sind die Zustände $|\psi_H\rangle$ zeitunabhängig und die Observablen $A_H(t)$ zeitabhängig. Zur Unterscheidung schreiben wir für das Schrödinger-Bild $|\psi_S\rangle$, A_S . Für die Umrechnung von Schrödinger-Bild in das Heisenberg-Bild gilt:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_S(t_0) | \underbrace{\mathcal{U}(t, t_0)^\dagger A_S \mathcal{U}(t, t_0)}_{= A_H(t)} | \psi_S(t_0) \rangle \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{|\psi_H\rangle} \\ &\iff \langle A \rangle \equiv \langle \psi_S(t_0) | A_H(t) | \psi_H \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_H(t) &= \mathcal{U}(t, t_0)^\dagger A_S \mathcal{U}(t, t_0) \\ |\psi_H(t)\rangle &= |\psi_S(t_0)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)^\dagger |\psi_S(t)\rangle \end{aligned}$$

Die Bewegungsgleichung lautet nun:

$$\frac{dA_H}{dt} = \left(\frac{d\mathcal{U}^\dagger}{dt} \right) A_S \mathcal{U} + \mathcal{U}^\dagger A_S \left(\frac{d\mathcal{U}}{dt} \right) + \underbrace{\mathcal{U}^\dagger \partial_t A_S \mathcal{U}}_{\partial_t A_H}$$

Dies führt auf die **Heisenberg-Gleichung**:

$$\frac{d\mathbf{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{A}_H, \mathbf{H}_H] + \partial_t \mathbf{A}_H$$

Sei nun $A_S = A_S(x_k, P_l, \dots, t)$, $O = x_k, P_l, S_m, \dots$, dann ist A_S :

$$A_S = \sum_n \underbrace{O_s \dots O_s}_{n \text{ mal}} g_n(t) \quad , \quad \partial_t A_S = \sum_n \underbrace{O_s \dots O_s}_{n \text{ mal}} \dot{g}_n(t)$$

Für die Zeitableitung im Heisenberg-Bild gilt:

$$\partial_t A_H(O_H, t) \equiv \mathcal{U}^\dagger \partial_t A_S \mathcal{U} = \sum_n \underbrace{\mathcal{U}^\dagger O_s \mathcal{U}}_{=: O_H(t)} \mathcal{U}^\dagger O_s \mathcal{U} \dots \mathcal{U}^\dagger O_s \mathcal{U} \dot{g}_n(t)$$

Beispiele: Ein freies Teilchen (1-dimensional), $H_H = \frac{p_H^2}{2m}$:

$$\dot{x}_H = \frac{1}{i\hbar}[x_H, H_H] = \frac{1}{2m i\hbar}[x_H, P_H^2] = \frac{p_H}{m}$$

$$\dot{p}_H = \frac{1}{i\hbar}[p_H, H_H] = 0$$

Diese Gleichungen entsprechen in der klassischen Mechanik die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen: Sei $A = A(q_k, p_k, t)$:

$$\frac{dA}{dt} = \underbrace{\{A, H\}}_{\text{Poisson-Klammern}} + \partial_t A$$

Die Lösungen in der klassischen Mechanik lauten:

$$p_H(t) = p_H(0); \quad x_H(t) = \frac{1}{m} p_H(0) \cdot t + x_H(0)$$

Die Lösung der Differenzialgleichungen für die Operatoren benötigt Anfangsbedingungen $A_H(0)$. Sei $\partial_t A_H = 0$ ($\Leftrightarrow \partial_t A_S = 0$), und $\partial_t H_S = 0$, dann ist $H_H = H_S$, da $[e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}, H] = 0$. Die Bewegungsgleichung und deren Lösung lauten jetzt:

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H]$$

$$A_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} A_H(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}$$

Das Eigenwertproblem von A_H beinhaltet nun zeitabhängige Eigenvektoren:

$$A_H(t) |a_H(t)\rangle = a |a_H(t)\rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t den Wert a zu messen, ist nun:

$$W_a = |\langle a_H(t) | \psi_H \rangle|^2 \equiv |\langle a_S | \psi_S(t) \rangle|^2$$

3.2 Zeitabhängige Störungsrechnung

In der Regel sind die Probleme nicht exakt lösbar. Daher benötigt man ein Näherungsverfahren.

3.2.1 Wechselwirkungsbild (Dirac)

Das **Wechselwirkungsbild** ist eine Synthese aus Heisenberg- und Schrödinger-Bild, welches sich für die Störungsrechnung besonders eignet.

Sei im Schrödinger-Bild ein Hamilton gegeben: $H = H_0 + H_1$, $\partial_t H = 0$ (Wir wollen nun Operatoren im Schrödingerbild mit einem oberen Index bezeichnen: z.B. $H_0 =: H_0^S$.)

Das Wechselwirkungsbild (I für Interaction) ist nun definiert durch:

- Operatoren $A_I(t)$ bezüglich H_0 (Heisenbergbild)

$$A_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} A_I(0) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$$

- Zustände $|\psi_I(t)\rangle$, die zeitabhängig bezüglich $H_1(t)$ (Schrödinger-Bild) sind.

$$i\hbar\partial_t |\psi_I(t)\rangle = H_1^I(t) |\psi_I(t)\rangle$$

mit

$$H_1^I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} H_1 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$$

Dabei wird festgesetzt, daß für alle Operatoren $A_I(0) \equiv A_S(0)$ und $\psi_I(0) \equiv \psi_S(0)$ gilt. Zur Zeit t ist also das Wechselwirkungsbild gleich dem Schrödinger-Bild.

Wir lösen nun die Bewegungsgleichung für $|\psi_I\rangle$:

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathcal{U}_I(t, 0) |\psi_I(0)\rangle$$

Dabei ist \mathcal{U}_I die Lösung der folgenden Gleichung (Beweis durch Einsetzen).

$$\mathcal{U}_I(t, 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H_1^I(t') \mathcal{U}_I(t', 0)$$

Die Eigenzustände von H_0 : ($H_0^I = H_0$)

$$H_0 |E_n^0\rangle = E_n^0 |E_n^0\rangle \quad |E_n^0\rangle \text{ sind zeitunabhängig}$$

Dir typische Fragestellung ist: Wenn ein System zum Zeitpunkt $t = 0$ in einem bestimmten Zustand $|E_n^0\rangle$ ist, mit welcher Wahrscheinlichkeit trifft

man bei $t > 0$ das System im Zustand $|E_m^0\rangle$ an? Diese **Übergangswahrscheinlichkeit** ergibt sich zu:

$$W_{mn}(t) = |\langle E_m^0 | \psi_I(t) \rangle|^2 = |\langle E_m^0 | \mathcal{U}_I(t, 0) | E_n^0 \rangle|^2$$

Falls die Energie E_m^0 aus dem kontinuierlichen Spektrum von H_0 ist, gilt:

$$\underbrace{\rho(E_m^0)dE_m^0}_{\text{Zustandsdichte}} = dn = \text{Zahl der Zustände im Intervall } [E_m^0, E_m^0 + dE_m^0]$$

Die Wahrscheinlichkeit in einem Intervall dE_m^0 ist:

$$dW_{mn} = \rho(E_m^0)dE_m^0 |\langle E_m^0 | \psi_I(t) \rangle|^2$$

$$\frac{dW_{mn}}{dE_m^0} = \rho(E_m^0) |\langle E_m^0 | \psi_I(t) \rangle|^2$$

Allgemein gilt für die Wahrscheinlichkeit:

$$\int_{E_1}^{E_2} dE_m^0 \frac{dW_{mn}}{dE_m^0}$$

Wir führen nun eine **Notation** ein, wenn $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ weitere simultane Quantenzahlen sind:

$$|a\rangle := |E_a^0, \lambda\rangle \quad ; \quad |b\rangle = |E_b^0, \lambda'\rangle$$

Wobei E_a^0, E_b^0 Eigenwerte des freien Hamilton H_0 (diskret oder kontinuierlich) sind.

Sei nun $|a\rangle = |\psi_I(0)\rangle$ also der Anfangszustand. Für $t > 0$ ist der Zustand gegeben durch: $|\psi_I(t)\rangle = \mathcal{U}_I(t, 0) |a\rangle$. Die **Übergangsamplitude** vom Zustand $|a\rangle$ zum Zustand $|b\rangle$ beträgt:

$$A_{ba} = \langle b | \mathcal{U}_I(t, 0) | a \rangle$$

Die **Übergangswahrscheinlichkeit** ist:

$$W_{ba} = |A_{ba}|^2$$

Falls $|b\rangle \in \text{Spektrum}(H_0)$, gilt:

$$dW_{ba} = |A_{ba}|^2 \rho(E_b^0) dE_b^0$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der Zustand $|a\rangle$ in den Energiebereich $[E_1, E_2]$ übergeht, ist:

$$W_{a \rightarrow b} = \int_{E_1}^{E_2} dE_b^0 \rho(E_b^0) |A_{ba}|^2 = \int_{E_1}^{E_2} dE_b^0 \rho(E_b^0) |\langle b | \mathcal{U}_I(t, 0) | a \rangle|^2$$

Beispiel: Übergänge zwischen freien Teilchenzuständen:

$$|a\rangle = |E_a, \vec{k}_a\rangle, \quad |b\rangle = |E_b, \vec{k}_b\rangle, \quad E^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} :$$

$$\langle b | \mathcal{U}_I(t, 0) | a \rangle = \int \frac{1}{(2\pi)^3} d^3x e^{-i\vec{k}_b \cdot \vec{x}} \mathcal{U}_I(t, 0) e^{i\vec{k}_a \cdot \vec{x}}$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der Zustand mit \vec{k}_a in das Intervall $d\vec{k}_b$ bei \vec{k}_b übergeht, beträgt: ($\vec{k}_b = (k_b, \underbrace{\vartheta_b, \varphi_b}_{\Omega_b})$):

$$\begin{aligned} W &= |\langle b | \mathcal{U}_I(t, 0) | a \rangle|^2 d^3k_b = |A_{ba}|^2 k_b^2 dk_b d\Omega_b \\ &= |A_{ba}|^2 \underbrace{\frac{\sqrt{2m^3 E_b}}{\hbar^3} d\Omega_b}_{\rho(E_b)} dE_b \end{aligned}$$

3.2.2 Bestimmung von $\mathcal{U}_I(t, 0)$

Die Integralgleichung für $\mathcal{U}_I(t, 0)$ lautet:

$$\mathcal{U}_I(t, 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H_1^I(t') \mathcal{U}_I(t', 0)$$

Deren Lösung erhält man durch sukzessive Approximation:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_0(t, 0) &= 1 \\ \mathcal{U}_1(t, 0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H_1^I(t') \\ \mathcal{U}_2(t, 0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H_1^I(t') + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' H_1^I(t') H_1^I(t'') \end{aligned}$$

Dies führt auf eine Störungsreihe für $\mathcal{U}(t, 0)$:

$$\mathcal{U}(t, 0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n H_1^I(t_1) \cdots H_1^I(t_n)$$

Dieses Vorgehen ist dann sinnvoll, wenn H_1 nur eine verglichen mit H_0 schwache Störung ist. Dann herrscht hinreichend rasche Konvergenz, d.h. es sind nur wenige Terme relevant. Z.B. $H_1(t) = \lambda h(t)$ mit λ einer kleinen Zahl.

Wir betrachten die **1. Näherung**:

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H_1^I(t') |\psi_I(0)\rangle$$

Für $|\psi_I(0)\rangle = |a\rangle$ ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude (mit $W_{ba} = |A_{ba}|^2$) für $|b\rangle \neq |a\rangle$:

$$A_{ba} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle b | H_1^I(t') | a \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}(E_b^0 - E_a^0)t'}}_{=: e^{i\omega t}} \langle b | H_1(t') | a \rangle$$

1. **Zeitlich konstante Störung**:

$$H_1(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ V = const, & t > 0, \quad \partial_t V = 0 \end{cases}$$

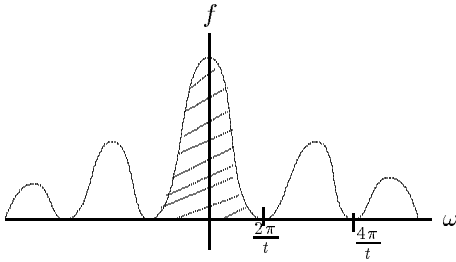
Die Anfangsbedingung lautet: $|\psi_I(0)\rangle = |a\rangle$. In 1. Näherung lautet nun die Amplitude:

$$A_{ba} = \frac{1}{i\hbar} \underbrace{\langle b | V | a \rangle}_{=: V_{ba}} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ba}t'} = \frac{1}{i\hbar} V_{ba} \underbrace{\frac{e^{i\omega_{ba}t} - 1}{i\omega_{ba}}}_{e^{i\frac{\omega_{ba}}{2}t} \frac{\sin(\frac{\omega_{ba}}{2}t)}{\frac{\omega_{ba}}{2}}}$$

Die Wahrscheinlichkeit beträgt also:

$$W_{ba} = |A_{ba}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba})$$

$$f(t, \omega_{ba}) = \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{ba}t}{2}\right)}{\frac{\omega_{ba}^2}{4}}$$



Für große t sind die Übergänge, für die $\omega_b \simeq \omega_a$ gilt, bevorzugt. Es gilt:

$$|E_b^0 - E_a^0| \simeq \frac{2\pi\hbar}{t}$$

Das heißt, daß die Energie bei solchen Übergängen bis auf den Wert $\pm \frac{2\pi\hbar}{t}$ erhalten ist.

Wie betrachten nun **Übergänge im Kontinuum** ($E_b^0 \in$ kontin. Spektrum von H_0):

$$dW_{a \rightarrow b} = \rho(E_b^0) dE_b^0 |A_{ba}|^2 = \rho(E_b^0) \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba})$$

$$W_{a \rightarrow b} = \int_B dE_b^0 \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba})$$

(a) $E_a^0 \notin B = (E_1, E_2)$, $|E_2 - E_1|$ so klein, daß:

$$W_{a \rightarrow b} \simeq \rho(E_1) |V_{ba}|^2 \Big|_{E_1} \cdot \frac{1}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \underbrace{f(t, \omega_{ba})}_{\text{über } t \text{ gemittelt: } \rightarrow \frac{2\hbar^2}{(E_b - E_a)^2}}$$

(b) $E_a^0 \in B = (E_a^0 - \Delta E, E_a^0 + \Delta E)$, ΔE kein

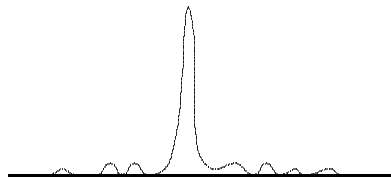
$$\begin{aligned} W_{a \rightarrow b} &\simeq \rho(E_a^0) \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 \Big|_{E_a^0} \underbrace{\int_{E_a^0 - \Delta E}^{E_a^0 + \Delta E} dE_b^0 f(t, \omega_{ba})}_{= \int_{-\infty}^{\infty} dE_b^0 \dots + R_{\Delta E}} \\ &= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dE_b^0 \dots + R_{\Delta E}}_{(I)} \end{aligned}$$

Wir definieren nun $\xi := \frac{E_b^0 - E_a^0}{\hbar} t$. Damit wird (I) zu:

$$(I) = 2\hbar t \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{\sin \xi}{\xi^2}}_{=\pi}$$

$$|R_{\Delta E}| = 2 \int_{E_a^0 + \Delta E}^{\infty} dE_b^0 \dots \leq \frac{8\hbar^2}{\Delta E}$$

Für große t also $\Delta E \gg \frac{2\pi\hbar}{t} \iff \frac{1}{\Delta E} \ll \frac{i}{2\pi\hbar}$ gilt nun:



$$W_{a \rightarrow b} = \frac{2\pi}{\hbar} [|V_{ba}|^2 \rho(E_b^0)]_{E_b^0 = E_a^0} t$$

Die Wahrscheinlichkeit ist **proportional zur Zeit !!** Also definieren wir eine Übergangsrate ($\frac{W}{t}$). Dies führt auf die **goldene Regel**:

$$\mathbf{W}_{ba} = \frac{dW_{ba}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} [|V_{ba}|^2 \rho(E_b^0)]_{E_b^0 = E_a^0}$$

Ein anderer Zugang ist:

$$W_{ba} = \frac{d}{dt} W_{a \rightarrow b} = \int_B dE_b^0 \rho(E_b^0) \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 \partial_t f(t, \omega_{ba})$$

$$\partial_t f(t, \omega_{ba}) = 2 \frac{\sin \omega t}{\omega} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 2\pi \delta(\omega)$$

2. Störung während einer endlichen Zeit $[-T, T]$

Sei $H_1(t) = 0$ außerhalb von $[-T, T]$. (T kann auch ∞ sein, wenn $\lim_{|t| \rightarrow \infty} H_1(t) = 0$ schnell genug). Setze nun noch $t_0 := -T$:

- $t = -T$: $|a\rangle = |\psi_I(-T)\rangle$
- $t > -T$: $\psi_I(t) = \mathcal{U}_I(t, -T)|a\rangle$
- $t > T$: in 1. Näherung:

$$\mathcal{U}_I(t, -T) = 1 + \underbrace{\frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^T dt' H_1^I(t')}_{\int_{-\infty}^{\infty} dt' H_1^I(t')}$$

Die Amplitude ist nun:

$$A_{ba} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle b | H_1^I(t) | a \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle b | e^{i\omega t} H_1(t) | a \rangle$$

$$A_{ba} = \frac{1}{i\hbar} \langle b | \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{ba} t} H_1(t) | a \rangle = \frac{\sqrt{2\pi}}{i\hbar} = \langle b | \tilde{H}_1(\omega_{ba}) | a \rangle$$

Dabei ist $H_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{H}_1(\omega)$ die Fourier-Transformierte.

Damit ein Übergang möglich ist, muß $\tilde{H}_1(\omega_{ba}) \neq 0$ sein, also $\hbar\omega_{ba} = E_b^0 - E_a^0$ muß im Fourier-Spektrum von H_1 vorkommen. Dies ist die **Bohrsche Frequenzbedingung**.

3.2.3 Periodische Zeitabhängigkeit

Sei $H = H_0 + H_1(t)$, $\partial_t H_0 = 0$ $H_1(t) = V e^{i\omega t} + V^+ e^{-i\omega t}$, $\partial_t V = 0$.

- $t = 0$: $|a\rangle = |\psi_I(0)\rangle$

- $t > 0$:

$$V_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$$

$$V_I^+(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit beträgt:

$$\begin{aligned}
 A_{ba} &= \langle b | \mathcal{U}_I(t, 0) | a \rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle b | V_I e^{-i\omega t'} + V_I^+ e^{i\omega t'} | a \rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \left[\underbrace{\langle b | V | a \rangle}_{V_{ba}} e^{i(\omega_{ba}-\omega)t'} + \underbrace{\langle b | V^+ | a \rangle}_{V_{ba}^+} e^{i(\omega_{ba}+\omega)t'} \right] \\
 &= \frac{1}{i\hbar} V_{ba} \frac{e^{i(\omega_{ba}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{ba} - \omega)} + \frac{1}{i\hbar} V_{ba}^+ \frac{e^{i(\omega_{ba}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{ba} + \omega)}
 \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit beträgt:

$$\begin{aligned}
 W_{ba} &= \frac{1}{i\hbar} \left\{ |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} - \omega) + |V_{ba}^+|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega) + \right. \\
 &\quad \left. + 2\Re \left(V_{ba} V_{ba}^+ \frac{e^{i(\omega_{ba}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{ba} - \omega)} \frac{e^{-i(\omega_{ba}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{ba} + \omega)} \right) \right\} \\
 &\quad \sim \frac{\sin \frac{\omega_{ba}-\omega}{2} t}{\frac{\omega_{ba}-\omega}{2}}
 \end{aligned}$$

Es gibt einen Peak für $\omega_{ba} \simeq \omega$, t groß, bzw. für $\omega_{ba} \simeq -\omega$. Die Eigenschaften für große Zeiten t sind:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t, \omega_{ba} - \omega) \sim t \delta(\omega_{ba} - \omega)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t, \omega_{ba} + \omega) \sim t \delta(\omega_{ba} + \omega)$$

1. $\omega = \omega_{ba} = \frac{E_b - E_a}{\hbar} > 0$: niedriges \rightarrow höheres Energie-Niveau

$$W_{ba} = \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} - \omega)$$

2. $\omega = -\omega_{ba} = \frac{E_a - E_b}{\hbar} > 0$: umgekehrt (\implies **Emission**)

$$W_{ba} = \frac{1}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega)$$

$$w_{ba} := \frac{dW_{ba}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{ba}|^2 \delta(E_b^0 - E_a^0 \pm \hbar\omega)$$

Für das kontinuierliche Spektrum gilt:

$$w_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \rho(E_b^0) |V_{ba}|^2 |_{E_b=E_a \pm \hbar\omega}$$

Anmerkung: Die δ -Funktion ist eine zu starke Idealisierung. Eine genauere Beschreibung ist: $H_1(t)$ als Fourier-Spektrum $\neq \delta(\omega - \omega_0)$, $V \longrightarrow \tilde{H}_1(\omega_{ba} \pm \omega)$, $V_{ba} \longrightarrow \langle b | \tilde{H}_1 | a \rangle$.

Wir betrachten nun eine **Anwendung:** Ein Atom im elektrischen Feld (e-m-Welle)

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_0, \quad |a\rangle = |E_n, l, m\rangle, \quad |b\rangle = |e_{n'}, l' m'\rangle$$

$$\vec{E} = \vec{E}_\varphi e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} + \vec{E}_\theta e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

Es gibt zwei Möglichkeiten, dies nun zu behandeln:

1. Dipolnäherung: $\vec{k}\vec{x} \ll 1$, $e^{i\vec{k}\vec{x}} = 0$
2. Vernachlässigung des magnetischen Anteils

$$H_1(t) = -\vec{F}\vec{x} = e\vec{E}\vec{x} = e\vec{E}_0\vec{x}e^{-i\omega t} + e\vec{E}_0\vec{x}e^{i\omega t}$$

Wir betreiben Störungsrechnung:

$$V_{ba} = \underbrace{\langle b | e\vec{E}_0\vec{x} | a \rangle}_{\text{Dipolmatrixelement}} = \vec{E}_0 \langle b | \underbrace{e\vec{x}}_{\text{Dipolmoment}} | a \rangle$$

Übergänge sind unmöglich (“verboten”), für: $\langle b | \vec{x} | a \rangle = 0$ und möglich (“erlaubt”), für $\langle b | \vec{x} | a \rangle \neq 0$

$$\vec{x}\vec{E}_0 = -x_1^{(1)}E_- + x_{-1}^{(1)}E_+ + x_0^{(1)}E_{0Z}$$

$$E_\pm = \frac{E_x \pm iE_y}{\sqrt{2}}, \quad x_{1,-1}^{(1)} = \frac{\mp(x \pm iy)}{\sqrt{2}}$$

$$V_{ba} = -eE_- \langle b | x_1^{(1)} | a \rangle + eE_+ \langle b | x_{-1}^{(1)} | a \rangle + E_{0Z} \langle b | x_0^{(1)} | a \rangle$$

Das Wigner–Eckart–Theorem sagt nun:

$$\langle E_b^0, l'm' | x_\mu^{(1)} | E_a^0, lm \rangle = \langle lm, 1\mu | l'm' \rangle \frac{1}{\sqrt{2l'+1}} \langle E_b^0 l' || x^{(1)} || E_a^0 l \rangle$$

Die Auswahlregeln sind nun:

1. $m' = m + \mu \iff m' - m = \mu = 0, \pm 1$
2. $l' = l + 1, l, l - 1 \iff l' - l = 0, \pm 1$

Wir führen nun die Berechnung des reduzierten Matrixelements durch:

$$\begin{aligned} \langle E_b^0 l' 0 | x_0^{(1)} | E_a^0 l 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2l'+1}} \langle l 0, 1 0 | l' 0 \rangle \langle E_b^0 l' || z || E_a^0 l \rangle \\ \text{L.S} &= \int d^3x R_{k'l'}^*(r) Y_{l'0}^* z R_{kl}(r) Y_{l0} \\ &= \int_0^\infty dr r^2 R_{k'l'} R_{kl} r \int d\Omega P_l P_{l'} \frac{\sqrt{2l'+1} \sqrt{2l+1}}{4\pi} \cos\vartheta \\ &= \dots (2l+1) \times P_l = l P_{l-1} + (l+1) P_{l+1} \\ &= \int dr r^3 R' R \frac{\sqrt{2l'+1} \sqrt{2l+1}}{2(2l+1)} \int l P_{l-1} P_{l'} + (l+1) P_{l+1} P_{l'} dx \\ &= \int dr r^3 R' R \frac{\sqrt{2l'+1} \sqrt{2l+1}}{2(2l+1)} [l \delta_{l-1, l'} + (l+1) \delta_{l+1, l'}] \\ &= \int dr r^3 R' R \frac{1}{2\sqrt{2l+1}} (l \delta_{l-1, l'} + (l+1) \delta_{l+1, l'}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l'+1} \sqrt{2l+1}} [l \delta_{l-1, l'} + (l+1) \delta_{l+1, l'}] \int dr r^3 R_{n'l'} R_{nl} \\ &\implies \langle n'l' || x^{(1)} || nl \rangle = \frac{\sqrt{2l'm}}{\langle l 0, 1 0 | l' 0 \rangle} \langle n'l' 0 | z | nl 0 \rangle \end{aligned}$$

Weitere Auswahlregeln sind: $l' = l + 1, l - 1, l = l'$ ist wegen der Parität verboten.

Anmerkungen:

1. Übergänge, die in 1. Ordnung verboten sind, können in höheren Ordnungen erlaubt sein. $H_1 = \lambda h$, λ klein.

$$W_{ba} = c_1 \lambda + c_2 \lambda^2 + c_3 \lambda^3 + \dots$$

2. Bei 2. Ordnung: $e^{ikx} = 1 + ikx + \dots$ wird ikx benötigt und die magnetische WW von \vec{B} . Dies führt auf den elektrischen Quadrupol und den magnetischen Dipol.
3. $W_{ba} \sim |V_{ba}|^2 \sim |\vec{E}_0|^2$. Die Energiedichte der Welle ist: $u = \frac{1}{2} \epsilon_0 |\vec{E}_0|^2$. Im Quantenbild ist $u = N \hbar \omega = \frac{\text{Zahl der Photonen}}{\text{Volumen}}$. $w_{ba} \sim N$: Photonenunabhängig (ohne WW).
4. Übergänge sind induziert, d.h. nur für $|\vec{E}_0|^2 \sim N \neq 0$ $n \rightarrow n'$: $E_{n'} > E_n$: induzierte Absorption sonst Emission.
5. **Laser:** Spontane Emission sind Übergänge ohne äußeres Feld. Ein angeregtes Atom geht in den Grundzustand und ein Photon über. Diese wird von dieser Theorie nicht erfaßt. Sie erfordert das e-m-Feld als Quantenfeld.

4 Quantisierung des elektro-magnetischen Feldes

Die Wechselwirkung mit Teilchen der Ladung e wird durch den Hamilton-Operator: $H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - e\vec{A})^2 + e\Phi$ beschrieben. Die Grundgrößen, also die Potentiale \vec{A}, Φ werden durch Operatoren ersetzt.

4.1 Klassisches e-m-Feld

Wir erinnern uns an die Definition des Vektorpotentials \vec{A} :

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad ; \quad \vec{E} = -\partial_t \vec{A} - \nabla \Phi$$

Im folgenden wird die **Coulomb-Eichung** verwendet: $\nabla \vec{A} = 0$. Die **Maxwell-Gleichungen** für die Potentiale lauten nun:

$$\Delta \Phi = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(\vec{x}, t) \quad , \quad \Phi: \text{instantanes Coulomb-Potential}$$

$$\square \vec{A} = -\mu_0 \vec{j}_\perp \quad (\vec{j} = \vec{j}_\parallel + \vec{j}_\perp, \nabla \times \vec{j}_\parallel = 0, \nabla \cdot \vec{j}_\perp = 0)$$

$\vec{A}(\vec{x}, t)$ ist das Strahlungsfeld. Im folgenden betrachten wir ein freies Feld ($\rho = 0, \vec{j} = 0$). Nun lauten die freien Maxwellgleichungen:

$$\Delta \Phi = 0 \quad , \quad \square \vec{A} = 0$$

Es ist durch eine Eichtransformation stets erreichbar, daß $\Phi \equiv 0$ ist. Daraus folgt, daß: $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \vec{E} = -\partial_t \vec{A}, \nabla \cdot \vec{A} = 0$: Das ist die **Transversalität**. Ein freies Strahlungsfeld hat also 2 physikalische Freiheitsgrade. Dies sind die **Polarisationen**. Zu $\Phi \equiv 0$: Φ gegeben, $\Phi \neq 0$. Da $\nabla \Phi = 0$, hat Φ' dieselbe physikalische Bedeutung, wenn gilt:

$$\Phi' = \Phi - \partial_t \lambda(\vec{x}, t) \quad , \quad \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \lambda$$

Dies sind Eichtransformationen. Wir wählen nun:

$$\lambda = \int_0^t dt' \Phi(\vec{x}, t') \implies \Phi' = 0$$

$$\implies = \nabla \vec{A} + \Delta \lambda = 0$$

Die Hamilton-Funktion des e-m-Feldes ist nun:

$$H = \int d^3x \left(\frac{1}{2} \vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2 \right)$$

\vec{E} und \vec{B} werden durch \vec{A} ausgedrückt.

4.2 Quantisierung des freien Feldes

\vec{A} ist die Lösung von $\square \vec{A} = 0$:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \left\{ \underbrace{\vec{a}(\vec{k}, t)}_{\vec{a}(\vec{k})e^{-i\omega t}} e^{i\vec{k}\vec{x}} + \underbrace{\vec{a}^*(\vec{k}, t)}_{\vec{a}^*(\vec{k})e^{i\omega t}} e^{-i\vec{k}\vec{x}} \right\}$$

Wenn wir nun $\vec{E} = -\dot{\vec{A}}$, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ in H einsetzen und folgende Beziehung benutzen

$$\int d^3x e^{i(k \mp k')\vec{x}} (2\pi)^3 = \delta^3(\vec{k} \mp \vec{k}'),$$

so ergibt dies in H :

$$H = \epsilon_0 \int d^3k \omega^2 (\vec{a}\vec{a}^* + \vec{a}^*\vec{a}), \quad \omega = c|\vec{k}|$$

Die Transversalität lautet: $\vec{a}\vec{k} = 0$. Wir wählen nun zwei zu \vec{k} senkrechte Vektoren \vec{e}_1, \vec{e}_2 (Polarisations-Vektoren), mit den Eigenschaften: $\vec{e}_\sigma \vec{k} = 0$, $\vec{e}_\sigma \vec{e}_{\sigma'}^* = \delta_{\sigma\sigma'}$

Wir schreiben nun: $\vec{a}(\vec{k}, t) = \sum_{\sigma=1}^2 \vec{e}_\sigma a_\sigma(\vec{k}, t)$. Damit wird H zu:

$$H = \epsilon \int d^3k \sum_{\sigma=1}^2 \omega^2 (a_\sigma a_\sigma^* + a_\sigma^* a_\sigma) \quad (1)$$

Wir definieren neue Variablen: $Q_\sigma(\vec{k}, t) := \sqrt{\epsilon_0}(a_\sigma + a_\sigma^*)$, $P_\sigma(\vec{k}, t) := \sqrt{\epsilon_0}(a_\sigma - a_\sigma^*)(-i\omega)$ Diese Variablen in (1) eingesetzt ergibt:

$$H = \sum_{\sigma=1}^2 \int d^3k \frac{1}{2} (P_\sigma^2 + \omega^2 Q_\sigma^2)$$

Dies ist eine kontinuierliche Summe aus ungekoppelten harmonischen Oszillatoren. Wir ersetzen zunächst das Integral durch eine diskrete Summe über **Zellen** im \vec{k} -Raum.

$$\int d^3k \longrightarrow \sum_{\vec{k}} \Delta V_k$$

Unsere Variablen P_σ , Q_σ und $a_\sigma(\vec{k}, t)$ gehen nun über in:

$$P_\sigma \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{\Delta V_k}} P_{\vec{k}\sigma}, \quad Q_\sigma \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{\Delta V_k}} Q_{\vec{k}\sigma}, \quad a_\sigma(\vec{k}, t) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{\Delta V_k}} a_{\vec{k}\sigma}(t)$$

Also ist H nun:

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{1}{2} (P_{\vec{k}\sigma}^2 + \omega^2 Q_{\vec{k}\sigma}^2)$$

Kanonische Quantisierung:

Der Hamilton eines harmonischen Oszillators lautet:

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \omega^2 x^2$$

P und Q gehen jetzt über in Operatoren mit kanonischen Vertauschungsregeln.

$$[P_{\vec{k}\sigma}, P_{\vec{k}'\sigma'}] = [Q_{\vec{k}\sigma}, Q_{\vec{k}'\sigma'}] = 0, \quad [Q_{\vec{k}\sigma}, P_{\vec{k}'\sigma'}] = i\hbar \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

Analog ersetzen wir die $a_{\vec{k},\sigma}$, $a_{\vec{k},\sigma}^*$ durch Operatoren:

$$a_{\vec{k}\sigma}^{(*)} \longrightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\epsilon_0}} a_{\vec{k},\sigma}^{(\dagger)}$$

mit den Vertauschungsregeln:

$$[a_{\vec{k},\sigma}, a_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}, \quad [a_{\vec{k},\sigma}^{(\dagger)}, a_{\vec{k}'\sigma'}^{(\dagger)}] = 0$$

Die Variablen $Q_{\vec{k},\sigma}$ und $P_{\vec{k},\sigma}$ lauten nun:

$$Q_{\vec{k},\sigma} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (a_{\vec{k},\sigma} + a_{\vec{k},\sigma}^\dagger), \quad P_{\vec{k},\sigma} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (-i\omega) (a_{\vec{k},\sigma} - a_{\vec{k},\sigma}^\dagger)$$

$$\implies H = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar\omega \{a_{\vec{k},\sigma}, a_{\vec{k},\sigma}^\dagger\}$$

Dies führt auf die **endgültige Form** des Hamilton-Operators:

$$\mathbf{H} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \hbar \omega (\mathbf{a}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \mathbf{a}_{\vec{k}, \sigma} + \frac{1}{2}) \quad (2)$$

Wenn wir nun den Teilchenzahloperator N definieren, können wir analog zum harmonischen Oszillator verfahren:

$$N_{\vec{k}, \sigma} := \mathbf{a}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \mathbf{a}_{\vec{k}, \sigma}, \quad \forall \vec{k}, \sigma$$

Aus den Vertauschungsregeln für die $a_{\vec{k}, \sigma}$ folgt die Wirkungsweise dieses Operators:

$$N_{\vec{k}, \sigma} |n_{\vec{k}, \sigma}\rangle = n_{\vec{k}, \sigma} |n_{\vec{k}, \sigma}\rangle, \quad n_{\vec{k}, \sigma} = 0, 1, 2, \dots, \quad \forall \vec{k}, \sigma$$

Die Wirkungsweise der $a_{\vec{k}, \sigma}$ als Aufsteiger und Absteiger lautet nun:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger |n_{\vec{k}, \sigma}\rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}, \sigma} + 1} |n_{\vec{k}, \sigma} + 1\rangle \\ \mathbf{a}_{\vec{k}, \sigma} |n_{\vec{k}, \sigma}\rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}, \sigma}} |n_{\vec{k}, \sigma} - 1\rangle \end{aligned}$$

Also kann man den Zustand $|n_{\vec{k}, \sigma}\rangle$ durch $n_{\vec{k}, \sigma}$ -maliges Anwenden des Aufsteigers aus dem Grundzustand $|0\rangle$ erzeugen:

$$|n_{\vec{k}, \sigma}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\vec{k}, \sigma}!}} (\mathbf{a}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger)^{n_{\vec{k}, \sigma}} |0\rangle$$

Die Operatoren sind im Heisenberg-Bild. Es gilt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_{\vec{k}, \sigma} = [a_{\vec{k}, \sigma}, H] = \hbar \omega a_{\vec{k}, \sigma}$$

Die Zeitabhängigkeit des Operators ist also gegeben durch:

$$a_{\vec{k}, \sigma}(t) = a_{\vec{k}, \sigma}(0) e^{i\omega t}$$

Da sich die e-Faktoren beim Produkt $a^\dagger a$ wegheben, ist der Teilchenzahloperator $N = a_{\vec{k}, \sigma}^\dagger a_{\vec{k}, \sigma}$ zeitunabhängig. Wir definieren nun für die Zukunft: $a := a_{\vec{k}, \sigma}$, $a^\dagger := a_{\vec{k}, \sigma}^\dagger$ und $N := n_{\vec{k}, \sigma}$

Analog zur E-Dynamik gibt es folgende Schwierigkeit: $\sum_{\vec{k},\sigma} \frac{1}{2} \hbar \omega(\vec{k})$ (das ist der Summand $\frac{1}{2}$ im Hamilton in (2) für den gesamten Raum) ist eine divergente Konstante. Das ist die "Nullpunktenergie" des Feldes. Diese ist ohne physikalische Bedeutung und wird daher weggelassen. Wir setzen also im folgenden:

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega a^\dagger a = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega N$$

Völlig analog verfahren wir für den Impuls des Feldes. In der klassischen E-Dynamik gilt:

$$P_{\text{klass}} = \frac{1}{c^2} \int d^3x \vec{S}, \quad \vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B}$$

Daher ist der Impulsoperator:

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \vec{k} N$$

Wir betrachten den **Zustandsraum**:

H ist eine Summe aus den Hamilton-Operatoren ungekoppelter Oszillatoren $H = \sum_{\vec{k},\sigma} H_{\vec{k},\sigma}$. Die gemeinsamen Eigenvektoren von $H_{\vec{k},\sigma} \equiv$ Eigenvektoren von H . Die Produktbasis ist:

$$|n_{\vec{k}_1,\sigma_1}, n_{\vec{k}_2,\sigma_2}, \dots\rangle := |n_{\vec{k}_1,\sigma_1}\rangle |n_{\vec{k}_2,\sigma_2}\rangle \dots$$

Nun gilt für die Wirkungsweise der Operatoren H und P :

$$H |n_{\vec{k}_1,\sigma_1}, n_{\vec{k}_2,\sigma_2}, \dots\rangle = \left(\sum_{\vec{k}_i,\sigma_i} \hbar \omega(\vec{k}_i) n_{\vec{k}_i,\sigma_i} \right) |n_{\vec{k}_1,\sigma_1}, n_{\vec{k}_2,\sigma_2}, \dots\rangle$$

$$P |n_{\vec{k}_1,\sigma_1}, n_{\vec{k}_2,\sigma_2}, \dots\rangle = \left(\sum_{\vec{k}_i,\sigma_i} \hbar \vec{k}_i n_{\vec{k}_i,\sigma_i} \right) |n_{\vec{k}_1,\sigma_1}, n_{\vec{k}_2,\sigma_2}, \dots\rangle$$

$n_{\vec{k}_i,\sigma_i}$ sind die Besetzungszahlen zu \vec{k}_i, σ_i und $n_{\vec{k},\sigma}$ ist die Zahl der **Photonen**. Photonenzustände sind total symmetrisch bezüglich Vertauschung von Teilchen, denn die a^\dagger vertauschen. Photonen sind **Bosonen**, Der Spin ist ganzzahlig.

4.3 Photonen

Photonen sind die naheliegende Interpretation. Ein freies e-m-Feld ist die Gesamtheit von freien Teilchen mit Energie $\hbar\omega$ und Impuls $\hbar\vec{k}$. Photonen sind Teilchen mit der Masse 0. $E = \hbar\omega = \hbar kc = |\vec{p}|c$. (allgemein gilt: $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$).

Der **Zustandsraum der Photonen** wird aufgespannt von freien Photonen-zuständen. Das **Vakuum** ist der Zustand ohne Photon (Grundzustand des Feldes) und wird mit $|0\rangle \equiv |0\rangle|0\rangle\dots$ bezeichnet. Das Vakuum ist normiert: $\langle 0|0\rangle = 1$. Der **Einteilchenzustand** mit einem Photon mit \vec{k} und Polarisation σ wird dargestellt:

$$|1_{\vec{k},\sigma}\rangle \equiv |\vec{k}\sigma\rangle = a^\dagger |0\rangle$$

$$a |\vec{k}\sigma\rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} |0\rangle \quad , a |0\rangle = 0$$

a^\dagger ist ein Erzeuger und a ein Vernichter von Photonen.

2- und Mehrteilchenzustände erreicht man durch Produktbildung aus $|\vec{k}\sigma\rangle|\vec{k}\sigma\rangle\dots$. Dies ergibt einen Hilbertraum $\mathcal{H}^{(n)}$ bei n-Teilchenzustände mit $n = 1, 2, \dots$

$$\mathcal{H}^{(n)} = \underbrace{\mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(1)} \times \dots \times \mathcal{H}^{(1)}}_{n\text{-mal}}$$

Der gesamte Zustandsraum ist $\mathcal{H} = \sum_{n=0}^{\infty} \oplus \mathcal{H}^{(n)}$, wobei $\mathcal{H}^{(0)}$ der Raum ist, der von $|0\rangle$ aufgespannt wird. Dieser gesamte Zustandsraum ist der **Fock-Raum**. Die Teilchenzahl ist nicht fest. Den Übergang zum Kontinuum machen wir durch Rücksetzung der Summe durch die Integrale, die wir vorher eingeführt haben:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}} \Delta V_k &\longrightarrow \int d^3 k, & \frac{\delta_{\vec{k}\vec{k}'}}{\Delta V_k} &= \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \\ \frac{1}{\sqrt{\Delta V_k}} a &\longrightarrow a_\sigma(\vec{k}), & \frac{1}{\sqrt{\Delta V_k}} |\vec{k}\sigma\rangle &\longrightarrow |\vec{k}\sigma\rangle \\ \underbrace{\langle \vec{k}\sigma | \vec{k}'\sigma' \rangle}_{= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}} &\longrightarrow \underbrace{\langle \vec{k}\sigma | \vec{k}'\sigma' \rangle}_{= \delta_{\sigma\sigma'} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')} \end{aligned}$$

$$\underbrace{[a, a^\dagger]}_{=\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}} \longrightarrow [a_\sigma(\vec{k}), a_\sigma^\dagger(\vec{k}')] = \delta_{\sigma\sigma'}\delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$$

$$a_\sigma^\dagger(\vec{k})|0\rangle = |\vec{k}\sigma\rangle \quad ; a_\sigma(\vec{k})|\vec{k}'\sigma'\rangle = \delta_{\sigma\sigma'}\delta^3(\vec{k} - \vec{k}')|0\rangle \quad ; a_\sigma(\vec{k})|0\rangle = 0$$

Das klassische Vektorpotential \vec{A} ist:

$$\vec{A}_{\text{klass}}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sum_{\sigma} \{ \vec{\epsilon}_{\sigma} a_{\sigma}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \vec{\epsilon}_{\sigma}^* a_{\sigma}^*(\vec{k}) e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \}$$

Das **Photonenfeld** erhalten wir durch Ersetzen von:

$$a_{\sigma}(\vec{k}) \longrightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\epsilon_0}} a_{\sigma}(\vec{k}), \quad a_{\sigma}^*(\vec{k}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\epsilon_0}} a_{\sigma}^\dagger(\vec{k})$$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \frac{d^3k}{\omega} \sum_{\sigma} \{ \vec{\epsilon}_{\sigma} \mathbf{a}_{\sigma}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{x}} + \vec{\epsilon}_{\sigma}^* \mathbf{a}_{\sigma}^\dagger(\vec{k}, t) e^{-i\vec{k}\vec{x}} \}$$

Die Vakuum-1-Teilchenamplitude beträgt nun:

$$\langle 0 | \vec{A}(\vec{x}, t) | \vec{k}\sigma \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega}} \vec{\epsilon}_{\sigma} e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

Das ist die "Wellenfunktion" des Photons. $\vec{A}(\vec{x}, t)$ ist ein Operator auf dem Fock-Raum, der die Gleichung $\square \vec{A} = 0$ erfüllt. Die Quanten \vec{E} - und \vec{B} -Felder sind nun:

$$\vec{E} = -\partial_t \vec{A} \quad \text{Feldgleichung für Quantenfeld}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad \text{Bewegungsgleichung für Quantenfeld}$$

Anmerkungen:

1. Der Operator für die Gesamt-Photonenzahl:

$$N = \sum_{\vec{k}\sigma} N_{\vec{k},\sigma} \longrightarrow \int d^3k a_\sigma^\dagger(\vec{k}) a_\sigma(\vec{k})$$

$$[N, \vec{A}] \neq 0 \neq [N, \vec{E}], \quad [N, \vec{B}] \neq 0$$

Daher sind die Photonenzahl und die \vec{E} und \vec{B} -Werte nicht gleichzeitig scharf meßbar. Wenn aber (\vec{x}, t) und (\vec{x}', t') raumartige Vektoren sind, gilt:

$$[\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}', t')] = 0$$

2. $|n\rangle$ ist ein Zustand fester Photonenzahl.

$$|n\rangle = |n_{\vec{k}_1\sigma_1}\rangle |n_{\vec{k}_2\sigma_2}\rangle \dots, \quad \sum_{\vec{k}_i\sigma_i} n_{\vec{k}_i\sigma_i} = N$$

$$\langle n | \vec{E} | n \rangle = 0 \quad \text{inkohärente Photonen}$$

$$\frac{\epsilon_0}{2} \langle n | \vec{E}^2 | n \rangle = \sum_{\vec{k}_i\sigma_i} \hbar\omega(\vec{k}_i) n_{\vec{k}_i\sigma_i} \neq 0$$

Das bedeutet: **Feste Photonenzahl gehört nicht zu einem klassischen Feld.**

3. **kohärente Zustände:** Es seien \vec{k}, σ fest. Sei $|z\rangle$ ein Zustand mit der Eigenschaft: $a|z\rangle = z|z\rangle$ mit z einer komplexen Zahl. Nun gilt:

$$\langle z | \vec{E} | z \rangle = -\frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon}} \left[\vec{\epsilon} z e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)} - \vec{\epsilon}^* z^* e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)} \right]$$

Dies ist eine klassische ebene Welle mit $|z|$ der Amplitude. Im Zustand $|z\rangle$ sind die Photonen phasenkohärent.

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|z|^2}{2}} \right) |n\rangle$$

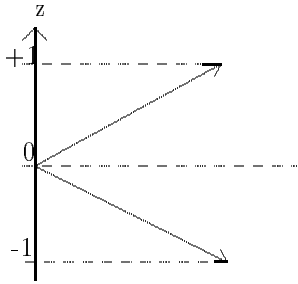
Dies folgt aus $|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$, $a^\dagger |z\rangle = z^n |z\rangle$ und der Normierung $\langle z|z\rangle = 1$

Die Wahrscheinlichkeit, daß n Photonen im Zustand $|z\rangle$ vorhanden sind, ist eine Poisson-Verteilung zum Mittelwert $|z|^2$: $\frac{|z|^{2n}}{n!} e^{-|z|^2}$

Also ist $\langle n \rangle = |z|^2$ die mittlere Zahl der Photonen mit der Schwankung $\Delta n = \sqrt{\langle n \rangle} = |z|$ und der relativen Schwankung $\frac{\Delta n}{\langle n \rangle} = \frac{1}{\sqrt{\langle n \rangle}}$. Diese ist klein für große $\langle n \rangle$.

4. **Spin des Photons:** Die Wellenfunktion bzw. \vec{A} ist eine Vektorgröße. Sie hat also 3 Komponenten, von denen jedoch nur 2 physikalisch sind. \vec{e}_1 und \vec{e}_2 stehen senkrecht aufeinander und sind zwei Basis-Vektoren in einem karthesischen Koordinatensystem. Die dritte Richtung ($\vec{e}_3 := \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$) ist unphysikalisch, hat für festes \vec{k} 3 Freiheitsgrade und entspricht der Projektion von Spin 1 auf die \vec{k} -Richtung, der **Helizität**.

- Physikalisch sind nun \vec{e}_1, \vec{e}_2 und Linearkombination aus Spin +1 und Spin -1.
- Unphysikalisch ist \vec{e}_3 Spin 0.



Wir führen nun neue Koordinaten ein:

$$\vec{e}_{\pm}^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_1 \mp i\vec{e}_2)$$

$$\sum_{\sigma} \vec{e}_{\sigma} a_{\sigma} = \vec{e}_{+} a_R + \vec{e}_{-} a_L$$

Mit den Erzeugern:

$$a_L^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^{\dagger} - ia_2^{\dagger}) \quad , \quad a_R^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1^{\dagger} + ia_2^{\dagger})$$

a_R^{\dagger} erzeugt Spin +1 und **rechtszirkular**, und a_L^{\dagger} erzeugt Spin -1 und **linkszirkular**.

4.4 Wechselwirkung von Strahlung mit Materie

Wir betrachten ein System ohne Strahlungsfeld. $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$, z. B. ein e^- im Atom. $V(r) = 0$ gilt für ein freies Teilchen. Das Strahlungsfeld ist

durch das Coulomb-geeichte Vektorpotential $\vec{A}(\vec{x}, t)$ mit $\nabla \vec{A} = 0$ gegeben. Der Hamilton-Operator des Gesamtsystems lautet nun:

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - e\vec{A})^2 + V(r) + H_{\text{Feld}} \quad , \text{mit}$$

$$H_{\text{Feld}} = \frac{1}{2} \int d^3x (\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2)$$

Die Basis des Zustandsraumes ist ein Produktraum aus den Atom- und Photonzuständen: $|a\rangle |n\rangle$. Wenn wir nun das Quadrat ausquadrieren, erhalten wir die neuem Summanden:

$$H = \left[\frac{\vec{P}}{2m} + V(r) \right] + H_{\text{Feld}} + H_1 + H'_1$$

$$H_1 = -\frac{e}{m} \vec{A} \vec{P}, \quad H'_1 = \frac{e}{2m} \vec{A}^2$$

Dies ist der Fall, da $\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ und $\nabla \vec{A} = 0$.

Wir betreiben nun **Störungsrechnung bzgl. H_1 und H'_1** . Dazu schreiben wir die Operatoren im Wechselwirkungsbild:

$$\vec{P}(t) := \vec{P}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \vec{P}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}$$

$$a_\sigma(\vec{k}, t) := a_\sigma^I(\vec{k}, t) = a_\sigma(\vec{k}) e^{-i\omega t}$$

Die a_σ^\dagger werden entsprechend definiert. Im folgenden wird der Index I weggelassen. Der Anfangszustand $|i\rangle$ bei $t = 0$ ist ein Produktzustand zu H_0 und H_{Feld} mit n Photonen:

$$|i\rangle = |a\rangle |\vec{k}_1 \sigma_1, \vec{k}_2 \sigma_2, \dots\rangle$$

Der Zustand $|f\rangle$ ist ein Produktzustand zu H_0 und n' Photonen:

$$|f\rangle = |b\rangle |\vec{k}'_1 \sigma'_1, \vec{k}'_2 \sigma'_2, \dots\rangle$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist das System im Zustand $|i\rangle$. Gesucht ist Übergangsamplitude für positive Zeiten in den Zustand $|f\rangle$:

In 1. Ordnung Störungsrechnung ist diese Amplitude:

$$A_{fi} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle f | \underbrace{H_1(t') + H'_1(t')}_{\text{WW-Bild}} | i \rangle$$

$H_1 \sim \vec{A}\vec{P}$ ist linear in $a, a^\dagger \implies$ Die Photonenzahl in $|f\rangle$ und $|i\rangle$ ist um 1 verschieden. $H_1' \sim \vec{A}^2$ ist bilinear in $a, a^\dagger \implies$ Die Photonenzahl ist um 2 verschieden, oder gleich.

Da für Strahlungsübergänge 1. Ordnung im Atom $|a\rangle \neq |b\rangle$ ist, kommt nur H_1 in Frage.

Spontane Emission:

Das ist die Emission von Licht durch ein angeregtes Atom. Der Ausgangszustand ist ein Zustand ohne Photon: $|i\rangle = |a\rangle|0\rangle$. Dieser geht in einen Zustand über, der 1 Photon enthält: $|f\rangle = |b\rangle|\vec{k}\sigma\rangle$. Die Energie E_b muß aber kleiner als E_a sein. (Sei $|b\rangle$ z.B. der Grundzustand) Nun ist die Übergangsamplitude:

$$A_{fi} = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle b, \vec{k}\sigma | \frac{e}{m} \vec{A}\vec{P} | a, 0 \rangle$$

$$A(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sum_{\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega}} \left\{ \vec{\epsilon}_{\sigma'} a_{\sigma'}(\vec{k}') e^{-i\omega't' + i\vec{k}'\vec{x}} + \vec{\epsilon}_{\sigma'}^* a_{\sigma'}^\dagger(\vec{k}') e^{i\omega't' - i\vec{k}'\vec{x}} \right\}$$

$$A_{fi} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{e}{i\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega}} \int_0^t dt' e^{i\omega t'} \vec{\epsilon}_{\sigma}^* \underbrace{\langle b | e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{p}(t') | a \rangle}_{\text{zu bestimmen}}$$

In der elektrischen Dipolnäherung ($e^{-i\vec{k}\vec{x}} \approx 1$, wenn die Wellenlänge sehr viel größer ist, als die Abmessungen des Atoms) ist das Impulsmatrixelement:

$$\begin{aligned} \langle b | \vec{p} | a \rangle &= m \langle b | \dot{\vec{x}}(t) | a \rangle = \frac{m}{i\hbar} \langle b | [\vec{x}(t'), H_0] | a \rangle \\ &= \frac{m}{i} \left(\frac{E_0 - E_b}{\hbar} \right) \langle b | \vec{x}(t') | a \rangle = \frac{m}{i} \omega_{ab} e^{-i\omega_{ab}t'} \underbrace{\langle b | x | a \rangle}_{\vec{x}_{ba}} \end{aligned}$$

Dies eingesetzt in die Übergangsamplitude ergibt die Übergangswahrscheinlichkeit:

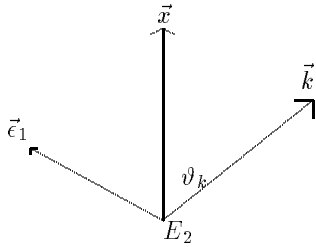
$$|A_{fi}|^2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_0} \frac{e^2}{\hbar^2} \omega_{ab}^2 |\vec{x}_{ba} \vec{\epsilon}_{\sigma}^*|^2 \underbrace{\left| \int_0^t dt' e^{i(\omega - \omega_{ab})t'} \right|^2}_{\approx t 2\pi\delta(\omega - \omega_{ab}) = f(t, \omega)}$$

Die Übergangsrate für den Übergang von $|i\rangle$ nach $|f\rangle$ mit den Photonenimpuls d^3k bei \vec{k} und 0 ist:

$$dw_{fi} = \frac{1}{t} |A_{fi}|^2 d^3k$$

Die gesamte Rate für $|a\rangle$ nach $|b\rangle$ ist:

$$w_{ba} = \sum_{\sigma=1}^2 \int dw_{fi} = \frac{1}{t} \sum_{\sigma} \int d^3k |A_{fi}|^2 = \frac{1}{8\pi^2} \frac{e^2}{\epsilon_0 \hbar c^3} \omega_{ba}^3 \int d\Omega_k \underbrace{\sum_{\sigma} |\vec{x}_{ba} \vec{\epsilon}_{\sigma}^*|^2}_{= \sin^2 \vartheta_k |\vec{x}_{ba}|^2}$$



$$w_{ba} = \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \omega_{ab}^3 |\langle b | \vec{x} | a \rangle|^2$$

Anmerkung:

Wenn wir die Feinstrukturkonstante $\alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ definieren, ist:

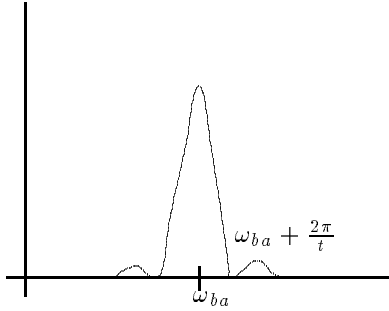
$$w_{ba} = \alpha \frac{4\omega_{ab}^3}{3c^2} |\langle b | \vec{x} | a \rangle|^2 = c_1 \alpha (+c_2 \alpha^2 + c_3 \alpha^3 + \dots)$$

Wir betrachten nun die **Lebensdauer** eines Zustandes: Ein Zustand $|a\rangle$ hat eine endliche Lebensdauer. Falls der Übergang $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$ der einzige mögliche Übergang ist, ist die Lebensdauer $\tau := \frac{1}{w_{ba}}$. Falls die Übergänge $|a\rangle \rightarrow |b_j\rangle, j = 1, 2, \dots$ möglich sind, ist $\sum_j w_{ba} = \frac{1}{\tau}$ die Gesamtrate. Falls

N_a Atome im Zustand $|a\rangle$ sind, gilt:

$$\frac{1}{N_a} dN_a = -w_{ba} dt = -\frac{1}{\tau} dt = const$$

$$\frac{2\pi}{t} \ll \omega_{ab} \quad , t \gg \frac{2\pi}{\omega_{ab}} \iff \tau \gg \frac{2\pi\hbar}{E_a - E_b}$$



Typische Größenordnungen sind, wenn $E_b - E_a \sim 1\text{eV}$ (optische Übergänge), $\tau \sim 10^{-8}$. $\frac{\hbar}{1\text{eV}} = \frac{6,6 \cdot 10^{-16}\text{eVs}}{1\text{eV}} \sim 10^{-15}\text{s}$.

Die **Linienbreite** ist: Wenn $|a\rangle$ kein Eigenzustand von H_0 ist, wird das $e^{-\frac{t}{\tau}}$ -Verhalten dadurch erreicht, daß man $|a\rangle$ ersetzt durch: $|a\rangle e^{-\frac{t}{2\tau}} = |a\rangle e^{-\frac{\Gamma}{2}t}$. Man definiert also: $\Gamma := \frac{1}{\tau}$. Dies muß man dann in der Übergangsamplitude berücksichtigen:

$$A_{fi} = (\dots) \int_0^t dt' e^{-i(\omega + \omega_{ab})t' - \frac{\Gamma}{2}t'} |\dots|^2$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A_{fi} = (\dots) \frac{1}{(\omega - \omega_{ab})^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

Die Ausnahme ist, wenn alle anderen Faktoren schwach ω -abhängig sind, $\omega \rightarrow \omega_{ab}$. Die Rate führt auf die natürliche Linienform:

$$\frac{dW_{ba}}{d\omega} = w_{ba} \Big|_{\Gamma=0} \frac{1}{(\omega - \omega_{ab})^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

Die Näherung ist gut für $\Gamma\hbar \ll E_b - E_a$

Wir betrachten die **induzierte Emission**: Wenn $|i\rangle = |a\rangle |\dots n_{\vec{k}\sigma} \dots\rangle$ und $|f\rangle = |b\rangle |\dots n_{\vec{k}\sigma} + 1 \dots\rangle$, wobei $n_{\vec{k}\sigma}$ die Anzahl der Photonen mit Impuls \vec{k} und Polarisation σ ist. Dies ergibt einen Faktor $\sqrt{n_{\vec{k}\sigma} + 1}$ in A_{fi} . In der Rate ergibt das einen Faktor $n_{\vec{k}\sigma} + 1$ (Normierung auf den Fluß einfallender Photonen $n_{\vec{k}\sigma} \hbar\omega c \rightarrow$ Wirkungsquerschnitt).

Anders bei der **Absorption**: Wenn $|i\rangle = |a\rangle |\dots n_{\vec{k}\sigma} \dots\rangle$ und $|f\rangle = |b\rangle |\dots n_{\vec{k}\sigma} - 1 \dots\rangle$, ergibt es einen Faktor $\sqrt{n_{\vec{k}\sigma}}$ in A_{fi} und einen Faktor $n_{\vec{k}\sigma}$. Die Normierung auf die einfallende Stromdichte ergibt den Absorptions-WQ (keine Integration über \vec{k} und eine Summation über σ). Für realistische Situationen muß man über das Spektrum der einlaufenden Welle integrieren.

Wenn wir nun auch **höhere Multipole** zulassen, entwickeln wir $e^{-i\vec{k}\vec{x}}$ bis zu höheren Termen: $e^{-i\vec{k}\vec{x}} \simeq 1 - i\vec{k}\vec{x} + (-i\vec{k}\vec{x})^2 \frac{1}{2} + \dots$. Dies ermöglicht **Multipol-Übergänge**. Sei El ein elektrischer 2^l -Pol und Ml ein magnetischer 2^l -Pol. Betrachten wir nun die Entwicklung 1. Ordnung: $e^{-i\vec{k}\vec{x}} = 1 - i\vec{k}\vec{x}$. Damit wird das Impulsmatrixelement:

$$\langle b | e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{p} | a \rangle = \underbrace{\langle b | \vec{p} | a \rangle}_{\text{Dipol}} - i \underbrace{\langle b | (\vec{k}\vec{x}) \vec{p} | a \rangle}_{\text{neu}}$$

Wir machen einige Definitionen (magnetisches Moment): $\vec{\mu} := \frac{e}{2m} \vec{L}$, $\vec{x} \equiv \vec{x}(t)$, $\vec{p} \equiv \vec{p}(t) = m\dot{\vec{x}}(t)$. In A_{fi} zeigt sich die :

$$\begin{aligned} \frac{e}{\hbar m} \bar{\epsilon}_\sigma^* \langle b | (\vec{k}\vec{x}) \vec{p} | a \rangle &= \frac{1}{\hbar} e \bar{\epsilon}_\sigma^* \langle b | \frac{1}{2} \frac{d}{dt} [(\vec{k}\vec{x})\vec{x}] + \frac{1}{2} \vec{k} \times (\vec{x} \times \dot{\vec{x}}) | a \rangle \\ &= \frac{e}{\hbar} \underbrace{\frac{E_a - E_b}{\hbar}}_{\omega_{ab}} \frac{1}{2i} \langle b | (\vec{k}\vec{x})\vec{x} | a \rangle \bar{\epsilon}_\sigma^* + \frac{1}{\hbar} \frac{e}{2m} \underbrace{\langle b | \vec{k} \times \vec{L} | a \rangle \bar{\epsilon}_\sigma^*}_{\frac{1}{\hbar} \bar{\epsilon}_\sigma^* [\vec{k} \times \langle b | \vec{\mu} | a \rangle]} \end{aligned}$$

Die **Auswahlregeln** sind: (diagonal in l (??)): $l' = 1$, $m' = m \pm 1$.

$$\vec{k} \times \langle b | \vec{\mu} | a \rangle \bar{\epsilon}_\sigma^* = \frac{\omega_{ab}}{2i} \sum_{j,l} k_j \bar{\epsilon}_{\sigma,l}^* \langle b | e(x_j x_l - \frac{1}{3} \delta_{jl} \vec{x}^2) | a \rangle$$

Wir definieren nun den **elektrischen Quadrupoltensor**: $Q_{jl} = e(x_j x_l - \frac{1}{3} \delta_{jl} \vec{x}^2)$, der spurfrei ist. Er hat also 5 unabhängige Komponenten, die als Linearkombination geschrieben werden können. $Y_{2,m,m=-2,\dots,2}$. Y_{2m} ist ein irreduzibler Tensoroperator der Stufe 2.

$$Q_{jl} \xrightarrow{l=2} e r^2 Y_{2m} \equiv Q_m^{(2)}$$

$$\langle n'l'm' | Q_\mu^{(2)} | nlm \rangle \xrightarrow{\text{Wigner}} = \underbrace{\langle n'l' || Q^{(2)} || nl \rangle}_{\text{red. Matrixel.}} \underbrace{\langle lm, 2\mu | l'm' \rangle}_{\text{liefert Auswahlregeln}}$$

Die $\vec{k}\vec{x}$ -Terme sind $\sim \frac{d(\text{Atom})}{\lambda}$ und daher unterdrückt gegen den elektrischen Dipol. In der Amplitude für den optischen Bereich ist die Größenordnung von $\frac{d}{\lambda} \approx 10^{-3}$, das heißt in der Rate nur 10^{-6} . Daher ist die Betrachtung höherer Terme nur sinnvoll, wenn der Dipolübergang verboten ist.

Anmerkung: Die systematische Multipolentwicklung für Strahlung ist die Entwicklung von $\vec{A}(\vec{x}, t)$ nach Y_{lm} (Drehimpulseigenzustände, Vektor-Kugelfunktionen).

Zusammenfassung:

- Das freie quantisierte e-m-Strahlungsfeld besitzt: Photonen mit der Energie $\hbar\omega$, dem Impuls $\hbar\vec{k}$, der Masse 0 und der Polarisation $\sigma = \pm$ (zirkular), welches der Spinprojektion ± 1 auf die \vec{k} -Richtung entspricht.
- Die Feldoperatoren gehorchen den kanonischen Vertauschungsregeln.
- Die Wechselwirkung mit der Materie bekommt man durch Ersetzen von \vec{P} durch $\vec{p} - e\vec{A}$ in $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$, der minimalen Substitution und der minimalen Kopplung.
- Die Übergänge sind bestimmt durch:
 1. Frequenzbedingung: $\omega = \omega_b - \omega_a = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$
 2. Matrixelement des (El, Ml) -Moments zwischen $\langle b | \dots | a \rangle$.
- Die endliche Lebensdauer angeregter Niveaus ist $\frac{1}{\tau} = w_{ba} \equiv \sum_i w_{b_i a}$. Daraus folgt, daß die natürliche Linienform $\sim \frac{1}{(\omega - \omega_{ab})^2 + \frac{\Lambda}{4}}$ ist.
- Übergänge zwischen freien Elektronen ($e + \gamma \rightarrow e'$, $e \rightarrow e' + \gamma$) sind verboten wegen der Energie-Impuls-Erhaltung. Dagegen ist $e + \gamma \rightarrow e' + \gamma'$ möglich (Compton-Effekt), in 2. Ordnung in H_1 oder 1. Ordnung in H'_1 ist:

$$\langle \vec{p}' \vec{k}' \sigma' | \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t \int_0^{t'} dt' dt^n H_1(t') H_1(t^n) | \vec{p} \vec{k} \sigma \rangle$$

$$\langle \dots | \frac{1}{i\hbar} \int_0^t t^d t' H_1(t') | \dots \rangle, \quad H_1 = \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2$$

5 Relativistische Quantenmechanik

Im folgenden sei $\hbar = c = \epsilon_0 = 1$, die Energie-Einheit sei $1eV$ und die Dimension einer Länge ist gleich der Dimension einer Zeit ist gleich der Dimension $\frac{1}{[\text{Energie}]}$. Für die Umrechnung gilt: $\hbar c = 197.327MeV \cdot fm$.

5.1 Lorentz-Transformationen, klassische Physik

Die **Prinzipien** der Relativitätstheorie sind:

1. Relativitätsprinzip: Alle Inertialsysteme sind gleichberechtigt.
2. c ist unabhängig vom Bezugssystem.

Die **Lorentz-Transformation** ist die Transformation, die ein Inertialsystem in ein anderes transformiert. Ein **Ereignis** ist gegeben durch einen 4-dimensionalen *Weltpunkt* $(t, \vec{x}) = (x^\mu)$, $\mu = 0, 1, 2, 3$. Dabei seien Weltpunkte mit dem Index oben **kontravariante** Vektoren ($x^\mu = (x^0 = t, x^k, k = 1, 2, 3)$) und Weltpunkte mit dem Index unten **kovariante** Vektoren. Die kovarianten Komponenten ergeben sich aus: $x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu$. Wobei $g_{\mu\nu}$ der **metrische Tensor** ist:

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

Dies ist die Vorzeichenkonvention, die in der Kern- und Teilchenphysik üblich ist. Ansonsten ist das Vorzeichen genau andersherum definiert.

Das **Skalarprodukt** der beiden Vektoren x^μ und y^μ ist definiert als:

$$x \cdot y = g_{\mu\nu}x^\mu y^\nu = x^0 y^0 - \vec{x} \cdot \vec{y} = x_\mu y^\mu$$

Das 4-dim. Längenquadrat ist invariant unter Lorentz-Transformationen:

$$x^2 = g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu = x_\mu x^\mu = (x^0)^2 - \vec{x}^2$$

Eine lineare Lorentz-Transformation Λ transformiert einen Vektor x^μ von einem System S in den Vektor x'^μ im System S' . Diese Transformation kann man als durch eine Matrix darstellen. Es gilt also:

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$$

Damit das Längenquadrat invariant bleibt, muß die Lorentz-Transformation folgende Bedingung erfüllen:

$$g_{\mu\nu} = \Lambda_{\rho}^{\mu} \Lambda_{\sigma}^{\nu} = g_{\rho\sigma}$$

Also ist die Determinante von $\Lambda = \pm 1$. Nun ist $d^4x = |\det(\Lambda)|d^4x' = d^4x'$ invariant (was gleichzeitig bedeutet, daß das dreidimensionale Längenelement d^3x nicht invariant ist.)

Bisher haben wir nur homogene Lorentz-Transformation betrachtet. Wenn wir noch eine Verschiebung um $a^{\mu} = \text{const}$ zulassen, erhalten wir die **Pointcaré-Transformation**, welche eine inhomogene Lorentz-Transformation ist:

$$x'^{\mu} = \Lambda_{\nu}^{\mu} x^{\nu} + a^{\mu}$$

$x'^{\mu} = \Lambda_{\nu}^{\mu} x^{\nu}$ ist die kontravariante Komponente der homogenen Lorentz-Transformation und $x_{\nu} = \Lambda_{\nu}^{\mu} x'_{\mu}$ die kovariante.

Wir betrachten nun spezielle Lorentz-Transformation :

1. Drehungen

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R_i^k \end{pmatrix}$$

R_i^k ist eine orthogonale 3×3 -Matrix mit $\det R_i^k = +1$.

2. Boost längs der x-Achse ($\vec{x} = x\vec{e}_x$, $\gamma = \sqrt{\frac{1}{1-v^2}}$):

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} = \begin{pmatrix} \gamma & -v\gamma & 0 \\ -v\gamma & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \begin{matrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{matrix} \end{pmatrix}$$

analog geht es bei Boosts in y- und z-Achse.

Die homogenen Lorentz-Transformationen bilden eine (kontinuierliche) Gruppe mit 6 Parametern (3 Drehwinkel und 3 Boost-Parameter). Sie ist eine 6-parametrische Lie-Gruppe (sie besitzt 6 Erzeugende).

3. Spiegelungen ($\det = -1$), $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ sind diskrete Transformationen.

Die gesamte Poincaré-Gruppe besitzt 4 zusätzliche kontinuierliche Parameter (a^μ), ist also eine 10-parametrische Lie-Gruppe mit den Erzeugenden $\underbrace{H, \vec{P}}_{\text{Transl.}}, \underbrace{\vec{J}}_{\text{Dreh.}}, \underbrace{\vec{K}}_{\text{Boosts}}$.

Transl. Dreh. Boosts

Wir definieren einen allgemeinen **Vierer-Vektor** a^μ , der sich unter Lorentz-Transformationen Λ folgendermaßen transformiert: $a'^\mu = \Lambda^\mu_\nu a^\nu$. Ein Skalar ist invariant unter Lorentz-Transformationen (z.B. $x^\mu x_\mu, x^\mu y_\mu$)

Ein **Tensor n-ter Stufe** A^{μ_1, \dots, μ_n} ist eine Größe, die sich unter Lorentz-Transformationen folgendermaßen transformiert:

$$A'^{\mu_1, \dots, \mu_n} = \Lambda^{\mu_1}_{\nu_1} \dots \Lambda^{\mu_n}_{\nu_n} A^{\nu_1, \dots, \nu_n}$$

Wir definieren die Differentiation: $\partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu}$ (Das ist die kovariante Komponente). Es gilt nun also:

$$\partial_\mu = \Lambda^\mu_\nu \partial'_\mu \iff \Lambda^\mu_\nu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu}$$

Analog definieren wir die kontravariante Komponente: $\partial^\mu := g^{\mu\nu} \partial_\nu$, es gilt ebenso: $\partial'^\mu = \Lambda^\mu_\nu \partial^\nu$. $\partial_0 = \partial^0 = \partial_t$, $\partial_k = \frac{\partial}{\partial x^k} = -\partial^k$ ist der Gradient. Also gilt:

$$\partial_\mu \partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = +\square$$

Der 4-dimensionale Gradient ist invariant unter Lorentz-Transformationen ($\partial'_\mu \partial'^\mu = \partial_\mu \partial^\mu$).

- Ein Skalarfeld $\varphi(x) := \varphi(x^0, x^1, x^2, x^3)$ verhält sich unter Lorentz-Transformationen folgendermaßen ($x' = \Lambda x$):

$$\varphi(x) \longrightarrow \varphi'(x') = \varphi(x)$$

- Ein Vektorfeld $V^\mu(x)$:

$$V^\mu(x) \longrightarrow V'^\mu(x') = \Lambda^\mu_\nu V^\nu(x)$$

- Ein Tensorfeld $A^{\mu_1, \dots, \mu_n}(x)$:

$$A'^{\mu_1, \dots, \mu_n}(x') = \Lambda^{\mu_1}_{\nu_1} \dots \Lambda^{\mu_n}_{\nu_n} A^{\nu_1, \dots, \nu_n}(x)$$

Wir wenden nun diesen Formalismus auf die Mechanik und die E-Dynamik an:

1. Mechanik:

Wir beschreiben die Bewegung eines Teilchens der Masse m . Die Kurve $t \rightarrow \vec{x}(t)$ sei die Bahnkurve. Die 4-dimensionale Bahn sei die Weltlinie $t \rightarrow (x^0, \vec{x})$. Das Abstandsquadrat sei invariant:

$$g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = (dx)^2 = \text{invariant} = dt^2 - (d\vec{x})^2 =: d\tau^2$$

τ ist die **Eigenzeit** eines Körpers (die Zeit im mitbewegten Koordinatensystem). Es gilt:

$$d\tau = dt \sqrt{1 - \left(\frac{d\vec{x}}{dt}\right)^2} = \frac{dt}{\gamma}$$

Das Koordinatenzeitintervall ist also gedehnt (Zeitdilatation)

- $u^\mu := \frac{dx^\mu}{d\tau}$ ist die **4er-Geschwindigkeit**
- $P_\mu := m u^\mu$ ist der **4er-Impuls**, mit $P^0 = \gamma m = E$, $\vec{P} = \gamma m \vec{v}$, mit $\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}$
- Der Zusammenhang zwischen E und \vec{P} ist:

$$(P^0)^2 - (\vec{P})^2 = m^2 = P_\mu P^\mu \iff$$

$$\boxed{\mathbf{E}^2 = \vec{\mathbf{P}}^2 + \mathbf{m}^2}$$

$$E = m \sqrt{1 + \frac{\vec{P}^2}{m^2}} = m + \frac{\vec{P}^2}{2m} + \dots$$

In 1. Näherung ist die Energie also die Summe aus der Ruheenergie m und der kinetischen Energie.

2. E-Dynamik:

- $(j^\mu) = (\rho, \vec{j})$ ist der 4er-Strom, wenn ρ die Ladungsdichte und \vec{j} die Stromdichte ist. Die Kontinuitätsgleichung $(\partial_t \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0)$ liefert die Erhaltung des 4er-Stroms:

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

Ebenfalls erhalten ist die Ladung als Integral über die Ladungsdichte:

$$\frac{d}{dt} Q = \frac{d}{dt} \int d^3x j^0 = 0$$

- $A^\mu = (\Phi, \vec{A})$ ist das 4er-Potential
- $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ ist der Feldstärke-Tensor:

$$(F^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ E^2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ E^3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{E} = -\partial_t \vec{A} - \nabla \Phi \quad , \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Wenn wir nun die Lorentz-Eichung $(\partial_\mu A^\mu = 0)$ durchführen, lauten die Maxwellgleichungen: $\partial_\nu F^{\mu\nu} = j^\mu$ und mit den Potentialen:

$$\square A^\mu = -j^\mu$$

Nach dem Übergang vom einen Koordinatensystem S in ein anderes S' , gilt:

$$\partial'_\nu F'^{\mu\nu} = j'^\mu, \quad \square' A'^\mu = -j'^\mu$$

Das heißt, es handelt sich um forminvariante **kovariante** Gleichungen.

5.2 Relativistische “Wellengleichungen”

Wir suchen eine relativistische invariante Form der Schrödinger-Gleichung. Dabei gehen wir hier den heuristischen Weg (,der historisch gegangen wurde).

5.2.1 Die Klein–Gordan–Gleichung

Die Schrödinger–Gleichung in Ortsdarstellung ist nicht Lorentz–invariant und lautet:

$$i\partial_t\psi(\vec{x}, t) = H\psi(\vec{x}, t) \quad , H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V + \dots$$

Den Hamilton–Operator für ein freies Teilchen erhalten wir durch Anwenden der Korrespondenz zur Hamilton–Funktion:

$$H = \sqrt{\vec{P}^2 + m^2} \longrightarrow H = \sqrt{\vec{P}^2 + m^2} \quad , \vec{P} : \text{Impulsoperator}$$

Die Schrödinger–Gleichung lautet: $i\partial_t\psi = H\psi$. Wie auch bisher üblich, sollen die Vertauschungsrelationen gelten: $[x^l, P^k] = i\delta^{lk}$. Diese sind erfüllt, wenn der Impulsoperator $P^k \longrightarrow \frac{1}{i}\partial_k = i\partial^k$ ist. Also gilt: $P_k = i\partial_k$

Der Hamilton–Operator ist nun also:

$$\boxed{\mathbf{H} = \sqrt{-\Delta + \mathbf{m}^2}} \quad (1)$$

Dieser Operator ist allerdings kein lokaler Operator, von daher ist er unpraktisch. Stattdessen wird also eine Gleichung für das Quadrat aufgestellt. Später werden wir den Operator durch Wurzelziehen vereinfachen. Doch zunächst betrachten wir das Quadrat:

$$(i\partial_t)^2\psi = H^2\psi = (-\Delta + m^2)\psi$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + m^2\right)\psi = 0$$

$$\boxed{(\square + \mathbf{m}^2)\psi = 0} \quad (2)$$

Dies ist die **Klein–Gordan–Gleichung**. Sie ist in lorentz–invarianter Form, wenn $\psi(\vec{x}, t) \equiv \psi(\vec{x})$ ein Skalarfeld ist, was bedeutet, daß $\psi'(x') = \psi(x)$, $x' = \Lambda x$. Das heißt, daß folgende Gleichungen gelten:

$$(\square' + m^2)\psi'(x') = 0 \quad (\square + m^2)\psi(x) = 0$$

Doch was ist die Bedeutung dieses ψ s? In der Schrödinger-Theorie ist $|\psi|^2 = \psi^*\psi = \rho \geq 0$ die Wahrscheinlichkeitsdichte im Raum und $\vec{j} = \frac{1}{2im}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$ die Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Die Kontinuitätsgleichung $\partial_t\rho + \nabla\vec{j} = 0$ führt auf die Erhaltung der Normierung: $\frac{d}{dt} \int d^3x \rho = 0$.

Kann man nun in der Klein-Gordan-Theorie $|\psi|^2$ auch als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren? ψ ist ein Skalar, also ist auch $\psi^*\psi$ ein Skalar, also kann $\int d^3x |\psi|^2$ nicht invariant sein, da d^4x invariant ist und somit d^3x nicht invariant sein kann.

Wie sieht es mit einem erhaltenen Strom aus?

$$\begin{aligned} \psi^*(\square + m^2)\psi - \psi(\square + m^2)\psi^* &= 0 \\ \iff \partial^\mu(\psi^*\partial_\mu\psi - \psi\partial_\mu\psi^*) &= 0 \quad | \cdot \frac{i}{2m} \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\underbrace{\frac{i}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right)}_{=\rho?} \right] + \nabla \left[\underbrace{\frac{i}{2m} (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)}_{=\vec{j}} \right] &= 0 \end{aligned}$$

ρ ist die 0-Komponente eines Vierer-Vektors j_μ , also ist $\int d^3x \rho$ lorentz-invariant.

Betrachten wir ein **Beispiel**:

$\psi(x) = e^{i(\vec{p}\vec{x} - Et)} \equiv e^{-ipx}$ sei Lösung der Klein-Gordan-Gleichung (2) für $E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$. Also ist $\rho = \frac{E}{m} = \frac{p^0}{m}$. Es ist $d^3x \frac{p^0}{m} = d^3x \gamma$. Da d^4x invariant ist auch $d^4x = d^3x dt = d^3x \gamma \underbrace{d\tau}_{\text{invar.}}$, also ist $d^3x \gamma$ invariant.

Ein neues Problem ist: $\psi_+ = e^{-ipx}$, $\psi_- = e^{ipx}$ führt auf $\rho_+ = \frac{E}{m}$, $\rho_- = \frac{E}{m}$. ρ hat kein definiertes Vorzeichen. $\vec{j}_+ = \frac{\vec{p}}{m}$, $\vec{j}_- = \frac{\vec{p}}{m}$.

Führen wir eine **neue Interpretation** ein: $(j^\mu) = (\rho, \vec{j})$ ist der elektromagnetische Strom, ρ die Ladungsdichte und die Klein-Gordan-Gleichung beschreibt Teilchen mit 2 Ladungen ± 1 . Das Teilchen mit +1 hat die Wellenfunktion $\psi_+(x) = e^{ipx}$, den Impuls \vec{p} und die Energie E , das andere ist das **Anti-Teilchen** mit der Wellenfunktion $\psi_- = e^{-ipx}$, den Impuls \vec{p} und die Energie E . $\partial^\mu j_\mu = 0$ heißt jetzt Ladungserhaltung. Es gibt keine weiteren Freiheitsgrade, das heißt der Spin ist 0.

Betrachten wir nun eine **konsistente Interpretation**:

ψ , die Lösung von (2) ist das **Quantenfeld**. Wir führen Operatoren ein:

$$\psi \sim \int d^3p \left[a(\vec{p})e^{-ipx} + b^\dagger(\vec{p})e^{ipx} \right]$$

$a, b, a^\dagger, b^\dagger$ sind Operatoren mit kanonischen Vertauschungsrelationen.

$a^\dagger|0\rangle = |+, \vec{p}\rangle$ ist der Erzeuger eines Teilchens mit dem Impuls \vec{p} , $b^\dagger(\vec{p})|0\rangle = |-, \vec{p}\rangle$ ist der Erzeuger von Anti-Teilchen, a, b die jeweiligen Vernichter. Die "Wellengleichungen" sind $\psi_+ = \langle 0|\psi(x)|+, \vec{p}\rangle$ und $\psi_- = \langle 0|\psi(x)|-, \vec{p}\rangle$.

Ein Klein-Gordan-Teilchen im e-m-Feld wird vom freien Teilchen ausgehend $(i\partial_0)^2\psi = (\vec{p}^2 + m^2)\psi = 0$ durch minimale Substitution ($\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$, $i\partial_0 \rightarrow i\partial_0 - e\Phi$) beschrieben.

$$(i\partial_0 - e\Phi)^2\psi = \left[(\vec{p} - e\vec{A})^2 + m^2 \right] \psi$$

Das Ganze schreiben wir kovariant mit $A^\mu = (\Phi, \vec{A})$, $P^\mu := i\partial^\mu$

$$[(i\partial_\mu - eA_\mu)(i\partial^\mu - eA^\mu) - m^2] \psi = 0$$

Die Lorentz-Transformation Λ bewirkt: $x \rightarrow x'$, $\partial_\mu \rightarrow \partial'_\mu$, $A_\mu \rightarrow A'_\mu$, $\psi(x) \rightarrow \psi'(x)$. Der Strom ist erhalten ($\partial_\mu j^\mu = 0$) Die Herleitung ist analog zur freien Klein-Gordan-Gleichung. Mit dem elektrostatischen Potential ($\vec{A} = 0$, $\Phi = \Phi(\vec{x})$, $V(\vec{x}) = e\Phi(\vec{x})$) folgt (die stationäre Lösung ist $\psi(x) = e^{-iEt}\psi(\vec{x})$) die stationäre Klein-Gordan-Gleichung:

$$(E - V)^2\psi(\vec{x}) = (-\Delta + m^2)\psi(\vec{x})$$

$$[\Delta + \mathbf{E}^2 - \mathbf{m}^2 - 2\mathbf{E}\mathbf{V} + \mathbf{V}^2]\psi(\mathbf{x}) = 0$$

Für das H-Atom ist $V = -\frac{e^2}{4\pi r} = -\frac{\alpha}{r}$. Wenn $V = V(r)$, ist $\psi(x) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. Das führt auf einen Radialterm und die Energie-Werte E_{nl} .

5.2.2 Die Dirac-Gleichung

Wir beschaffen uns den Hamilton-Operator nun durch "Wurzelziehen" ($H = \sqrt{-\Delta + m^2}$). Wir machen einen Ansatz von 1. Ordnung in allen Ableitungen (∂_0, ∂_k). Dies führt auf zusätzliche Freiheitsgrade, das führt auf

den Spin und die Positronen. Es gibt jedoch ähnliche Probleme, wie bei der Klein–Gordan–Theorie. Alles ist im Rahmen einer 1–Teilchen–Theorie, daher muß man den begrenzten Gültigkeitsbereich beachten. (Eine konsistente Theorie erhält man, wenn man ψ als einen Quantenfeldoperator einführt.) Wir machen also den Ansatz:

$$\text{“}\sqrt{-\Delta + m^2}\text{“} = \frac{1}{i} \left[\alpha^1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha^2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha^3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right] + \beta m = -\alpha^k p_k + \beta m$$

$$H = \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m$$

$$i\partial_0 \psi = H\psi$$

Die Forderung $H^2 = \vec{p}^2 + m^2 = -\Delta + m^2$, $(\square + m^2)\psi = 0$ führt auf folgende Bedingung:

$$H^2 = - \sum_{ij} \frac{\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{m}{2} \sum_j (\alpha^j \beta + \beta \alpha^j) \frac{\partial}{\partial x^j} + \beta^2 m^2$$

Diese Forderung ist erfüllt, wenn gilt:

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta_{ij}, \quad \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0, \quad \beta^2 = 1 \quad (3)$$

Dies ist durch Matrizen erfüllt, die **Dirac–Matrizen**. Die Eigenschaften der Matrizen sind: $(\alpha^i)^2 = 1$, $Spur(\alpha^i) = 0$, $Spur(\beta) = 0$, da die α^i , β hermitisch sind, sind die Eigenwerte ± 1 , die Dimension ist geradzahlig, die Spur = Summe der Eigenwerte ist 0.

- in zwei Dimensionen erfüllen nur 3 Matrizen diese Eigenschaften. Dies sind die **Pauli–Matrizen**.
- wir betrachten die minimale Realisierung in vier Dimensionen in der möglichen Darstellung als (4×4) –Matrizen.

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}$$

Worin hier die σ^i die Pauli-Matrizen sind. Dies ist die Standard-Darstellung, die Dirac-Darstellung.

Nun suchen wir eine kovariante Form der Dirac-Gleichung. Dazu führen wir formal neue Matrizen ein:

$$(\gamma^0 = \beta, \gamma^k = \beta\alpha^k) =: \gamma^\mu \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

Damit lautet nun (3):

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}$$

Wir definieren nun den Anti-Kommutator: $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} := \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu$, $\gamma_\mu := g_{\mu\nu} \gamma^\nu$ und zusätzlich: $\gamma_5 := i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ und $\sigma^{\mu\nu} := \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$. Es gilt $(\gamma^0)^2 = 1$, $(\gamma^k)^2 = -1$. $\sigma^{\mu\nu}$ ist antisymmetrisch und hat 6 unabhängige Parameter.

Wir haben jetzt einen Satz aus: $1, \gamma_5, \gamma^\mu, \gamma^\mu \gamma_5, \sigma^{\mu\nu}$, welches 16 linear unabhängige Matrizen sind. Also bilden sie eine Basis der 4×4 -Matrizen.

Die Dirac-Gleichung lautet nun:

$$i\partial_0 = (\vec{\alpha}\vec{p} + \beta m)m$$

Nun formen wir die Gleichung ein letztes mal um:

$$[i\partial_0 + i\alpha^k \partial_k - \beta m]\psi = 0$$

$$[i(\gamma^0 \partial_0 + \gamma^k \partial_k) - m]\psi = 0$$

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

Wir definieren nun das Symbol: $\not{a} := \gamma^\mu a_\mu = \gamma_\mu a^\mu$, welches ein Vierer-Vektor ist. $\not{\partial} := \gamma^\mu \partial_\mu$. Nun haben wir die endgültige Form der Dirac-Gleichung:

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

$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ ist ein 4-komponentiger Spinor (Dirac-Spinor). Der adjungierte

Spinor ist: $\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$. $\bar{\psi} := \psi^\dagger \psi^0 = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*)$ führt auf die adjungierte Dirac-Gleichung:

$$i\partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu + m\bar{\psi} = 0, (\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, (\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k, \gamma^0(\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 = \gamma^\mu$$

Dies zusammen führt uns nun auf einen erhaltenen Strom:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(\text{Dirac-Gl.}) + (\text{adj. D.-Gl.})\psi &= 0 \\ \implies \partial_\mu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) &= 0 \end{aligned}$$

Hat jetzt dieses $j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ eine physikalische Bedeutung? (Ist j^μ ein Vierer-Vektor?)

$$\rho = j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = \psi^\dagger\psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 \geq 0$$

ρ kann als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden (\rightarrow Ladungs-Dichte). Es muß gelten: $\int d^3x \rho$ ist lorentz-invariant. Falls j^μ ein Vierer-Vektor ist, gilt dies auch. Es ist zu beweisen, ob eine Transformation folgendes bewirkt: $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \rightarrow \bar{\psi}'\gamma^\mu\psi' = \Lambda^\mu_\nu \bar{\psi}\gamma^\nu\psi$.

Wie sehen die Lösugen zu festem Impuls \vec{p} aus? Dazu setzen wir $\psi(x) = e^{-ipx}u(p)$ in die Dirac-Gleichung $(i\not{\partial} - m)\psi = 0$ ein und erhalten eine algebraische Gleichung:

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

Das ist ein homogenes lineares Gleichungssystem, die Lösung im Ruhesystem ($p^\mu = (m, \vec{0})$) lautet:

$$(\gamma^0 - 1)u = 0 \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die Matrix hat den Rang 2 und daher 2 linear unabhängige Lösungen:

$$u^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi^{(1)} = u^{(1)}e^{-imt}, \quad \psi^{(2)} = u^{(2)}e^{-imt}$$

Das sind zwei Spin-Einstellungen im Ruhesystem (z-Achse).

Betrachten wir das Ruhesystem:

$$\psi = ue^{-iEt}, \quad (i \not{\partial} - m)\psi = 0$$

$$\iff (\gamma^0 E - m1)u = 0$$

$$\begin{pmatrix} (E - m)1 & 0 \\ 0 & -(E + m)1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = 0$$

Die Bedingung $\det = 0 = (E - m)^2(E + m)^2 \iff E = \pm m$ ergibt 2 Fälle:

$$1. \ E = +m : u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_+ = u^{(r)}e^{-imt}, \quad r = 1, 2$$

$$2. \ E = -m : u_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \psi_- = u^{(s)}e^{+imt}, \quad s = 3, 4$$

$u^{(r)}$, $r = 1, 2, 3, 4$ ist eine Basis im Spinorraum. Was ist die physikalische Bedeutung von $u^{(3)}$, $u^{(4)}$? (e^+)

Anmerkung: wir führen einen Darstellungswechsel (Äquivalenztransformation) der γ^μ durch. $\gamma^\mu \longrightarrow T^{-1}\gamma^\mu T$, mit T einer festen Matrix. Diese neuen Matrizen erfüllen ebenfalls die Dirac-Algebra ($\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}1$). Dies führt auf die **Chirale Darstellung**, welche später verwendet wird.

$$\gamma_{chiral}^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma_{chiral}^k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

Wir haben nun noch zwei offene Fragen:

1. Ist die Dirac-Gleichung Lorentz-invariant?

$$x \xrightarrow{\Lambda} x' = \Lambda x, \quad \psi(x) \longrightarrow \psi'(x') = S\psi(x)$$

$$(i \not{\partial} - m)\psi(x) = 0 \stackrel{?}{\longrightarrow} (i \not{\partial}' - m)\psi'(x') = 0$$

Dann ist auch $d^3x\rho = j^0 d^3x$ invariant und damit die Wahrscheinlichkeitsinterpretation sinnvoll.

2. Was sind die Lösungen zu negativer Energie, und beschreibt die Dirac-Gleichung Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$?

Die Antwort auf die erste Frage werden wir im nächsten Kapitel bekommen.

5.3 Darstellungen der Lorentz-Gruppe

5.3.1 Spinor-Darstellungen

Die homogene Lorentz-Transformation bilden eine 6-parametrische Lie-Gruppe.

1. Drehungen um die z-Achse $\vec{x}' = R\vec{x}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{infinites.}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \delta\theta & 0 \\ 0 & \delta\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= 1 + i\delta\theta J^3 \quad J^3 : \text{Erzeugende}$$

Unter Vernachlässigung von $\delta\theta^2, \dots$ gilt:

$$J^3 = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Analog gilt es für Drehungen um x-, y-Achse. Insgesamt gilt:

$$1 + i \sum_{l=1}^3 \delta\theta^l J^l = 1 + i\delta\vec{\theta} \vec{J}, \quad \vec{J} = (J^1, J^2, J^3)$$

$$J^2 = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J^1 = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Diese Matrizen erfüllen die Vertauschungsrelationen $[J^k, J^l] = i\epsilon^{klm} J^m$.

2. Boosts längs x-Achse ($\cosh\phi = \frac{1}{\sqrt{1-v_x^2}}$, $\sinh\phi = \frac{v_x}{\sqrt{1-v_x^2}}$):

$$\begin{pmatrix} \cosh\phi^1 & \sinh\phi^1 & 0 & 0 \\ \sinh\phi^1 & \cosh\phi^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{inf.}} 1 + i\delta\phi^1 K^1; \quad K^1 = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Da infinitesimal gilt: $\cosh x = 1$; $\sinh x = \delta\phi$. Analog folgt für alle Achsen:

$$1 + i\delta\vec{\phi}\vec{K}, \quad \delta\vec{\phi} = (\delta\phi^1, \delta\phi^2, \delta\phi^3)$$

$$K^2 = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad K^3 = \frac{1}{i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Wir kennen also 6 Generatoren, daraus folgen die Vertauschungsrelationen:

$$\left. \begin{array}{l} [K^1, K^2] = -iJ^3, \text{ zyklisch} \\ [J^1, K^2] = iK^3, \text{ zyklisch} \\ [J^1, K^1] = 0, \text{ usw.} \\ [J^i, J^l] = \epsilon^{ilm} J^m \end{array} \right\} \text{ existiert eine Gruppenstruktur?}$$

Wir führen neue Matrizen ein: $\vec{A} := \frac{1}{2}(\vec{J} + i\vec{K})$, $\vec{B} := \frac{1}{2}(\vec{J} - i\vec{K})$. Daraus folgen die Vertauschungsregeln für \vec{A} und \vec{B} :

$$\left. \begin{array}{l} [A^1, A^2] = iA^3, \text{ zyklisch} \\ [B^1, B^2] = iB^3, \text{ zyklisch} \\ [A^j, B^k] = 0, \forall j, k \end{array} \right\} \boxed{\text{Lie-Algebra der } SU(2) \times SU(2)}$$

Die A-Algebra ist eine $SU(2)$ und entspricht der Drehimpulsalgebra (Pauli-Matrizen), die B-Algebra ist ebenfalls eine $SU(2)$. Also ist die Lorentz-Gruppe isomorph zu $SU(2) \times SU(2)$.

Es folgt ein mathematischer Einschub zu einem neuen Begriff: das **Gruppen-Produkt**.

Seien G und H zwei Gruppen. Nun gilt:

$$G \times H = \{(g, h) | g \in G, h \in H\}$$

Eine Verknüpfung ist folgendermaßen definiert:

$$(g_1, h_1) \circ (g_2, h_2) = (g_1 \circ g_2, h_1 \circ h_2)$$

Falls nun G und H Lie-Gruppen sind, mit den Erzeugenden und Vertauschungsrelationen

- $G : T_1, \dots, T_n,$
- $[T_k, T_l] = i f_{klm}^{(g)} T_m,$
- $H : R_1, \dots, R_m$ und
- $[R_k, R_l] = i f_{klm}^{(h)} R_m,$

dann folgt: $G \times H$ ist eine Lie-Gruppe mit den Erzeugenden $T_1, \dots, T_n, R_1, \dots, R_m$ und den Vertauschungsrelationen $[T_k, R_l] = 0, \forall l, k.$

Genauer sind die Erzeugenden eigentlich: $T_i \otimes 1, \dots, 1 \otimes R_j.$ Die f_{klm} heißen Strukturkonstanten.

Betrachten wir nun die $SU(2)$: Wir betrachten irreduzible Darstellungen zu $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots,$ also die Spinor-Darstellungen der $SU(2)$. Dann sind die Darstellungen der $SU(2) \times SU(2)$ bestimmt durch (j_1, j_2) : Die Spinor-Darstellungen der $SU(2) \times SU(2)$.

- $(j_1, j_2) = (0, 0):$

Eindimensionale Darstellung, $\vec{A}, \vec{B} = 0 \implies \vec{J} = \vec{K} = 0.$ Das ist die triviale Transformation. Jede Lorentz-Transformation wird als 1 dargestellt. Ein einkomponentiger Spinor ist ein Skalar: $\psi \xrightarrow{\Lambda} \psi$ Für ein Teilchen mit fester Masse m gilt:

$$P^\mu P_\mu \psi = m^2 \psi$$

Dies ist eine invariante Gleichung. Dies führt mit $P_\mu = i\partial_\mu$ auf die Klein-Gordan-Gleichung:

$$(\square + m^2)\psi = 0$$

Die Klein-Gordan-Gleichung ist also die einfachste Darstellung der $SU(2) \times SU(2)$ und beschreibt nur spinlose Teilchen.

- $(j_1, j_2) = (\frac{1}{2}, 0)$:

$\vec{B} = 0, \vec{A} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$, mit σ den Pauli-Matrizen.

$$\vec{B} = 0 \iff \vec{K} = -i\vec{J}, \vec{J} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$$

Die infinitesimale Lorentz-Transformation lautet nun:

$$1 + i\delta\vec{\theta}\vec{J} + i\delta\vec{\phi}\vec{K} = 1 + i\frac{\vec{\sigma}}{2}(\delta\vec{\theta} - i\delta\vec{\phi})$$

Eine endliche Lorentz-Transformation wird dargestellt durch eine 2×2 -Matrix:

$$M := e^{\frac{1}{2}\vec{\sigma}(\vec{\theta} - i\vec{\phi})}$$

Dies ist eine 2-dimensionale Darstellung. Die Elemente des Darstellungsraumes sind 2-komponentige Spinoren $\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$. Eine Lorentz-Transformation bewirkt: $\xi \xrightarrow{\Lambda} M\xi$.

- $(j_1, j_2) = (0, \frac{1}{2})$:

$\vec{A} = 0, \vec{B} = \frac{\vec{\sigma}}{2}, \vec{J} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}, \vec{K} = i\vec{J} = \frac{i}{2}\vec{\sigma}$. Die Lorentz-Transformationen sind:

$$\Lambda : 1 + \frac{i}{2}\vec{\sigma}(\delta\vec{\theta} + i\delta\vec{\phi})$$

Die 2×2 -Matrix der endlichen Lorentz-Transformation lautet:

$$N := e^{\frac{i}{2}\vec{\sigma}(\vec{\theta} + i\vec{\phi})}$$

Ein 2-komponentiger Spinor $\eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}$ geht über in: $\eta \xrightarrow{\Lambda} N\eta$.

Ferner gilt:

$$N = TM^*T^{-1}, T = -i\sigma^2$$

Drehungen und Boosts können als 2-dimensionale Spinor-Darstellungen realisiert werden. Spiegelungen ($P : \vec{v} \rightarrow -\vec{v}$), daher $\vec{K} \rightarrow -\vec{K}, \vec{J} \rightarrow \vec{J}$ Pseudo-Vektor.

$$\left(\frac{1}{2}, 0\right) \xleftrightarrow{P} \left(0, \frac{1}{2}\right); \begin{pmatrix} (\frac{1}{2}, 0) & 0 \\ 0 & (0, \frac{1}{2}) \end{pmatrix}$$

Wenn wir Spiegelungen in der Darstellung aufnehmen, so erhalten wir die 4-komponentige Darstellung $(\frac{1}{2}, 0) \oplus (0, \frac{1}{2})$. Die Elemente des Darstellungsraumes sind 4-komponentige Spinoren. Dies ist also die einfachste irreduzible Darstellung der homogenen Lorentz-Gruppe nach der Trivialen. Die Darstellungs-Matrizen sind 4×4 -Matrizen und stellen Drehungen und Boosts dar. Die Elemente und Matrizen sind:

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}\vec{\sigma}(\vec{\theta}-i\vec{\phi})} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\vec{\sigma}(\vec{\theta}+i\vec{\phi})} \end{pmatrix}$$

Die Lorentz-Gruppe ist also isomorph zu $SU(2) \times SU(2)$, die Darstellungen sind (j_1, j_2) ,

- $(0, 0)$: 1-dimensional, 1-komponentiger Spinor, ψ entspricht dem Zustand eines Teilchens mit der Masse m und ist ein Skalar $\implies (\square + m^2)\psi = 0$.
- $(\frac{1}{2}, 0) \oplus (0, \frac{1}{2})$: ist irreduzibel, wenn P eingeschoben wird. $\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \psi$: sind 4-komponentige Spinoren und entsprechen den Zuständen eines Teilchens der Masse m . Eine Lorentz-Transformation bewirkt, wenn $D(\Lambda) := e^{\frac{i}{2}\vec{\sigma}(\vec{\theta}-i\vec{\phi})}$ und $\bar{D}(\Lambda) := e^{\frac{i}{2}\vec{\sigma}(\vec{\theta}+i\vec{\phi})}$:

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \xrightarrow{\Lambda} \begin{pmatrix} D(\Lambda) & 0 \\ 0 & \bar{D}(\Lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$$

$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$ ist die Zustandswellenfunktion der Masse m . Folgt daraus eine Bedingung für ψ ? Für Boosts gilt:

$$(m, 0) \xrightarrow{\Lambda} (p^0, \vec{p}) = (E, \vec{p}), \quad E^2 = \vec{p}^2 + m^2$$

Ein Teilchen in Ruhe wird in ein Teilchen mit dem Impuls \vec{p} transformiert. Für einen Boost (keine Drehung) in Richtung $\vec{n} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$, $\cosh \phi = \gamma = \frac{E}{m} = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}}$ gilt mit $\vec{\phi} = \vec{n}\phi$:

$$\Lambda : \xi(0) \longrightarrow \xi(\vec{p}) = e^{\frac{1}{2}(\vec{n}\vec{\sigma})\phi} \xi(0) = [\cosh \frac{\phi}{2} + (\vec{n}\vec{\sigma}) \sinh \frac{\phi}{2}] \xi(0)$$

Das folgt aus der Reihenentwicklung und $(\vec{\sigma}\vec{n})^2 = 1$, $n^2 = 1$.

$$\eta(0) \longrightarrow \eta(\vec{p}) = e^{-\frac{1}{2}(\vec{n}\vec{\sigma})}\eta(0) = \left[\cosh\frac{\theta}{2} - (\vec{n}\vec{\sigma})\sinh\frac{\phi}{2} \right]\eta(0)$$

(Benutze $\cosh\frac{\phi}{2} = \sqrt{\frac{\cosh\phi+1}{2}} = \sqrt{\frac{E+m}{2m}}$ und $\sinh\frac{\phi}{2} = \sqrt{\frac{\cosh\phi-1}{2}} = \sqrt{\frac{E-m}{2m}}$).

Im Ruhesystem ($\vec{p} = 0$, $\psi(0) = \begin{pmatrix} \xi(0) \\ \eta(0) \end{pmatrix}$) gilt mit P dem Paritätsoperator:

$$P\psi(0) = \pm\psi(0)$$

$$P \begin{pmatrix} \xi(0) \\ \eta(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta(0) \\ \xi(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi(0) \\ \eta(0) \end{pmatrix}$$

Die Bedingung hierfür ist $\xi(0) = \pm\eta(0)$. Wir wählen “+” (“-” führt auf das gleiche Ergebnis).

$$\xi(\vec{p}) = \frac{E+m+\vec{\sigma}\vec{p}}{\sqrt{2m(E+m)}}\xi(0); \quad \eta(\vec{p}) = \frac{E+m-\vec{\sigma}\vec{p}}{\sqrt{2m(E+m)}}\xi(0)$$

$$\implies \frac{E+\vec{\sigma}\vec{p}}{m}\eta(\vec{p}) = \xi(\vec{p}); \quad \frac{E-\vec{\sigma}\vec{p}}{m}\xi(\vec{p}) = \eta(\vec{p})$$

$$\begin{pmatrix} -m1 & E+\vec{\sigma}\vec{p} \\ E-\vec{\sigma}\vec{p} & -m1 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \xi(\vec{p}) \\ \eta(\vec{p}) \end{pmatrix}}_{=\psi(\vec{p})} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\left\{ E \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=:\gamma^0} - \vec{p} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}}_{=:\vec{\gamma}} - m1 \right\} \psi(\vec{p}) = 0$$

$\vec{\gamma} = (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$, $\gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}^k \\ \vec{\sigma}^k & 0 \end{pmatrix}$, γ^0, γ^k : sind die Dirac-Matrizen in chiraler Form.

$$(E\gamma^0 + \vec{\gamma}\vec{p} - m1)\psi(\vec{p}) = 0$$

$$E\gamma^0 + \vec{\gamma}\vec{p} = p_0\gamma^0 + p_k\gamma^k = p_\mu\gamma^\mu = \not{p}$$

Daraus ergibt sich die Dirac-Gleichung im Impulsraum:

$$\boxed{(\not{p} - m)\psi(\vec{p}) = 0}$$

5.3.2 Kovarianz unter Lorentz-Transformationen

Kovarianz ist Forminvarianz unter Lorentz-Transformationen. Es ist zu zeigen, ob aus $(\not{p} - m)\psi(p) = 0$ folgt: $(\not{p}' - m)\psi'(p') = 0$, wenn die gestrichenen Größen die Größen nach einer Lorentz-Transformation sind. Es folgt der Beweis mit ψ_0 dem Spinor im Ruhesystem:

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2m(E+m)}} \underbrace{\begin{pmatrix} E+m+\vec{\sigma}\vec{p} & 0 \\ 0 & E+m-\vec{\sigma}\vec{p} \end{pmatrix}}_{=: \not{p}\gamma^0 + m1} \psi_0$$

$$\psi(p) = \underbrace{\frac{\not{p}\gamma^0 + m}{\sqrt{2m(E+m)}}}_{=: S_p} \psi_0 \equiv S_p \psi_0$$

γ ist in chiraler Form. Die Inverse Transformation ist $S^{-1} = \frac{\gamma^0 \not{p} + m}{\sqrt{2m(E+m)}}$. Ein

Test ist $S_p S_p^{-1} = 1$

$$\psi'(p') = S_{p'} \psi_0 = S_{p'} S_p^{-1} \psi(p)$$

$$(\not{p}' - m)\psi'(p') = (\not{p}' - m)(\not{p}'\gamma^0 + m)(\gamma^0 \not{p} + m) \frac{1}{\sqrt{2m(E'+m)}} \frac{1}{\sqrt{2m(E+m)}} \psi(p)$$

($\not{p} = m$ nach Voraussetzung ($(\not{p} - m)\psi(p) = 0$).)

$$\sim (\gamma^0 - 1)(\gamma^0 + 1)\psi(p) = 0, \quad \text{da } (\gamma^0)^2 = 1$$

Was sind die Fundamenteigenschaften der γ^μ ?

$$\psi'(p') = S(\Lambda)\psi(p), \quad p'^\mu = \Lambda^\mu_\nu p^\nu, \quad (\not{p}' - m)\psi'(p') = 0$$

$$S^{-1}(\Lambda)(\not{p}' - m)S(\Lambda)\psi(p) = 0; \quad (\not{p} - m)\psi(p) = 0$$

Diese Gleichungen müssen beide gelten. Daher muß gelten: $S^{-1} \not{p}' S = \not{p}$.

$$S^{-1} \gamma^\mu S p'_\mu = \gamma^\nu p_\nu, \quad p_\nu = \Lambda^\mu_\nu p'_\mu$$

$$S^{-1} \gamma^\mu S p'_\mu = \Lambda_\nu^\mu p'_\mu \gamma^\nu \quad \forall p'_\mu$$

Daher gilt der **Paulische Fundamentalsatz**:

$$\boxed{\mathbf{S}^{-1} \gamma^\mu \mathbf{S}(\Lambda) = \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu}$$

Wir betrachten nun die Dirac-Gleichung im Ortsraum:

$$\psi(x) \xrightarrow{\Lambda} \psi'(x') = S(\Lambda) \psi(x)$$

$$S^{-1} \left| (i \gamma^\mu \partial'_\mu - m) \psi'(x') = 0 \right.$$

$$[i \underbrace{S^{-1} \gamma^\mu S}_{=\Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu \partial'_\mu = \gamma^\mu \partial_\nu} \partial'_\mu - m] \psi(x) = 0$$

$$(i \gamma^\nu \partial_\nu - m) \psi(x) = 0$$

Es gibt eine kovariante Schreibweise der Darstellungsmatrizen:

Für die homogene Lorentz-Transformation ($x'^\mu = \Lambda_\nu^\mu x^\nu$) gilt:

$$\boxed{g_{\mu\nu} \Lambda_\rho^\mu \Lambda_\sigma^\nu = g_{\rho\sigma}} \quad (4)$$

Für infinitesimale Lorentz-Transformationen gilt:

$$x'^\mu = x^\mu + \omega_\nu^\mu x^\nu = \underbrace{(\delta_\nu^\mu + \omega_\nu^\mu)}_{\Lambda_\nu^\mu} x^\nu$$

Aus (4) folgt: $\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$. Es gibt 6 unabhängige Komponenten (ω^{0k} , $k = 1, 2, 3, \omega^{12}, \omega^{23}, \omega^{31}$). Die Transformation ist also:

$$\boxed{x'^\mu = x^\mu + \omega^{\mu\nu} x_\nu}$$

Die Transformation von ψ unter infinitesimaler Lorentz-Transformation ($\psi'(x') = S(\Lambda) \psi(x)$) kann man bis zur 1. Ordnung entwickeln.

$$S = 1 - \frac{i}{2} \omega^{\mu\nu} S_{\mu\nu}, \quad S_{\mu\nu} = -S_{\nu\mu}$$

$$S^{-1} = 1 + \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}S_{\mu\nu} + o(\omega^2)$$

(da $S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda_\nu^\mu\gamma^\nu$)

$$\begin{aligned} (1 + \frac{i}{2}\omega^{\rho\sigma}S_{\rho\sigma})\gamma^\mu(1 - \frac{i}{2}\omega^{\rho\sigma}S_{\rho\sigma}) &= (\delta_\nu^\mu + \omega_\nu^\mu)\gamma^\nu = \gamma^\mu + \omega^{\mu\sigma}\gamma_\sigma \\ \iff \frac{i}{2}\omega^{\rho\sigma}(S_{\rho\sigma}\gamma^\mu - \gamma^\mu S_{\rho\sigma}) &= \frac{1}{2}\omega^{\rho\sigma}(\delta_\rho^\mu\gamma_\sigma - \delta_\sigma^\mu\gamma_\rho) \\ [\gamma^\mu, S_{\rho\sigma}] &= i(\delta_\rho^\mu\gamma_\sigma - \delta_\sigma^\mu\gamma_\rho) \end{aligned}$$

$$S_{\rho\sigma} = \frac{i}{4}[\gamma_\rho, \gamma_\sigma]$$

$$\begin{aligned} S &= 1 - \frac{i}{2}\omega^{\mu\nu} - \frac{i}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] = 1 + \frac{1}{8}\omega^{\mu\nu}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] \\ S^{-1} &= 1 - \frac{1}{8}\omega^{\mu\nu}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] = \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \end{aligned}$$

Dies gilt wegen $\gamma^0[\gamma_\mu, \gamma_\nu]^\dagger \gamma^0 = -[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$.

Für eine endliche Lorentz-Transformation gilt:

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

$S^{-1} = \gamma^0 S^\dagger \gamma^0$ folgt aus der Reihendarstellung Term für Term. Folgt daraus, daß $\psi^\dagger\psi$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte repräsentiert? Sei wieder mal Λ eine Lorentz-Transformation, für die gilt: $x' = \Lambda x$, $\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x)$ und $S(\Lambda) = e^{-\frac{i}{2}\omega^{\mu\nu}S_{\mu\nu}}$. Ferner gilt: $S_{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ und $S^{-1} = \gamma^0 S^\dagger \gamma^0$. Eine Spiegelung wird dargestellt durch: $S(p) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \gamma^0$ in chiraler Form.

In der Dirac-Darstellung gilt: $S(p) = \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Wir definieren die Bilineare Kovariante: $\bar{\psi}(x)\Gamma\psi(x)$.

$$\Gamma \in \{1, \gamma_5, \gamma^\mu, \gamma^\mu\gamma_5, \sigma^{\mu\nu}\}, \quad \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$$

$$1. \quad \bar{\psi}(x)\psi(x) \xrightarrow{\Lambda} \bar{\psi}'(x')\psi'(x')$$

$$\psi' = S\psi \implies \bar{\psi}' = \bar{\psi}S^{-1} \implies \bar{\psi}'\psi' \longrightarrow \bar{\psi}S^{-1}S\psi = \bar{\psi}\psi : \text{Skalar}$$

$$2. \quad \bar{\psi}\gamma^\mu\psi \xrightarrow{\Lambda} \bar{\psi}'\gamma^\mu\psi' = \bar{\psi}S^{-1}\gamma^\mu S\psi = \Lambda_\nu^\mu\bar{\psi}\gamma^\nu\psi \quad \text{Wir definieren einen Vierer-Vektor } j^\mu, \text{ mit } j^0\psi^\dagger\psi = \rho \text{ ist eine Dichte und } d^3x\rho \text{ ist ein Skalar.}$$

$$3. \quad \bar{\psi}'\sigma^{\mu\nu}\psi' = \Lambda_\mu^\alpha\Lambda_\nu^\beta\bar{\psi}\sigma^{\alpha\beta}\psi \text{ ist ein Tensor 2-ter Stufe.}$$

$$4. \quad \bar{\psi}'\gamma_5\psi' = \det(\Lambda)\bar{\psi}\gamma_5\psi \text{ ist ein Pseudoskalar ("-" bei Spiegelungen).}$$

$$5. \quad \bar{\psi}'\gamma^\mu\gamma_5\psi' = \det(\Lambda)\Lambda_\nu^\mu\bar{\psi}\gamma^\nu\gamma_5\psi \text{ ist ein Pseudo-Vektor (Axialvektor).}$$

5.3.3 Drehungen und Drehimpuls

Wir betrachten infinitesimale Drehungen $\omega^{kl} = -\omega^{lk}$ mit $\omega^{0k} = \omega^{k0} = 0$, $k = 1, 2, 3$ (3 ω^{kl} sind unabhängig). Die Drehmatrix lautet: $S = 1 - \frac{i}{2}\omega^{kl}S_{kl}$, mit $S_{kl} = \frac{i}{4}[\gamma_k, \gamma_l] = \Sigma^m \frac{1}{2}$. Die k, l, m zyklisch. Die Σ^m sind: $\Sigma^m = \begin{pmatrix} \sigma^m & 0 \\ 0 & \sigma^m \end{pmatrix}$.

Wir definieren also wieder einen Vektor: $\vec{\Sigma} = (\Sigma^1, \Sigma^2, \Sigma^3)$. Die Drehmatrix ist also jetzt:

$$S = 1 + i\vec{\omega}\vec{\Sigma}, \quad \vec{\omega} = -(\omega^{23}, \omega^{31}, \omega^{12})$$

Die Transformation einer Wellenfunktion lautet nun:

$$\psi'(x') = (1 + i\vec{\omega}\vec{\Sigma})\psi(x(x'))$$

$$x'^k = x^k + \omega^{kl}x_l \quad \iff \quad x^k = x'^k - \omega^{kl}x_l$$

$$\psi'(x') = (1 + i\vec{\omega}\vec{\Sigma})\psi(x(x')) = \psi(x(x')) + i\vec{\omega}\vec{\Sigma}\psi(x(x'))$$

$$\psi(x(x')) = \psi(x'^k - \omega^{kl}x_l) = \psi(x') + \frac{\partial\psi}{\partial x^l}(x')(-\omega^{kl}x_l) + o(\omega^2)$$

$$= \psi(x') + \underbrace{\frac{i}{2}\omega^{kl} \left(\frac{x_l}{i} \frac{\partial}{\partial x^l} - \frac{x_l}{i} \frac{\partial}{\partial x^k} \right)}_{=-L^l} \psi(x') \quad k, l, m \text{ zyklisch}$$

Dabei ist L^l der Bahndrehimpuls, den wir zusammenfassend schreiben: $\vec{L} = (L^1, L^2, L^3)$. Es gelten die wohlbekannteren Vertauschungsrelationen: $[L^1, L^2] =$

iL^3 , zyklisch. Daraus ergibt sich: $\vec{L}^2 = \sum (L^k)^2$, die Eigenwerte sind $l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$

Die Transformation sieht nun folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned}\psi(x(x')) &= \psi(x') + i\vec{\omega}\vec{L}\psi(x') \\ \implies \psi'(x') &= (1 + \frac{i}{2}\vec{\omega}\vec{\Sigma} + i\vec{\omega}\vec{L})\psi(x') \equiv (1 + i\vec{\omega}\vec{J})\psi(x')\end{aligned}$$

Das führt uns mal wieder zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \frac{1}{2}\vec{\Sigma} = \vec{L} + \vec{S}$, mit dem Spinoperator $\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\Sigma}$.

Im Ruhesystem ist $\vec{L} = 0$ und daher $\vec{J} = \vec{S}$. Nun gilt für den Eigenwert des Drehimpulsquadrates:

$$\vec{S}^2 = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^3 (\Sigma^k)^2 = \frac{3}{4} 1 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) 1$$

Der Spinor $\psi(x)$ beschreibt ein Teilchen der Masse m und dem festen Spin $\frac{1}{2}$.

Die Eigenwerte von Σ^k sind ± 1 und von den S^k $\pm \frac{1}{2}$ (doppelt!?)

Was sind die **Eigenschaften des Drehimpulses**? Der Hamilton ist, wie schon oben erwähnt: $H = \vec{P}\vec{\alpha} + \beta m$, mit $\beta = \gamma^0$ und $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$. Nun sind die Eigenschaften:

$$\begin{aligned}1. [H, L^1] &= \sum_{k=1}^3 \alpha^k [P^k, L^k] = \sum \alpha^k [P^k, x^1 P^2 - x^3 P^2] \\ &= -i(\alpha^2 P^3 - \alpha^3 P^2) = -i(\vec{\alpha} \times \vec{P})^1\end{aligned}$$

Für L^2, L^3 geht es analog. Dies führt auf die Eigenschaft:

$$[H, \vec{L}] = -i\vec{\alpha} \times \vec{P}$$

Das bedeutet, daß \vec{L} keine Erhaltungsgröße ist.

$$2. [H, \vec{S}] = [\vec{P}\vec{\alpha}, \vec{S}]$$

$$[H, S^1] = \frac{1}{2} \sum [\alpha^k, \Sigma^1] P^k = i(\vec{\alpha} \times \vec{P})^1$$

(Dies folgt mit $[\sigma^k, \sigma^l] = 2i\sigma^j$ zyklisch) Für die anderen Komponenten geht es analog, also gilt:

$$[\mathbf{H}, \vec{\mathbf{S}}] = +i\vec{\alpha} \times \vec{\mathbf{P}}$$

Das bedeutet, daß auch \vec{S} keine Erhaltungsgröße ist. Also sind die Eigenwerte der S^k keine erhaltenen Quantenzahlen.

3. Man sieht aber an den Kommutatoren, daß \vec{J} erhalten ist, das heißt es ist eine Spin–Bahn–Kopplung vorhanden.

4. $\vec{P}\vec{S}$ ist eine Erhaltungsgröße, denn:

$$[H, \vec{P}\vec{S}] = \sum P^k [H, S^k] = i\vec{P}(\vec{\alpha} \times \vec{P}) = 0$$

Wir definieren die **Helizität**: $\frac{\vec{P}\vec{S}}{|\vec{P}|}$. Ferner gilt $[H, P] = 0$. P ist also erhalten. Für Impulszustände $\vec{P} = \vec{p}$ gilt:

$$\frac{\vec{P}\vec{S}}{|\vec{P}|} = \frac{\vec{p}\vec{S}}{|\vec{p}|} = \vec{S}\vec{n}, \quad \vec{n} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}, \quad \vec{n}^2 = 1$$

Die Helizität hat den Eigenwert $\pm\frac{1}{2}$ (doppelt!)

**Teilchenzustände sind beschrieben durch
den Impuls und die Helizität**

5.4 Lösungen der freien Dirac–Gleichung

5.4.1 Impuls– und Helizitätszustände

Wir machen den Ansatz zur Lösung: $\psi(x) = w(p)e^{ipx}$, mit $p = p^\mu = (E, \vec{P})$. Die Lösung ist dann bestimmt durch:

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

Mit $\det(\not{p} - m) = 0$ für $p^0 = \pm\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$.

- Die Lösungen zu positiver Energie lauten: $\psi_+(x) = u(p)e^{-ipx}$. Das ist einfach nur eine Umbenennung. Die Lösung ist nun äquivalent zu $(\not{p} - m)u(p) = 0$.
- Die Lösungen zu negativer Energie lauten (ersetze $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$): $\psi_-(x) = v(p)e^{+ipx}$. Die Lösung ist äquivalent zu $(\not{p} + m)v(p) = 0$. (Also gilt: $v(p) \equiv w(-E, -\vec{p})$.) Für den Viererimpuls gilt: $P^\mu \psi_-(x) = -p^\mu \psi_-(x)$.

Im Ruhesystem sind die $u^{(1)}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $u^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $v^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $v^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ die Eigenzustände von Σ^3, S^3 .

Die $u^{(r)}(p)$ und die $v^{(r)}(p)$ erhält man durch Boosts: $u^{(r)}(p) = S_p u^{(r)}(0)$, $v^{(r)}(p) = S_p v^{(r)}(0)$. mit $S_p = \frac{\gamma^0 + m}{\sqrt{2m(E+m)}}$ (siehe Kapitel 5.3.2). In der Standard-Darstellung ist diese Matrix:

$$S_p = \begin{pmatrix} E + m & \vec{\sigma} \vec{p} \\ \vec{\sigma} \vec{p} & E + m \end{pmatrix}$$

In expliziter Form gilt mit $p_\pm := p^1 \pm ip^2$:

$$u^{(1)}(p) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p^3}{E+m} \\ \frac{p^+}{E+m} \end{pmatrix}; \quad u^{(2)}(p) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p^-}{E+m} \\ -\frac{p^3}{E+m} \end{pmatrix}$$

$$v^{(1)}(p) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{pmatrix} \frac{p^-}{E+m} \\ -\frac{p^3}{E+m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad v^{(2)}(p) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{pmatrix} \frac{p^3}{E+m} \\ \frac{p^+}{E+m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Damit gilt $(\not{p} - m)u(p) = 0$ und $(\not{p} + m)v(p) = 0$ (nachprüfen).

Es gilt die Orthogonalität:

$$\bar{u}^{(r)}(p)u^{(r')}(p) = \delta_{rr'}; \quad \bar{v}^{(r)}(p)v^{(r')}(p) = -\delta_{rr'}$$

$$\bar{u}^{(r)}(p)v^{(r)}(p) = \bar{v}^{(r)}(p)u^{(r)}(p) = 0$$

Und es gilt Vollständigkeit:

$$\underbrace{\sum_{r=1}^2 u^{(r)}(p)\bar{u}^{(r)}(p) = \frac{\not{p} + m}{2m}; \quad \sum_{r=1}^2 v^{(r)}(p)\bar{v}^{(r)}(p) = \frac{\not{p} - m}{2m}}_{\sum_{r=1}^2 \{u^{(r)}(p)\bar{u}^{(r)}(p) - v^{(r)}(p)\bar{v}^{(r)}(p)\} = 1 =: \Lambda_+ + \Lambda_-}$$

$\Lambda_+ = \frac{\not{p} + m}{2m}$ und $\Lambda_- = \frac{-\not{p} + m}{2m}$ sind die Projektionsoperatoren auf die Teilräume zu positiver und negativer Energie. Sie erfüllen folgende Bedingungen: $(\Lambda_+)^2 = \Lambda_+$; $(\Lambda_-)^2 = \Lambda_-$; $\Lambda_+\Lambda_- = \Lambda_-\Lambda_+ = 0$; $\Lambda_+u^{(r)} = u^{(r)}$; $\Lambda_-v^{(r)} = v^{(r)}$; $\Lambda_-u^{(r)} = \Lambda_+v^{(r)} = 0$.

Die Lösungen im Ortsraum sind:

$$\psi_+(r)(x) = u^{(r)}(p)r^{-ipx}; \quad \psi_-(r)(x) = v^{(r)}(p)e^{ipx}$$

Daraus folgt, daß $\rho_{\pm} = \psi_{\pm}^{\dagger}\psi_{\pm} = \frac{E}{m}$. Es sind keine Eigenzustände der Helizität.

Die allgemeine Lösung erhält man durch Entwickeln:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^2 \int d^3\mathbf{p} \{ \mathbf{a}_r(\mathbf{p})u^{(r)}(\mathbf{p})e^{-ipx} + \mathbf{b}_r^*(\mathbf{p})v^{(r)}(\mathbf{p})e^{ipx} \}$$

Die Helizitätszustände sind nun mit der Helizität $W := \frac{1}{2} \frac{\vec{\Sigma} \cdot \vec{P}}{|\vec{P}|}$. Für den u -Zustand ($\psi_+ = ue^{-ipx}$) gilt: $\vec{P} = \vec{p}$ und für den v -Zustand ($\psi_- = ve^{ipx}$) gilt: $\vec{P} = -\vec{p}$. Die Helizität ist also für positive Energie: $W = \frac{\vec{\Sigma} \cdot \vec{p}}{2|\vec{p}|}$ und für negative Energie: $W = -\frac{\vec{\Sigma} \cdot \vec{p}}{2|\vec{p}|}$.

Die Eigenzustände von W sind $u_{\pm}(p)$ und $v_{\pm}(p)$ mit den Eigenwerten $\pm\frac{1}{2}$ ($Wu_{\pm}(p) = \pm\frac{1}{2}u_{\pm}(p)$; $Wv_{\pm}(p) = \pm\frac{1}{2}v_{\pm}(p)$). Man nennt den Zustand zum Eigenwert $+\frac{1}{2}$ **rechtshändig** und den Zustand zum Eigenwert $-\frac{1}{2}$ **linkshändig**.

Wir betrachten einen Boost Λ_p vom Ruhesystem in die Richtung $\vec{n} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$.

$$\Lambda_p : (m, 0) \longrightarrow (E, \vec{p}); \quad W_{(0)} \longrightarrow W$$

$$W_{(0)} = \pm \frac{1}{2} \vec{\Sigma} \cdot \vec{n}$$

Die $u_{\pm}(0)$ und $v_{\pm}(0)$ sind Eigenzustände von $W_{(0)}$. Nun gilt: $u_{\pm}(p) = S(\Lambda_p)u_{\pm}(0)$ und $v_{\pm}(p) = S(\Lambda_p)v_{\pm}(0)$. **Beachte:** Beim v -Spinor ist der Spin im Ruhesystem in \vec{n} -Richtung, dann ist die Helizität $+\frac{1}{2}$.

Wir schreiben das nun in der kovarianten Form:

$$\vec{\Sigma}\vec{n} = \gamma_5 \vec{\alpha}\vec{n} = \gamma_5 \gamma^0 \vec{\gamma}\vec{n}$$

Zur Erinnerung: $\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ und $\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$.

$$\vec{\Sigma}\vec{n} = -\gamma_5 (\vec{\gamma}\vec{n})\gamma^0 = \gamma_5 \gamma_{\mu} s_{(0)}^{\mu} = \gamma_5 \not{s}_{(0)} \frac{\not{p}_{(0)}}{m}$$

($s_{(0)}^{\mu} = (0, \vec{n})$, $\gamma^0 = \frac{\not{p}_{(0)}}{m}$ und $p_{(0)}^{\mu} = (m, 0)$.)

Wenden wir nun Λ_p an:

- $p^{\mu} = \Lambda_{\nu}^{\mu} p_{(0)}^{\nu}$,
- $p_{(0)}^{\mu} \longrightarrow p^{\mu}$,
- $s^{\mu} = \Lambda_{\nu}^{\mu} s_{(0)}^{\nu}$,
- $s_{(0)}^{\mu} \longrightarrow s^{\mu}$,
- $s^{\mu} = \frac{1}{m}(|\vec{p}|, E\vec{n})$,
- $s^2 = -1$, $ps = p_{\mu} s^{\mu} = 0$.

Auf $\vec{\Sigma}\vec{n}$ angewandt ergibt sich: $\vec{\Sigma}\vec{n} \longrightarrow \gamma_5 \not{s}_{(0)}$,

$$(\vec{\Sigma}\vec{n})u_{\pm}(0) \longrightarrow \gamma_5 \not{s}_{(0)} \frac{\not{p}_{(0)}}{m} u_{\pm}(p) = \gamma_5 \not{s} u_{\pm}(p)$$

$$-(\vec{\Sigma}\vec{n})v_{\pm}(0) \longrightarrow -\gamma_5 \not{s}_{(0)} \frac{\not{p}_{(0)}}{m} v_{\pm}(p) = \gamma_5 \not{s} v_{\pm}(p)$$

$W_{(0)} \longrightarrow W$ führt auf die kovariante Form der Helizität:

$$W = \frac{1}{2} \gamma_5 \not{s}$$

Anmerkung: W kann geschrieben werden als: $W = \frac{W^\mu}{m} s_\mu$, s_μ wie oben $s^\mu = \frac{1}{m}(|\vec{p}|, E\vec{n})$. Nun gilt:

$$W^\mu = \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} S_{\nu\rho} p_\sigma, \quad S_{\nu\rho} = \frac{i}{4} [\gamma_\nu, \gamma_\rho]$$

Dies ist also ein kontravarianter Spin-Operator. $W^\mu W_\mu$ ist invariant (neben $P^\mu P_\mu$). $W^\mu W_\mu = -s(s+1)1$ mit $s = \frac{1}{2}$.

5.4.2 Lösungen zu negativer Energie, Positronen

Die Dirac-Gleichung ist geeignet zur Beschreibung von Elektronen. Immer noch offen ist allerdings die Frage, welche Bedeutung die Lösung $\psi_- = v(p)e^{+ipx}$ hat. Die "Erklärung" von Dirac ist die Löcher-Theorie:

Im Grundzustand sind alle Zustände mit negativer Energie besetzt (**Dirac-See**). Wegen des Pauli-Prinzips müssen nun Elektronen positive Energie haben. Es sind jedoch bei Energiezufuhr Anregungen möglich, wenn die Energie größer als $2m$ ist. Dann entsteht ein Elektron-Loch-Paar. Das Elektron (e^-) ist ein Teilchen mit positiver Energie E und negativer Ladung. Das Loch hat positive Ladung, positive Energie $\sqrt{p^2 + m^2}$ (also fehlende negative Energie) und den Impuls \vec{p} . Die Interpretation dieses Loches ist das **Anti-Teilchen** zum Elektron, also das **Positron** e^+ .

Die Wellenfunktion des Anti-Teilchens ist: $\psi_- = \psi_\pm(p)e^{ipx}$. Ein Positron kann nur paarweise mit einem Elektron erzeugt werden (z.B. $\gamma + \gamma \rightarrow e^+ + e^-$), wenn $E_{\gamma_1} + E_{\gamma_2} \geq 2m$. Ein Positron kann zusammen mit einem Elektron vernichtet werden: $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$.

Diese Theorie lieferte die Vorhersage des Positrons! Sie beinhaltet allerdings noch folgende Bedenken:

- Die Gesamtladung des Sees sollte null sein.
- Die Theorie ist unsymmetrisch bezüglich Teilchen und Anti-Teilchen
- Dies ist bereits keine Einteilchen-Quantenmechanik mehr. Daher ist die Wahrscheinlichkeitsinterpretation fragwürdig.
- Wie beschreibt man die Erzeugung und Vernichtung?

Eine konsistente Beschreibung liefert die *relativistische Quantenfeld-Theorie*:

$\psi(x)$ geht in einen Operator über, die Dirac-Gleichung wird eine Feldgleichung und die $a_r(p)$ und $b_r(p)$ aus der Fourierentwicklung werden zu Operatoren mit kanonischen Anti-Vertauschungsregeln. ($[\cdot, \cdot] \longrightarrow \{\cdot, \cdot\}$). Die a, a^\dagger sind nun die Vernichter und Erzeuger von Elektronen, die b von Positronen. Die Dirac-Gleichung als Einteilchen-Gleichung

- liefert ein fast richtiges Spektrum des H -Atoms
- enthält die Pauli-Gleichung als nichtrelativistischen Limes
- enthält die Spin-Bahn-Kopplung, relativistische Korrekturen
- liefert $g = 2$ für das magnetische Moment
- ist anwendbar für $E \ll 2m$, also für *genügend schwache äußere Felder* (sonst QED).

5.5 Dirac-Teilchen im e-m-Feld

Wir betrachten für ein äußeres Feld $(A^\mu) = (\phi, \vec{A})$ die minimale Substitution:

$$i\partial_\mu \longrightarrow i\partial_\mu - eA_\mu$$

$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0$ führt damit auf:

$$\boxed{[\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\psi = 0} \quad (5)$$

Adjungieren der Gleichung (5) liefert $\bar{\psi}(\gamma^\mu (i\partial_\mu + eA_\mu) + m) = 0$ und die Addition:

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

Also ist der Strom erhalten ($\partial_\mu j^\mu = 0$). Wir führen nun die Ladungskonjugation ein (C kann als 4×4 -Matrix gewählt werden):

$$C : \quad \psi(x) \longrightarrow \psi^C(c) = C\bar{\psi}^T(x), \quad \bar{\psi}^T = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ -\psi_3^* \\ -\psi_4^* \end{pmatrix}$$

$$C = i\gamma^2\gamma^0$$

Die Eigenschaften von C sind nun: $C^{-1} = C^\dagger = -C$, $C^{-1}\gamma^\mu C = (\gamma^\mu)^T$ und die Wirkung auf unsere Funktionen: $C\bar{u}^T = v$ und $C\bar{v}^T = u$. Es gilt nun:

$$\psi_+^C = C\bar{\psi}_+^T = v e^{ipx} = \psi_-$$

$$\psi_-^C = C\bar{\psi}_-^T = u e^{-ipx} = \psi_+$$

Die Dirac-Gleichung ist also symmetrisch bezüglich Ladungskonjugation:

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\psi = 0 \xrightarrow{C} [\gamma^\mu(i\partial_\mu + eA_\mu) - m]\psi^C = 0$$

Teilchen und Anti-Teilchen sind symmetrisch bezüglich Ladungskonjugation. Die Festlegung, was nun Anti-Teilchen und was Teilchen sind ist also reine Konventionssache und historisch bedingt. Neutrinos haben die Leptonenzahl 1.

5.6 Nicht-relativistischer Limes der Dirac-Gleichung

Für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld gilt:

$$(i\partial_t - e\phi)\psi(x) = [\vec{\alpha}\vec{p} + \beta m]\psi(x) \quad (6)$$

Wir betrachten ein nicht-relativistisches Elektron ($\frac{|\vec{p}|}{m} = v \ll 1$, $E - m \ll m$). Wir führen eine sinnvolle Separation der Masse gemäß durch (ψ_K, ψ_L sind 2-komponentige Spinoren):

$$\psi(x) = e^{-imt} \begin{pmatrix} \psi_K(\vec{x}, t) \\ \psi_L(\vec{x}, t) \end{pmatrix} \quad (7)$$

Dies in (6) eingesetzt ergibt gekoppelte Gleichungen für Pauli-Spinoren:

$$i\partial_t\psi_K = \vec{\sigma}(\vec{P} - e\vec{A})\psi_L + e\phi\psi_K \quad (8)$$

$$i\partial_t\psi_L = \vec{\sigma}(\vec{P} - e\vec{A})\psi_K + e\phi\psi_L \quad (9)$$

Für $v \ll 1$ ist ψ_L unterdrückt durch einen Faktor $\sim v$. $\frac{\vec{P}-e\vec{A}}{m} = \vec{v}$, $\phi \ll m(\sim v^2)$. (9) führt nun auf:

$$\psi_L = \frac{\vec{\sigma}(\vec{P} - e\vec{A})}{2m} \psi_K = \frac{(i\partial_t - e\phi)\psi_L}{2m}$$

Wir bezeichnen nun ψ_K als die *große* Komponente und ψ_L als die *kleine* Komponente. Die Entwicklung von ψ_L nach v unter Vernachlässigung von $o(v^2)$ liefert:

$$\begin{aligned} \psi_L^{(0)} &= 0 \\ \psi_L^{(1)} &= \frac{\vec{\sigma}(\vec{P} - e\vec{A})}{2m} \psi_K \end{aligned}$$

Dies in (8) eingesetzt ergibt:

$$i\partial_t \psi_K = \frac{1}{2m} [\vec{\sigma}(\vec{P} - e\vec{A})][\vec{\sigma}(\vec{P} - e\vec{A})] \psi_K + e\phi \psi_K$$

Unter Benutzung von $(\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b}) = \vec{a}\vec{b} + i\sigma(\vec{a} \times \vec{b})$ ergibt sich:

$$i\partial_t \psi_K = \frac{1}{2m} (\vec{P} - e\vec{A})^2 - \frac{e}{2m} \vec{\sigma} \underbrace{[\nabla \times (\vec{A}\psi_K) + \vec{A} \times \nabla \psi_K]}_{=(\nabla \times \vec{A})\psi_K = \vec{B}\psi_K} + e\phi \psi_K$$

Nun folgt mit $\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ und $g = 2$ die Pauligleichung:

$$\boxed{i\partial_t \psi_K = \left\{ \frac{1}{2m} (\vec{P} - e\vec{A})^2 - \frac{e}{2m} \mathbf{g} \vec{S} \vec{B} + e\phi \right\} \psi_K}$$

$g = 2$ ist also eine Konsequenz der Dirac-Gleichung. Der $\vec{S}\vec{B}$ -Term entspricht $H_{int} = -\vec{\mu}_s \vec{B}$, $\vec{\mu}_s = \frac{e}{2m} g \vec{S}$. $\vec{\mu}_s$ ist das magnetische Dipolmoment des Elektrons zum Spin s . (Beachte: $\vec{\mu}_s = \frac{e}{2m} \vec{L}$)

Das Experiment liefert jedoch $g > 2$. Den genauen Wert liefert die *QED* in einer Entwicklung:

$$\frac{g-2}{2} = \frac{\alpha}{2\pi} + c_1 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 + \dots$$

Die Wechselwirkung mit dem Photonenfeld enthält in erster Ordnung $g = 2$. Eine Störungsrechnung 2. Ordnung liefert $g = 2 + \frac{\alpha}{\pi}$.

Die Theorie liefert bis jetzt 8 Stellen für $g - 2$, die *alle* mit dem Experiment übereinstimmen.

Die nächste Näherung $\psi_L = \psi_L^{(1)}(v) + \psi_L^{(2)}(v^2)$ (systematisches Verfahren: *Foldy-Wonhnyesen-Transformation*) führt auf Korrekturterme zur Pauligleichung:

$$i\partial_t\psi_K = H\psi_K$$

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - e\vec{A})^2 - \frac{e}{2m}g\vec{S}\vec{B} + e\phi - \frac{\vec{p}^4}{8m^3} - \frac{e}{4m^2}\vec{\sigma}(\vec{E} \times \vec{P}) -$$

$$-\frac{ie}{8m^2}\vec{\sigma}(\nabla \times \vec{B}) - \frac{ie}{8m^2}\vec{P}\vec{E}$$

Für ein statisches Zentralpotential: $\vec{A} = 0$, $\phi = \phi(r)$, $V(r) = e\phi(r)$, $\vec{E} = -\nabla\phi$ gilt darin:

$$-\frac{e}{4m^2}\vec{\sigma}(\vec{E} \times \vec{P}) = \frac{1}{2m^2} \frac{1}{r} \partial_r V \underbrace{\frac{1}{2}\vec{\sigma}\vec{L}}_{\vec{S}\vec{L}}$$

Das beinhaltet die Spin-Bahn-Kopplung.

$$-\frac{ie}{8m^2}\vec{\sigma}(\nabla \times \vec{B}) = 0$$

$$-\frac{ie}{8m^2}\vec{P}\vec{E} = \frac{1}{8m^2}\Delta V$$

Dies ist der *Darwin-Term*. Für $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$ ist er $\Delta V = 4\pi\delta^{(3)}(0)$. Er trägt nur für s -Zustände bei.

5.7 Dirac-Teilchen im Zentralfeld, H-Atom

Wir betrachten ein statisches Potential $\vec{A} = 0$, $V(r) = e\phi(r)$, $i\partial_t\psi = H$, mit $H = \alpha\vec{P} + \beta m + V(r)$. Die stationären Lösungen lauten:

$$\phi = e^{-iEt}\psi(x)$$

Das Eigenwertproblem $H\psi(x) = E\psi(x)$ lautet:

$$\boxed{[\alpha\vec{P} + \beta m + V(r)]\psi(x) = E\psi(x)}$$

Es gelten die Vertauschungsrelationen

- $[H, \vec{J}] = 0,$
- $H = H_0 + V(r),$
- $[H_0, \vec{J}] = [V(r), \vec{J}] = [H, \vec{J}^2] = [H, J_3] = 0.$

Also haben H, \vec{J}^2 und J^3 gemeinsame Eigenzustände mit den Eigenwerten $E, j, m.$

$[H, P] = 0$ also ist H spiegelinvariant, und die Eigenzustände haben eine definierte Parität $\pm 1.$

Mit $\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}) \\ \chi(\vec{x}) \end{pmatrix}$ (φ, χ Spinoren) folgt:

$$\begin{pmatrix} m & \vec{\sigma}\vec{P} \\ \vec{\sigma}\vec{P} & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + V(r) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (10)$$

$$\begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}) \\ \chi(\vec{x}) \end{pmatrix} \xrightarrow{P} \gamma^0 \begin{pmatrix} \varphi(-\vec{x}) \\ \chi(-\vec{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}) \\ -\chi(-\vec{x}) \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \pm \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}) \\ \chi(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

Die Lösungen φ, χ sind von der Form $c(r)\varphi_{jm}^{(\pm)}(\Omega).$ Mit $j = l + \frac{1}{2}, l = j - \frac{1}{2},$
 $a = \sqrt{\frac{l-\frac{1}{2}+m}{2l+1}}$ und $b = \sqrt{\frac{l-\frac{1}{2}-m}{2l+1}}$ ist:

$$\varphi_{jm}^{(+)} = \begin{pmatrix} aY_{l,m+\frac{1}{2}} \\ bY_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Und mit $j = l - \frac{1}{2}, l = j + \frac{1}{2}$ (für $l > 0$) ist:

$$\varphi_{jm}^{(-)} = \begin{pmatrix} bY_{l,m+\frac{1}{2}} \\ -aY_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Die Eigenschaften der $\varphi_{jm}^{(\pm)}$ sind:

1. $\varphi_{jm}^{(\pm)}$ sind Eigenfunktionen von $\vec{J}^2, J^3, \vec{\sigma} \cdot \vec{L}.$

$$\underbrace{\vec{\sigma}\vec{L}}_{2\vec{S}\vec{L}} \varphi_{jm}^{(\pm)} = (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)\varphi_{jm}^{(\pm)} = [j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}]\varphi_{jm}^{(\pm)}$$

$$\vec{\sigma}\vec{L}\varphi_{jm}^{(\pm)} = -(1 + \kappa)\varphi_{jm}^{(\pm)} = -(1 \pm |\kappa|)\varphi_{jm}^{(\pm)}$$

κ ist $-(j + \frac{1}{2})$ für (+) und $j + \frac{1}{2}$ für (-).

2.

$$\varphi_{jm}^{(\pm)} = \frac{\vec{\sigma}\vec{x}}{r}\varphi_{jm}^{(\mp)}, \quad r = |\vec{x}|$$

3. Das Verhalten bei Spiegelungen ist:

$$l = j - \frac{1}{2} : \quad P\varphi_{jm}^{(+)} = (-1)^{j-\frac{1}{2}}\varphi_{jm}^{(+)}$$

$$l = j + \frac{1}{2} : \quad P\varphi_{jm}^{(-)} = (-1)^{j-\frac{1}{2}}\varphi_{jm}^{(-)}$$

Der Ansatz für $\psi(\vec{x})$ ist nun:

$$\psi_{jm}^* = \begin{pmatrix} i\frac{G_{jl}(r)}{r}\varphi_{jm}^l \\ \frac{F_{jl}(r)}{r}\frac{\vec{\sigma}\vec{x}}{r}\varphi_{jm}^l \end{pmatrix}$$

Mit

$$\varphi_{jm}^l = \begin{cases} \varphi_{jm}^{(+)}, & l = j - \frac{1}{2} \\ \varphi_{jm}^{(-)}, & l = j + \frac{1}{2} \end{cases}$$

Dies eingesetzt in (10) unter Benutzung von:

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma}\vec{P})\frac{f(r)}{r}\varphi_{jm}^l(\Omega) &= \underbrace{\left(\frac{\vec{\sigma}\vec{x}}{r}\right)^2}_{=1}\vec{\sigma}\vec{P}\frac{f(r)}{r}\varphi_{jm}^l \\ &= \frac{\vec{\sigma}\vec{x}}{r^2}\left[\frac{1}{i}\frac{d}{dr} + i\vec{\sigma}\vec{L}\right]\frac{f(r)}{r}\varphi_{jm}^l \\ &= \left(\frac{\vec{\sigma}\vec{x}}{r^2}\varphi_{jm}^l\right)\left[\frac{1}{i}\frac{d}{dr}\frac{f(r)}{r} - i(1+\kappa)\frac{f(r)}{r}\right] \end{aligned}$$

liefert gekoppelte Radialgleichungen:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dr}G_{jl} + \frac{\kappa}{r}G_{jl} &= [E + m - V(r)]F_{jl} \\ -\frac{d}{dr}F_{jl} + \frac{\kappa}{r}F_{jl} &= [E - m - V(r)]G_{jl} \end{aligned}}$$

Wir führen eine Variablensubstitution durch: $\epsilon_1 := m + E$, $\epsilon_2 := m - E$ und $\rho := \sqrt{\epsilon_1\epsilon_2}r = \sqrt{m^2 - E^2}r$. Die Indices jl lassen wir ab jetzt weg und

wählen das Coulomb-Potential $V(r) = -\frac{z\alpha}{r}$, mit z der Koordinationszahl und $\alpha = \frac{e^2}{4\pi}$. Nun gilt also:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{dG}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}G &= \left(\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} + \frac{z\alpha}{\rho} \right) F \\ \frac{dF}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho}F &= \left(\sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}} - \frac{z\alpha}{\rho} \right) G \end{aligned}} \quad (11)$$

Die Schritte zur Lösung von (10) sind:

1. Für $\rho \rightarrow \infty$:

$$\frac{dG}{d\rho} - \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}}F = \frac{dF}{d\rho} - \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}}G = 0$$

Da also $\begin{Bmatrix} F \\ G \end{Bmatrix} \sim e^{-\rho}$ lautet der Ansatz:

$$G = e^{-\rho} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{s+\nu}; \quad F = e^{-\rho} \sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu} \rho^{s+\nu}$$

2. Für $\rho \rightarrow 0$ gilt die Euler-DGL:

$$\frac{dG}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}G - \frac{z\alpha}{\rho}F = \frac{dF}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho}F + \frac{z\alpha}{\rho}G = 0$$

Der Ansatz lautet $G = a_0 \rho^s$ und $F = b_0 \rho^s$ unter den Bedingungen:

$$(s + \kappa)a_0 - z\alpha b_0 = z\alpha a_0 + (s - \kappa)b_0 = 0$$

$$\boxed{s = \begin{matrix} (-) \\ + \end{matrix} \sqrt{\kappa^2 - (z\alpha)^2}}$$

(-) ist nicht normierbar.

3. Wir machen also einen Reihenansatz:

$$G = e^{-\rho} \rho^{-s} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu}$$

$$G = e^{-\rho} \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu} \rho^{\nu}$$

Diesen in (11) eingesetzt ergibt eine Rekursionsformel:

$$\boxed{\begin{aligned} (s + \nu + \kappa)a_{\nu} - a_{\nu-1} - Z\alpha b_{\nu} - \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} b_{\nu-1} &= 0 \\ (s + \nu - \kappa)b_{\nu} - b_{\nu-1} + Z\alpha a_{\nu} - \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} a_{\nu-1} &= 0 \end{aligned}} \quad (12)$$

Subtrahieren dieser beiden Gleichungen liefert: $\sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} = 0$. Daraus folgt:

$$\left[s + \nu + \kappa - Z\alpha \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} \right] a_{\nu} = \left[(s + \nu - \kappa) \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} + Z\alpha \right] b_{\nu} \quad (13)$$

4. Das asymptotische Verhalten ($s \rightarrow \infty$) ist durch große ν bestimmt. (14) führt also auf:

$$\boxed{a_{\nu} \simeq \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} b_{\nu}} \quad (14)$$

(12) und (14) sind für große ν :

$$\nu a_{\nu} - 2a_{\nu-1} = 0$$

Also ist:

$$\boxed{\begin{aligned} a_{\nu} &= \frac{2}{\nu} a_{\nu-1} \\ b_{\nu} &= \frac{2}{\nu} b_{\nu-1} \end{aligned}}$$

F, G sind also $\sim e^{\rho}$.

5. Physikalische Lösungen gibt es nur, wenn die ν -Reihe abbricht. Es muß also die Bedingung gelten: $a_{\nu+1} = b_{\nu+1} = 0$ für alle $\nu \geq n_r$. Aus (12) folgt für $\nu = n_r + 1$:

$$a_{n_r} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} b_{n_r} = 0$$

$$b_{n_r} + \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} a_{n_r} = 0$$

Aus (13) folgt dann für $\nu = n_r$: $a_{n_r} \neq 0$

$$\left[s + n_r + \kappa - Z\alpha \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} \right] a_{n_r} = \left[s + n_r - \kappa + Z\alpha \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}} \right] a_{n_r}$$

Also gilt:

$$\frac{s + n_r}{Z\alpha} = \frac{E}{\sqrt{m^2 - E^2}}$$

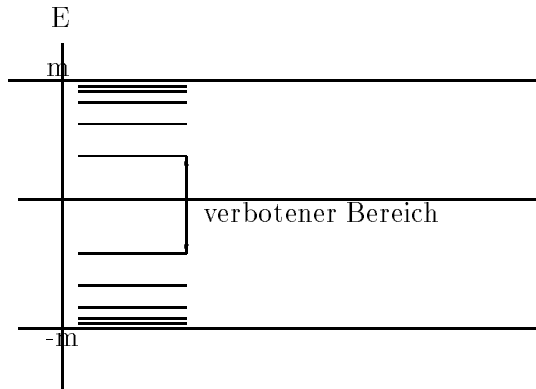
, da gilt: $\sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}} - \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}} = -\frac{2E}{\sqrt{m^2 - E^2}}$.

Auflösen nach E ($E > 0$ für Elektronen) liefert:

$$E = \frac{m}{\sqrt{a + \left(\frac{Z\alpha}{s+n_r}\right)^2}}$$

Mit:

$$s = \sqrt{\left(1 + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2}$$



Mit der Hauptquantenzahl n : $n = n_r + j + \frac{1}{2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$ und $0 < j + \frac{1}{2} \leq n$ folgen die Energieniveaus. Im Grundzustand ist: $E_{n=1, j=\frac{1}{2}} = m\sqrt{1 - Z^2\alpha^2}$. Die Niveaus sind:

$$\mathbf{E}_{nj} = \frac{m}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}}\right)^2}}$$

Anmerkung: $j \rightarrow l$ ergibt das Spektrum der Klein–Gordan–Gleichung.

Diskussion:

1. Die Niveaus sind nur von n, j anhängig (nicht von l).
2. Die Klassifizierung ist analog zur nicht-relativistischen Bezeichnungweise: n, l, j .

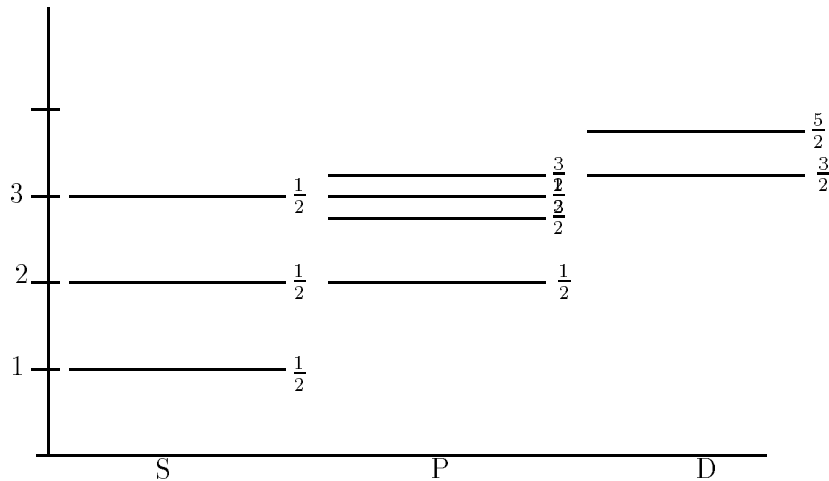
$$j = \frac{1}{2} : l = \begin{cases} 0 & S \\ 1 & P \end{cases}$$

$$j = \frac{3}{2} : l = \begin{cases} 1 & P \\ 2 & D \end{cases}$$

Die Termbezeichnungen sind: ${}^n S_j, {}^n P_j$:

Term	${}^1 S_{\frac{1}{2}}$	${}^2 S_{\frac{1}{2}}$	${}^2 P_{\frac{1}{2}}$	${}^2 P_{\frac{3}{2}}$
n	1	2	2	2
l	0	0	1	1
j	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$

Für ein festes $E_{nj'} > E_{nj}$ ist $j' > j$.



3. Die Entwicklung nach Potenzen von $Z\alpha$ liefert:

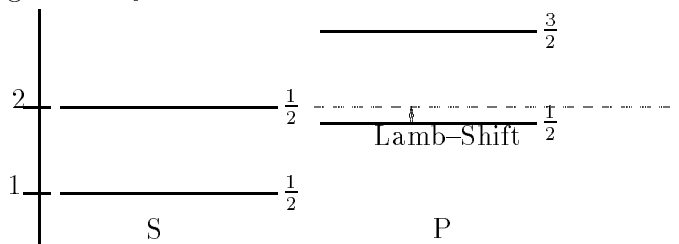
$$E_{nj} = m - \frac{Z^2 \alpha^2 m}{Zn^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] + \dots$$

m ist die Ruheenergie des Elektrons. Der zweite Term ist das Schrödingerspektrum und der dritte Term sind die relativistischen Korrekturen:

Erstens die Spin–Bahn–Kopplung und zweitens der p^4 –Term zur kinetischen Energie.

4. $\sqrt{1 - Z^2\alpha^2}$ ist imaginär für $4Z\alpha > 1$, $z > \frac{1}{\alpha} = 137$. Bereich der Vielteilchentheorie. Die Dirac–Gleichung ist als 1–Teilchengleichung nicht mehr anwendbar, wenn die Feldstärke zu groß ist.
5. Das Spektrum E_{nj} enthält die folgenden beobachtbaren Effekte nicht:

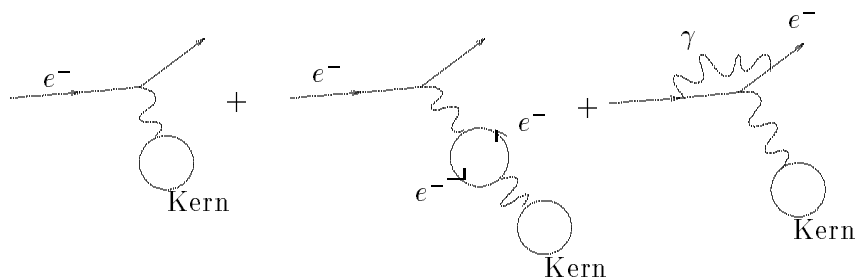
- Hyperfeinstruktur–Aufspaltung (Wechselwirkung mit dem Kern–Spin)
- Lamb–Shift: Die S –Niveaus sind gegenüber den P –Niveaus zu gleichem j nach oben verschoben.



bei großen n, l schwächer

Die Erklärung ist aus Quanteneffekten aus der QED ableitbar.

Coulomb:



Die letzten beiden *Feynman*–Graphen ergeben den Lamb–Shift.

Index

- Übergangswahrscheinlichkeit, 66, 70
- Absorption, 92
- Absteiger, 83
- Anti-Teilchen, 101
- Aufsteiger, 83
- Bewegungsgleichung, 65, 67
- Bilder, 65
- Bilineare Kovariante, 115
- Bohrsche Frequenzbedingung, 75
- Boost, 96
- Bosonen, 84
- Brechungsindex, 14
- Chirale Darstellung, 106
- Coulomb-Eichung, 80
- Dirac-Darstellung, 104
- Dirac-Gleichung, 113
- Dirac-Matrizen, 103
- Drehungen
 - infinitesimale, 46
- Driac-See, 122
- Eichtransformationen, 80
- Eigenzeit, 98
- Emission, 76
 - induzierte, 92
 - spontane, 90
- Ereignis, 95
- Erhaltungsgröße, 40
- Feinstrukturkonstante, 91
- Feldstärke-Tensor, 99
- Fock-Raum, 85
- Gesamtdrehimpuls, 117
- Gesamtrate, 91
- goldene Regel, 74
- Gruppen-Produkt, 108
- Heisenberg-Bild, 67
- Heisenberg-Gleichung, 67
- Helizität, 88, 118, 120
- Klein-Gordan-Gleichung, 100, 109
- Kohärenz, 87
- Kovarianz, 113
- Ladungskonjugation, 123
- Lebensdauer, 91
- Linienbreite, 92
- Linienform
 - natürliche, 92
- linkshändig, 120
- linkszirkular, 88
- Lorentztransformation, 95
- Loretz-Eichung, 99
- magnetische Dipolstrahlung, 93
- Maxwell-Gleichungen, 80
- Maxwellgleichungen, 99
- metrischer Tensor, 95
- Multipolübergänge, 93
- Møller-Operator, 22
- Optik, 14
- Pauli-Matrizen, 103
- Paulischer Fundamentalsatz, 114
- Photonenfeld, 86
- Pointcaré-Transformation, 96
- Poisson-Klammern, 68

- Polarisationen, 80
- Quadrupolwechsel, 93
- Quantenfeld, 102
- rechtshändig, 120
- rechtszirkular, 88
- Relativitätsprinzip, 95
- Schrödinger-Bild, 65
- Skalar, 97
- Skalarfeld, 97
- Skalarprodukt, 95
- Spin-Bahn-Kopplung, 118
- Spinoperator, 117
- Störung
 - in endl. Zeit, 74
 - zeitlich konstant, 72
- Strahlungsfeld, 80
- Streuamplitude, 9
- Streuphase, 30
- Streuung
 - elastische, 9
- Strukturkonstanten, 109
- Teilchenzahloperator, 83
- Tensor, 97
- Transversalität, 80
- unitär, 40
- Vakuum, 85
- Vektoren
 - kontravariant, 95
 - kovariant, 95
- Vektorfeld, 97
- Vierer-Vektor, 97
- Wechselwirkungsbild, 69
- Wellenpaket, 9
- Weltlinie, 98
- Weltpunkt, 95
- Zeitdilatation, 98
- Zellen, 82
- Zustandsraum, 84