

Höhere Quantenmechanik

Advanced quantum mechanics

Marc Wagner

Goethe-Universität Frankfurt am Main – Sommersemester 2023

Version: 12. Juli 2023

Inhaltsverzeichnis

1	Wiederholung grundlegender Konzepte der Quantenmechanik (QM)	4
1.1	Übergang von klassischer Mechanik zur QM	4
1.2	Rechnungen mit Hilfe von Darstellungen	5
1.3	Eigenwerte von Operatoren, Messung von Observablen	6
1.4	Zeitentwicklung	7
2	Time-dependent perturbation theory	8
2.1	Basics	8
2.2	Example: harmonic oscillator and electric field	10
2.3	Fermi's golden rule	11
3	Streutheorie	14
3.1	Streuung in 1 Raumdimension	14
3.2	Streuung in 3 Raumdimensionen	19
3.2.1	Streuung eines durch ein Wellenpaket beschriebenen Teilchens	19
3.2.2	Differentieller und totaler Wirkungsquerschnitt	24
3.2.3	Wiederholung: Freie stationäre SG in Kugelkoordinaten	26
3.2.4	Partialwellen und Streuphasen	28
3.2.5	Optisches Theorem (aus Zeitgründen in der Vorlesung nicht besprochen) .	32
3.2.6	Bornsche Näherung für das gesamte Streuproblem	32
3.2.7	Bornsche Näherung für Partialwellen	33
3.2.8	Näherungsfreie Bestimmung von Streuphasen	35
3.2.9	Beispiel: Streuung an einer undurchdringlichen Kugel	36
3.2.10	Beispiel: Resonanzstreuung am sphärischen Potentialtopf	36
4	Relativistische QM	41
4.1	Spezielle Relativitätstheorie	41
4.1.1	“Herleitung” von Lorentz-Transformationen	41
4.1.2	Energie und Impuls relativistischer Teilchen	43
4.2	Klein-Gordon-Gleichung	44
4.3	Dirac-Gleichung	46
4.3.1	Lösungen mit negativer Energie	50
4.3.2	Spin	51

4.3.3	Lorentz-Kovarianz der DG, Transformationsverhalten von Spinoren	53
4.3.4	Bilineare Kovarianten	54
4.3.5	Relativistisches Fermion im elektromagnetischen Feld	54
4.3.6	Nicht-relativistischer Grenzfall eines Fermions im elektromagnetischen Feld, Pauli-Gleichung, gyromagnetischer Faktor des Elektrons	55
5	Ausgewählte Grundlagen und Anwendungen der Gruppentheorie und von Symmetrien in der Quantenmechanik	57
5.1	Gruppen	57
5.2	Lie-Gruppen	57
5.2.1	Beispiel: Gruppe der Rotationen in 3 Dimensionen	58
5.2.2	Beispiel: Gruppe der “komplexen Rotationen” in 2 Dimensionen	59
5.2.3	Gruppe versus Algebra	60
5.3	Lorentz- und Poincare-Gruppe	61
5.3.1	Lorentz-Gruppe	62
5.3.2	Poincare-Gruppe	63
5.4	Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen ausgehend von Sym- metrieüberlegungen	64
5.4.1	Wellenfunktionen und Felder	64
5.4.2	Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen	67
5.5	Zusammenfassung	72
6	Vielteilchensysteme	74
6.1	Grundlagen zur Behandlung ununterscheidbarer Teilchen	74
6.1.1	Eigenschaften von Zuständen und Operatoren bei Teilchenvertauschung	74
6.1.2	Nicht-wechselwirkende Teilchen	75
6.1.3	Bosonischer und fermionischer Grundzustand beim Potentialtopf	76
6.1.4	Helium	77
6.2	Hartree-Verfahren	78
6.3	Ausblick: QM Behandlung von Systemen mit veränderlicher Teilchenzahl	80
6.3.1	Fock-Raum	80
6.3.2	Teilchenerzeugung und -vernichtung	81

1 Wiederholung grundlegender Konzepte der Quantenmechanik (QM)

- Dieses Kapitel dient als Erinnerung an “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik”.
- Keine lückenlose oder vollständige Darstellung.
- Wiederholt werden Grundlagen, die notwendige (aber nicht hinreichende) Voraussetzungen zum Verständnis der in dieser Vorlesung diskutierten fortgeschrittenen Konzepte der QM sind.
- *‘It will be difficult. But the difficulty really is psychological and exists in the perpetual torment that results from your saying to yourself, ‘But how can it be like that?’ which is a reflection of uncontrolled but utterly vain desire to see it in terms of something familiar. I will not describe it in terms of an analogy with something familiar; I will simply describe it. There was a time when the newspapers said that only twelve men understood the theory of relativity. I do not believe there ever was such a time. There might have been a time when only one man did, because he was the only guy who caught on, before he wrote his paper. But after people read the paper a lot of people understood the theory of relativity in some way or other, certainly more than twelve. On the other hand, I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics. So do not take the lecture too seriously, feeling that you really have to understand in terms of some model what I am going to describe, but just relax and enjoy it. I am going to tell you what nature behaves like. If you will simply admit that maybe she does behave like this, you will find her a delightful, entrancing thing. Do not keep saying to yourself, if you can possibly avoid it, ‘But how can it be like that?’ because you will get ‘down the drain’, into a blind alley from which nobody has yet escaped. Nobody knows how it can be like that.’*
(Richard Feynman, “The character of physical law”, Vorlesungen 1964, erschienen als Buch 1965).

1.1 Übergang von klassischer Mechanik zur QM

- Ausgangspunkt: Lagrange-Funktion eines mechanischen Systems ausgedrückt durch generalisierte Koordinaten q^j ,

$$L(\dot{q}^j, q^j) = T - V \quad (1)$$

(z.B. $q^j = (x)$ oder $q^j = (r, \vartheta, \varphi)$ oder $q^j = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$).

- Kanonisch konjugierte Impulse:

$$p_j = \frac{\partial L(\dot{q}^j, q^j)}{\partial \dot{q}^j} \quad (2)$$

(damit können generalisierte Geschwindigkeiten \dot{q}^j durch p_j und q^j ausgedrückt werden).

- Hamilton-Funktion (entspricht der Gesamtenergie):

$$H(p_j, q^j) = \sum_k p_k \dot{q}^k(p_j, q^j) - L(\dot{q}^j(p_j, q^j), q^j) \quad (3)$$

(der Übergang von L zu H wird als Legendre-Transformation bezeichnet).

- **Wesentliche Schritte des Übergangs von klassischer Physik zur Quantenphysik:**

- (1) Ersetze generalisierte Koordinaten und kanonisch konjugierte Impulse durch entsprechende **hermitesche Operatoren**,

$$q^j \rightarrow \hat{q}^j, \quad p_j \rightarrow \hat{p}_j; \quad (4)$$

für Observablen, die Funktionen von p_j und q^j sind, folgt z.B.

$$H(p_j, q^j) \rightarrow \hat{H} = H(\hat{p}_j, \hat{q}^j) \quad (\text{Gesamtenergie}) \quad (5)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (\text{Drehimpuls eines Teilchens}). \quad (6)$$

- (2) Fordere **kanonische Vertauschungsrelationen**,

$$[\hat{q}^j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = [\hat{q}^j, \hat{q}^k] = 0 \quad (7)$$

(erinnern stark an die Poisson-Klammern der Hamiltonschen Mechanik).

- Operatoren wirken nach rechts (bzw. links) auf Zustände, die durch “ket”s $|X\rangle$ (bzw. “bra”s $\langle X|$) notiert werden. X ist dabei ein Label (nicht eine Formel oder ein mathematischer Ausdruck), der den Zustand beschreibt, z.B.

$$\hat{x}|n\rangle, \quad \langle \mathbf{p} = 0, \uparrow | \hat{H}, \quad \langle \text{Grundzustand} | \hat{\mathbf{L}} | \text{Teilchen am Ort } x_0 \rangle. \quad (8)$$

1.2 Rechnungen mit Hilfe von Darstellungen

- Um Rechnungen im Rahmen der QM ausführen zu können, benötigt man häufig **Darstellungen von Operatoren und Zuständen**.
 - **Operatoren:** Mathematische Objekte, die die Vertauschungsrelationen erfüllen; i.d.R. Ausdrücke, die Variablen und Ableitungen nach diesen Variablen enthalten, oder Matrizen.
 - **Zustände:** Mathematische Objekte, auf die die Darstellungen der Operatoren in sinnvoller Weise wirken.
- Beispiel: Qm Teilchen in 1 Raumdimension im Potential $V(x)$.

- Lagrange-Funktion:

$$L(\dot{x}, x) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x). \quad (9)$$

- Kanonisch konjugierter Impuls:

$$p = \frac{\partial L(\dot{x}, x)}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \rightarrow \dot{x}(p, x) = \frac{p}{m}. \quad (10)$$

– Hamilton-Funktion:

$$H(p, x) = p\dot{x}(p, x) - L(\dot{x}(p, x), x) = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (11)$$

– Eine mögliche Darstellung von Orts- und Impulsoperator, die die kanonische Vertauschungsrelation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ erfüllt, ist

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{x} \equiv x. \quad (12)$$

Dies kann durch eine einfache Rechnung verifiziert werden,

$$[\hat{x}, \hat{p}] \equiv [x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}] = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) = i\hbar. \quad (13)$$

– Diese Darstellung der Operatoren durch x und $-i\hbar\partial/\partial x$ wirkt auf Funktionen von x , also werden Zustände durch Wellenfunktionen $\psi(x)$ dargestellt.

– Z.B. ergibt sich für die Eigenwertgleichung des Hamilton-Operators

$$\left(\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \right) \equiv \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \right), \quad (14)$$

die **stationäre Schrödinger-Gleichung** (SG). Die stationäre SG ist also keine fundamentale Gleichung, sondern kann “hergeleitet” werden.

– Darstellungen sind nicht eindeutig. Z.B. kann statt (12) auch

$$\hat{p} \equiv p, \quad \hat{x} \equiv +i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (15)$$

verwendet werden (“Rechnen im Impulsraum”).

***** 13. April 2023 (2. Vorlesung) *****

1.3 Eigenwerte von Operatoren, Messung von Observablen

- Die Eigenwerte λ_n eines Operators \hat{O} sind definiert durch die Eigenwertgleichung

$$\hat{O}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle. \quad (16)$$

- Misst man die zum Operator \hat{O} gehörige Observable eines qm Systems im Zustand $|\psi\rangle$, erhält man als Messergebnis einen der Eigenwerte λ_n , wobei die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten

$$p_n = |\langle n|\psi\rangle|^2 \quad (17)$$

betragen. Das System befindet sich danach im Zustand $|n\rangle$, die Messung zerstört also den Zustand $|\psi\rangle$.

(Dies gilt für den Fall nicht-entarteter Eigenwerte, ist aber geradlinig auf entartete Eigenwerte erweiterbar.)

- Durch “Einfügen einer 1” ergibt sich

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | n \rangle \lambda_n \langle n | \psi \rangle = \sum_n p_n \lambda_n, \quad (18)$$

wobei $\sum p_n \lambda_n$ der Erwartungswert oder Mittelwert einer Messung von O ist (Mittelung über Messergebnisse bei Messung an unendlich vielen identischen, d.h. im Zustand $|\psi\rangle$ präparierten Systemen). Die Rechnung zeigt, dass $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$ diesem Erwartungswert entspricht, d.h. in der qm bra-ket-Schreibweise Erwartungswerte in dieser Weise notiert werden können.

1.4 Zeitentwicklung

- Die Dynamik eines qm Systems wird durch die SG

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (19)$$

d.h. durch den Hamilton-Operator \hat{H} bestimmt.

- Für einen zeitunabhängigen Hamilton-Operator \hat{H} folgt

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle. \quad (20)$$

- Explizites Ausrechnen von $|\psi(t)\rangle$ (d.h. Ausdrücken durch einfache mathematische Funktionen und Operationen) durch “Einfügen einer Energie-1”:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} | \psi(t_0) \rangle = \sum_n \underbrace{e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}}_{\text{zeitabhängige Phase}} \underbrace{\langle n | \psi(t_0) \rangle}_{\text{Konstante}} |n\rangle. \quad (21)$$

2 Time-dependent perturbation theory

- In this and in following sections: no $\hat{}$ on top of operators; quite often $\hbar = 1$.

2.1 Basics

- Starting point:
 - Hamiltonian: $H_0 + \lambda H_1(t)$.
 - Schrödinger equation $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ solved or solvable, i.e. eigenstates $|n\rangle$ of H_0 and corresponding eigenvalues are known or can be calculated.
 - $\lambda H_1(t)$ is a weak perturbation of the system. (The perturbative expansions will be a power series in λ .)
- Problem:
 - Starting point: system at time $t = 0$ in state $|i\rangle$ ($|i\rangle$ is one of the eigenstates of H_0).
 - Calculate the probability to find the system at $t > 0$ in state $|f\rangle$ ($|f\rangle$ is one of the eigenstates of H_0). This probability is called **transition probability** and denoted by $P_{i \rightarrow f}(t)$.
- Time evolution via the Schrödinger equation,

$$i\partial_t|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle, \quad (22)$$

with initial condition $|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle$ (notation: $\partial_t \equiv \partial/\partial t$).

- Then

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \langle f | \psi(t) \rangle \right|^2. \quad (23)$$

- To solve (22), i.e. to calculate $|\psi(t)\rangle$ (as power series in λ), expand $|\psi(t)\rangle$ in terms of eigenstates of H_0 ,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t} |n\rangle. \quad (24)$$

- It is convenient to split the coefficient in front of $|n\rangle$ into an unknown t -dependent coefficient $c_n(t)$ and a phase $e^{-iE_n t}$.
- Reason: $c_n(t) = \delta_{in}$ for $\lambda = 0$.

***** 18. April 2023 (3. Vorlesung) *****

- Left hand side of (22):

$$i\partial_t|\psi(t)\rangle = i\partial_t \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t} |n\rangle = \sum_n \left(i\partial_t c_n(t) + E_n c_n(t) \right) e^{-iE_n t} |n\rangle. \quad (25)$$

- Right hand side of (22):

$$H|\psi(t)\rangle = H \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t} |n\rangle = \sum_n \left(E_n c_n(t) + \lambda c_n(t) H_1(t) \right) e^{-iE_n t} |n\rangle. \quad (26)$$

- Thus,

$$i \sum_n \left(\partial_t c_n(t) \right) e^{-iE_n t} |n\rangle = \sum_n \lambda c_n(t) e^{-iE_n t} H_1(t) |n\rangle \quad (27)$$

and, after multiplying with $\langle m|$,

$$i \partial_t c_m(t) = \lambda \sum_n c_n(t) e^{+i(E_m - E_n)t} \langle m|H_1(t)|n\rangle. \quad (28)$$

- To solve this system of coupled differential equations, write $c_n(t)$ as power series in λ , i.e.

$$c_n(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j c_n^{(j)}(t). \quad (29)$$

- Solution of (28), order λ^0 :

$$i \partial_t c_m^{(0)}(t) = 0, \quad (30)$$

i.e. $c_m^{(0)}(t) = \text{const.}$ The initial condition $|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle$ and (24) lead to

$$c_m^{(0)}(t) = \delta_{im}. \quad (31)$$

- Solution of (28), order λ^1 (“**first order time-dependent perturbation theory**”):

$$i \partial_t c_m^{(1)}(t) = \sum_n c_n^{(0)}(t) e^{+i(E_m - E_n)t} \langle m|H_1(t)|n\rangle = e^{+i(E_m - E_i)t} \langle m|H_1(t)|i\rangle. \quad (32)$$

The initial condition $|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle$ and (24) lead to

$$c_m^{(1)}(t) = -i \int_0^t dt' e^{+i(E_m - E_i)t'} \langle m|H_1(t')|i\rangle. \quad (33)$$

- Transition probability:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \langle f|\psi(t)\rangle \right|^2 = \left| c_f(t) \right|^2 = \left| c_f^{(0)}(t) + \lambda c_f^{(1)}(t) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right|^2. \quad (34)$$

- Transition probability for $i \neq f$:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \lambda c_f^{(1)}(t) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right|^2 = \lambda^2 \left| \int_0^t dt' e^{+i(E_f - E_i)t'} \langle f|H_1(t')|i\rangle \right|^2 + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (35)$$

(in the following $P_{i \rightarrow f}(t)$ exclusively for $i \neq f$).

- Homework: derive/extend equations for second order time-dependent perturbation theory.

2.2 Example: harmonic oscillator and electric field

- Harmonic oscillator:

$$H_0 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2. \quad (36)$$

- Easy to solve and to perform calculations, when using creation and annihilation operators (see lecture “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik”):

$$a = \left(\frac{m\omega}{2}\right)^{1/2} \left(x + \frac{i}{m\omega}p\right), \quad a^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2}\right)^{1/2} \left(x - \frac{i}{m\omega}p\right). \quad (37)$$

- x and p in terms of a and a^\dagger :

$$x = \left(\frac{1}{2m\omega}\right)^{1/2} (a^\dagger + a), \quad p = i\left(\frac{m\omega}{2}\right)^{1/2} (a^\dagger - a). \quad (38)$$

- Effect of creation and annihilation operators on energy eigenstates of H_0 :

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (39)$$

where

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (40)$$

- t -dependent, spatially constant electric field $E(t)$ (i.e. the particle in the harmonic potential is electrically charged and the electric field is treated as perturbation):

$$H_1 = eE(t)x. \quad (41)$$

- At $t = 0$ system is in state $|i\rangle$.
- Matrix element in $P_{i \rightarrow f}(t)$ (eq. (35)):

$$\begin{aligned} \langle f|H_1(t)|i\rangle &= \langle f|eE(t)x|i\rangle = \frac{eE(t)}{\sqrt{2m\omega}} \langle f|(a^\dagger + a)|i\rangle = \\ &= \frac{eE(t)}{\sqrt{2m\omega}} \left(\delta_{f,i+1}\sqrt{i+1} + \delta_{f,i-1}\sqrt{i} \right), \end{aligned} \quad (42)$$

i.e. in first order time-dependent perturbation theory there are only two possible transitions, $|i\rangle \rightarrow |i+1\rangle$ and $|i\rangle \rightarrow |i-1\rangle$.

- Transition probabilities:

$$P_{i \rightarrow i+1}(t) = \frac{e^2(i+1)}{2m\omega} \left| \int_0^t dt' e^{+i\omega t'} E(t') \right|^2 + \mathcal{O}(e^3) \quad (43)$$

$$P_{i \rightarrow i-1}(t) = \frac{e^2 i}{2m\omega} \left| \int_0^t dt' e^{-i\omega t'} E(t') \right|^2 + \mathcal{O}(e^3). \quad (44)$$

- Validity of these results:
 - Neglected $\mathcal{O}(e^3)$ terms must be small.
 - Quite often not easy to check.
 - (43) and (44) might be good approximations, if e.g. e , t and/or $E(t)$ are small.

***** 20. April 2023 (4. Vorlesung) *****

2.3 Fermi's golden rule

- *"In quantum physics, Fermi's golden rule is a formula that describes the transition rate (probability of transition per unit time) from one energy eigenstate of a quantum system to a group of energy eigenstates in a continuum, as a result of a weak perturbation."* (Wikipedia)
- Consider a system, where
 - (a) the spectrum of a subset of the eigenstates of H_0 , $F = \{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle, \dots\}$, with eigenvalues $E_{f_j} \approx E_i$ is very dense, i.e. where $\Delta E_{f_j} = E_{f_{j+1}} - E_{f_j}$ is very small (eigenvalues are sorted $E_{f_1} \leq E_{f_2} \leq E_{f_3} \leq \dots$), or where the spectrum is even continuous,
 - (b) F does not contain the initial state $|i\rangle$ and $|\langle f_j | H_1(t) | i \rangle|$ (appearing e.g. in (35)) is time-independent.
 - (c) $|\langle f_j | H_1(t) | i \rangle|$ (appearing e.g. in (35)) is independent of j (i.e. the same for all states in F).
- Transition probability to the subset of states F :

$$P_{i \rightarrow F}(t) = \sum_{f_j} P_{i \rightarrow f_j}(t) = \dots \quad (45)$$

- Because of (a), the sum over the subset of eigenstates F can be approximated/written as an integral,

$$\sum_{f_j} = \sum_{f_j} \Delta E_{f_j} \frac{1}{\Delta E_{f_j}} \approx \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE_f \rho(E_f) \quad (46)$$

with the density of states $\rho(E_f) \approx 1/\Delta E_{f_j}$ with respect to the eigenvalues of H_0 and the minimal energy E_{\min} and the maximal energy E_{\max} of the states in F .

- Because of (b), one can use (35), which simplifies to

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f_j}(t) &= \lambda^2 \left| \langle f_j | H_1 | i \rangle \right|^2 \left| \int_0^t dt' e^{+i(E_{f_j} - E_i)t'} \right|^2 + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\ &= \lambda^2 \left| \langle f_j | H_1 | i \rangle \right|^2 \left| \frac{1}{i(E_{f_j} - E_i)} \left(e^{+i(E_{f_j} - E_i)t} - 1 \right) \right|^2 + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\ &= 4\lambda^2 \left| \langle f_j | H_1 | i \rangle \right|^2 \frac{\sin^2((E_{f_j} - E_i)t/2)}{(E_{f_j} - E_i)^2} + \mathcal{O}(\lambda^3). \end{aligned} \quad (47)$$

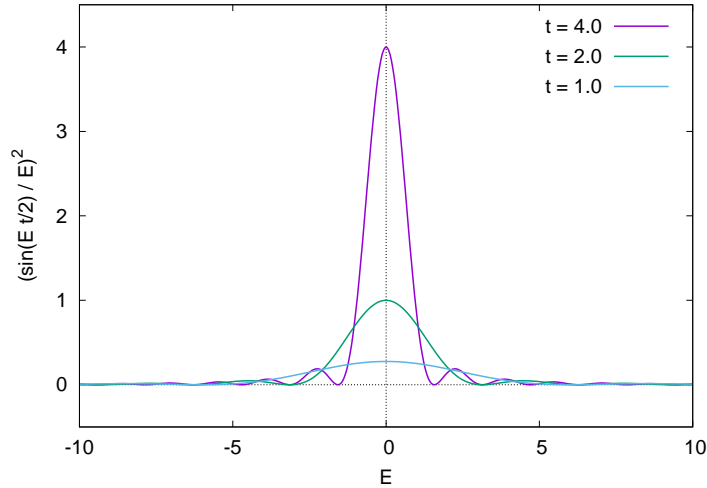
- Continuation of (45) and using (c):

$$\dots = 4\lambda^2 \left| \langle f | H_1 | i \rangle \right|^2 \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE_f \rho(E_f) \frac{\sin^2((E_f - E_i)t/2)}{(E_f - E_i)^2} + \mathcal{O}(\lambda^3) = \dots \quad (48)$$

- For large t the function $(\sin(Et/2)/E)^2$ appearing as part of the integrand in (48) has the same effect as a δ function. Thus,

$$\begin{aligned} \lim_{\text{large } t} P_{i \rightarrow F}(t) &= 4\lambda^2 \left| \langle f | H_1 | i \rangle \right|^2 \rho(E_i) \int dE_f \frac{\sin^2((E_f - E_i)t/2)}{(E_f - E_i)^2} + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\ &= 2\lambda^2 \left| \langle f | H_1 | i \rangle \right|^2 \rho(E_i) t \underbrace{\int dx \frac{\sin^2(x)}{x^2}}_{=\pi} + \mathcal{O}(\lambda^3) = \\ &= \underbrace{2\pi\lambda^2 \left| \langle f | H_1 | i \rangle \right|^2 \rho(E_i)}_{=\Gamma} t + \mathcal{O}(\lambda^3), \end{aligned} \quad (49)$$

i.e. there are only transitions to states $|f_j\rangle$ with $E_{f_j} = E_i$. Γ is the **transition rate** (= transition probability per unit time).



- **Fermi's golden rule:**

$$\Gamma = 2\pi\lambda^2 \left| \langle f | H_1 | i \rangle \right|^2 \rho(E_i) \quad (50)$$

(a widely used expression in many areas of physics).

- Sketch of an important example from particle physics:
 - Decay of a hadron via the weak interaction, e.g. $\pi \rightarrow l + \nu$ (pion decays into a lepton and the corresponding neutrino).

- π , l and ν are eigenstates of H_0 (the QCD Hamiltonian = the Standard Model Hamiltonian without the electromagnetic and the weak interaction, i.e. leptons and neutrinos do not interact).
- H_1 describes the weak interaction, in particular the process $u + \bar{d} \rightarrow l + \nu$.
- $|i\rangle = |\pi(\mathbf{p} = 0)\rangle$, i.e. a pion at rest.
- $|f_j\rangle$: all $|l + \nu\rangle$ states (only those with energies around the mass of the pion are relevant).
- $\langle f|H_1|i\rangle$ can be calculated using quantum field theory (lattice QCD is needed for the hadronic part [the result is the commonly computed “pion decay constant”]; the leptonic part can be calculated analytically).
- The sum over all final states is the sum over all lepton and all neutrino momenta and the spin orientations,

$$\sum_{f_j} = \int d^3 p_e \rho_{p_e}(\mathbf{p}_e) \int d^3 p_\nu \rho_{p_\nu}(\mathbf{p}_\nu) \sum_{\text{spins}} = \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right)^2 \int d^3 p_e \int d^3 p_\nu \sum_{\text{spins}}, \quad (51)$$

where $\rho_{p_x}(\mathbf{p}_x) = V/(2\pi)^3$, the density of states with respect to the momentum, can be calculated with techniques from “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik” (free particle, periodic boundary conditions). From (46) and (51) one can determine the density of states $\rho(E)$.

- Literatureempfehlung, wie solche Prozesse im Detail berechnet werden können (als Ergänzung; geht über den Inhalt dieser Vorlesung hinaus): Peter Schmüser, “*Feynman-Graphen und Eichtheorien für Experimentalphysiker*,” Springer.

3 Streutheorie

- Streuexperimente von zentraler Bedeutung
 - in der Teilchenphysik (z.B. zum Erzeugen neuer Teilchen oder um Rückschlüsse auf die zwischen Teilchen wirkenden Kräfte zu ziehen),
 - in der Festkörperphysik (z.B. zum Untersuchen von Aufbau von Materie und von Kristallstrukturen).
- Darstellung der Streutheorie orientiert sich an F. Schwabl, “*Quantenmechanik (QM I)*,” Springer.

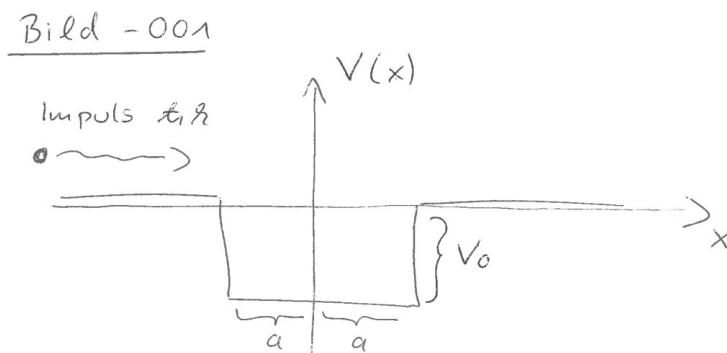
3.1 Streuung in 1 Raumdimension

- Mathematik in 1 Raumdimension ist einfacher als in 3 Raumdimensionen. Der Abschnitt dient vorwiegend dem konzeptionellen Verständnis der Streutheorie.
- Betrachte ein nach rechts laufendes Teilchen bzw. einen aus solchen Teilchen zusammengesetzten Teilchenstrahl, der mit einem Potential wechselwirkt, d.h. daran gestreut wird.
 - Wähle einen endlichen Potentialtopf (dann “besonders einfache Mathematik”),

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } -a \leq x \leq +a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (52)$$

($V_0 > 0$).

- Der Teilchenstrahl mit Teilchen der Energie $E > 0$ wird beschrieben durch die Wellenfunktion $A_1 e^{+ikx}$ mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ (A_1 legt dabei die Teilchendichte fest und ist im Folgenden von geringer Bedeutung).



- Berechne das stationäre Problem, d.h. von links laufen kontinuierlich Teilchen ein, diese werden am Potential entweder reflektiert und laufen nach links zurück oder sie durchdringen das Potential und laufen nach rechts weiter.
 - Löse dazu die stationäre SG,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (53)$$

mit entsprechenden Randbedingungen (RBs),

* $\psi(x) = A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx}$ für $x \rightarrow -\infty$ (damit auch für $x < -a$),

* $\psi(x) = A_3 e^{+ikx}$ für $x \rightarrow +\infty$ (damit auch für $x > +a$)

(RBs sind ebenso wichtig wie die SG).

– Die Lösung ist geradlinig (ist Hausaufgabe), man findet

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{für } x < -a \\ A_2 e^{+iqx} + B_2 e^{-iqx} & \text{für } -a \leq x \leq +a \\ A_3 e^{+ikx} & \text{für } +a < x \end{cases} \quad (54)$$

mit $q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$, “Input-Parameter” A_1 ,

$$A_3 = A_1 S(E) \quad (55)$$

$$B_1 = A_1 S(E) \underbrace{\frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \sin(2qa)}_{=\bar{S}(E)} \quad (56)$$

$$S(E) = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2qa) - (i/2)((q/k) + (k/q)) \sin(2qa)} \quad (57)$$

und berechenbarem aber hier nicht interessantem A_2 und B_2 .

***** 25. April 2023 (5. Vorlesung) *****

- Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} - \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \psi(x, t) \right) \quad (58)$$

(bekannt aus der Vorlesung “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik”); damit entspricht

– von links einlaufenden Teilchen

$$j_{\text{in}} = +\hbar k |A_1|^2 / m, \quad (59)$$

– Teilchen, die das Potential durchdrungen haben und nach rechts weiterlaufen,

$$j_{\text{transmission}} = +\hbar k |A_1|^2 |S(E)|^2 / m, \quad (60)$$

– Teilchen, die am Potential reflektiert worden sind und nach links zurücklaufen,

$$j_{\text{reflection}} = -\hbar k |A_1|^2 |\bar{S}(E)|^2 / m. \quad (61)$$

- $|S(E)|^2$ beschreibt den Prozentsatz transmittierter Teilchen und heißt **Transmissionskoeffizient**; eine geradlinige Rechnung ergibt

$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + (1/4)((q/k) - (k/q))^2 \sin^2(2qa)} = \left(1 + \frac{\sin^2(2qa)}{4(E/V_0)(1 + (E/V_0))} \right)^{-1}. \quad (62)$$

- $|\bar{S}(E)|^2$ beschreibt den Prozentsatz reflektierter Teilchen und heißt **Reflektionskoeffizient**; eine geradlinige Rechnung ergibt

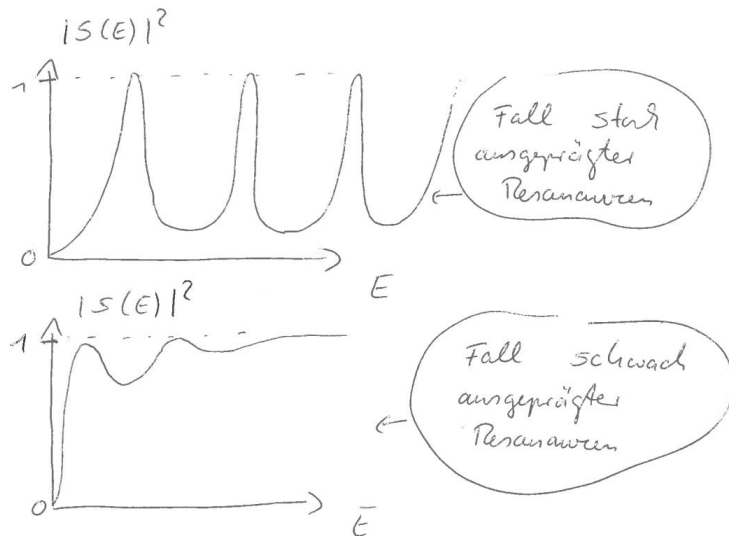
$$|S(E)|^2 = 1 - |\bar{S}(E)|^2 \quad (63)$$

(wie zu erwarten war).

- Eigenschaften von $S(E)$:

- Die Maxima von $|S(E)|^2$ liegen bei $2qa = n\pi$ (aus $E > 0$ folgt $q > \sqrt{2mV_0}/\hbar$ und daraus $2(\sqrt{2mV_0}/\hbar)a/\pi < n$).
- Die Minima liegen dazwischen, näherungsweise bei $2qa = (n + 1/2)\pi$.
- Sowohl Maxima und Minima sind stark ausgeprägt, falls die folgenden Bedingungen erfüllt sind:
 - * $E \ll V_0$, d.h. bei kleiner Energie der einlaufenden Teilchen und tiefem Topf.
 - * Einige der Energien, die den durch $2qa = n\pi$ definierten Maxima zugeordnet sind, liegen deutlich unterhalb von V_0 , d.h. für diese Maxima ist die erste Bedingung erfüllt.

Bild - 002



- Die Maxima von $|S(E)|^2$ nennt man **Resonanzen** (Begründung folgt unten).
- $S(E)$ kann in der Umgebung einer Resonanz mit **Resonanzenergie** E_R in $E - E_R$ entwickelt werden,

$$S(E) \approx (-1)^n e^{-2ika} \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2} \quad (64)$$

bzw.

$$|S(E)|^2 \approx \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (65)$$

(Lorentz-Kurve mit Halbwertsbreite Γ , wird in diesem Kontext als **Resonanzbreite** bezeichnet) mit

$$\Gamma/2 = \frac{2\hbar\sqrt{E_R}(E_R + V_0)}{\sqrt{2ma}(2E_R + V_0)} \quad (66)$$

bzw. bei kleiner Energie der einlaufenden Teilchen und tiefem Topf

$$\Gamma/2 \approx \frac{2\hbar\sqrt{E_R}}{\sqrt{2ma}} = \hbar v_R/a \quad (67)$$

($v_R = \sqrt{2E_R/m}$, die Geschwindigkeit der von der einlaufenden Welle beschriebenen Teilchen bei Resonanzenergie E_R).

- Die komplexe Funktion $S(E)$ kann man auch durch Betrag und Phasenfaktor ausdrücken,

$$S(E) = |S(E)|e^{-2ika+i\delta(E)}. \quad (68)$$

* Die Rechnung

$$\begin{aligned} \psi_{\text{transmission}}(+a) &= A_3 e^{+ika} = A_1 S(E) e^{+ika} = A_1 |S(E)| e^{-ika+i\delta(E)} = \\ &= |S(E)| e^{+i\delta(E)} \psi_{\text{in}}(-a) \end{aligned} \quad (69)$$

zeigt, dass $\delta(E)$ die Phasenverschiebung beschreibt, die die bei $x = -a$ von links ins Potential einlaufende Welle $\psi_{\text{in}} = A_1 e^{+ika}$ erfährt, bis sie bei $x = +a$ in Form von $\psi_{\text{transmission}} = A_3 e^{+ika}$ das Potential verlässt und nach rechts weiterläuft.

* Es gilt

$$\tan(\delta(E)) = \frac{\text{Im}(S(E)e^{+2ika})}{\text{Re}(S(E)e^{+2ika})} = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa) \quad (70)$$

((57) wurde verwendet) bzw. in Resonanznähe

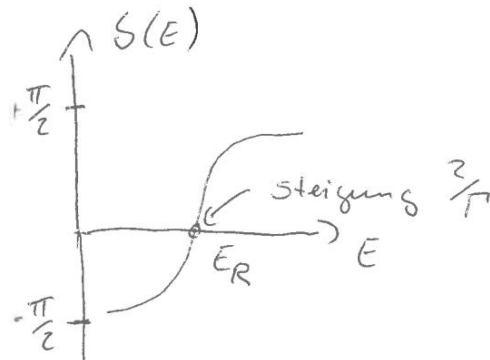
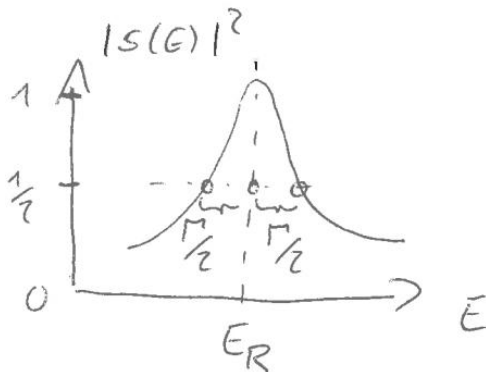
$$\delta(E) \approx \arctan\left(\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)\right) \quad (71)$$

((64) wurde verwendet).

- Warum spricht man von Resonanzen?

- (65) und (71) erinnern an bekannte Resonanzphänomene.

Bild - 003



- Z.B. angeregter gedämpfter harmonischer Oszillator (siehe "Theoretische Physik 1 – Mathematische Methoden"):

* Newtonsche BGl:

$$\ddot{x}(t) + 2\alpha\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = f_0 \cos(\Omega t). \quad (72)$$

* Partikulärlösung (bzw. Lösung für große Zeiten):

$$x(t) = |C(\Omega)| \cos(\Omega t + \arg(C(\Omega))) \quad (73)$$

mit

$$|C(\Omega)| = \frac{|f_0|}{\sqrt{(-\Omega^2 + \omega_0^2)^2 + 4\alpha^2\Omega^2}}, \quad \arg(C(\Omega)) = \operatorname{arccot}\left(\frac{-\Omega^2 + \omega_0^2}{-2\alpha\Omega}\right). \quad (74)$$

- Damit entspricht $E \leftrightarrow \Omega$, $|S(E)| \leftrightarrow |C(\Omega)|$, $\delta(E) \leftrightarrow \arg(C(\Omega))$.

***** 27. April 2023 (6. Vorlesung) *****

- Bewegung eines Teilchens mit nahezu Resonanzenergie:

- Betrachte ein von links einlaufendes Teilchen, beschrieben durch das Wellenpaket

$$\psi_{\text{in}}(x, t) = \int_0^\infty dk g(k) e^{+ikx - iEt/\hbar} \quad (75)$$

(gültig für $x < -a$), wobei g eine reelle, geeignet normierte, nicht-oszillierende, lokalisierte Funktion ist mit Maximum bei k_R , definiert durch $E(k_R) = (\hbar k_R)^2/2m = E_R$ (z.B. eine Gauß-Funktion).

- $|\psi_{\text{in}}(x, t)|$ (und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens) ist groß, wenn sich die Beiträge der k -Integration addieren, nicht aber "weginterferieren". Dies ist der Fall, wenn sich der Exponent des Phasenfaktors im Bereich des Maximums von g bei Veränderung von k nur schwach oder gar nicht verändert, d.h. wenn x und t näherungsweise in der Beziehung

$$\left. \frac{d}{dk} \left(+ikx - iEt/\hbar \right) \right|_{k=k_R} = +ix - i\hbar k_R t/m = 0 \quad (76)$$

stehen ("Stationarität der Phase"). Damit erhält man die "Trajektorie" des einlaufenden Teilchens,

$$x = \frac{\hbar k_R}{m} t, \quad (77)$$

wie erwartet eine Bewegung mit konstantem Impuls $\hbar k_R$ bzw. mit konstanter Geschwindigkeit $\hbar k_R/m$.

- Die Wellenfunktion des nach rechts weiterlaufenden Teilchens ergibt sich aus (54), (55), (68) und (75),

$$\psi_{\text{transmission}}(x, t) = \int_0^\infty dk g(k) |S(E)| e^{+ik(x-2a) + i\delta(E) - iEt/\hbar} \quad (78)$$

(gültig für $x > +a$).

- Über die Stationarität der Phase erhält man die Trajektorie des auslaufenden Teilchens,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dk} \left(+ik(x-2a) + i\delta(E) - iEt/\hbar \right) \Big|_{k=k_R} &= \\ &= +i(x-2a) + i \frac{d}{dk} \delta(E) \Big|_{k=k_R} - i\hbar k_R t/m = 0 \end{aligned} \quad (79)$$

$$\text{Nebenrechnung: } \frac{d}{dk} \delta(E) = \frac{d\delta(E)}{dE} \frac{dE}{dk} \approx \frac{2/\Gamma}{1 + ((2/\Gamma)(E - E_R))^2} \frac{\hbar^2 k}{m} \quad (80)$$

$$\rightarrow x \approx 2a - \frac{2}{\Gamma} \frac{\hbar^2 k_R}{m} + \frac{\hbar k_R}{m} t = 2a + \frac{\hbar k_R}{m} \left(t - \frac{2\hbar}{\Gamma} \right) \quad (81)$$

(in (80) wurde (71) verwendet).

- Interpretation:

- * Das Teilchen benötigt die Zeit $2\hbar/\Gamma$ um das Potential der Breite $2a$ zu durchlaufen.
- * $2\hbar/\Gamma$ wird daher als **Lebensdauer der Resonanz** bezeichnet.
- * Z.B. für $E \ll V_0$, $2\hbar/\Gamma = a/v_R = a/(k_R/m)$ (siehe (67)).
- * Klassisch würde man eine viel kürzere Zeit erwarten, $2a/(q_R/m)$, da $q_R \gg k_R$.
- * Das Teilchen läuft im Potential scheinbar $(q_R/2k_R)/2 = \sqrt{(E_R + V_0)/E_R}/4 = \sqrt{1 + V_0/E_R}/4$ Mal hin und her.

- Resonanzphänomene treten häufig auf, z.B. in der Kern- und Elementarteilchenphysik:

- * Zwei Teilchen kommen sich durch Beschuss nahe, bilden für gewisse Zeit einen gebundenen Zustand, trennen sich dann wieder.
- * Z.B. $\pi + \pi \rightarrow \rho \rightarrow \pi + \pi$: $m_\rho \approx 775 \text{ MeV}/c^2$, $\Gamma_\rho \approx 150 \text{ MeV}$.
- * Eine Vielzahl weiterer Beispiele findet sich unter <http://pdglive.lbl.gov>.

- Resonanzen und Pole von $S(E)$:

- Betrachte $S(E)$ in der Form (64) als Funktion einer komplexen Variable E .
- $S(E)$ hat Pole bei $E = E_R - i\Gamma/2$.
- Resonanzenergien E_R und Resonanzbreiten Γ können also an den Polen von $S(E)$ abgelesen werden.
- Häufig in theoretischer Elementarteilchenphysik: Studiere bzw. suche Pole der S -Matrix (entspricht $S(E)$ in unserem 1-dimensionalen Beispiel), um Resonanzen zu bestimmen.
- Mehr dazu voraussichtlich in den Hausaufgaben.

3.2 Streuung in 3 Raumdimensionen

3.2.1 Streuung eines durch ein Wellenpaket beschriebenen Teilchens

- Ein Teilchen (Projektile) wird an einem Potential (Target) gestreut.

- Potential:

- $V(\mathbf{r})$ um Ursprung lokalisiert, d.h. $V(\mathbf{r}) = 0$ für $|\mathbf{r}| > R$.

- Teilchen:

- t_0 bezeichnet einen Zeitpunkt vor dem Streuprozess.
 - Der Impuls des Teilchens bei $t = t_0$ ist $\hbar\mathbf{k}_0$.
 - Das Teilchen ist bei $t = t_0$ hinreichend weit von Potential entfernt.
 - Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ kann als Wellenpaket geschrieben werden, bei $t = t_0$

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (82)$$

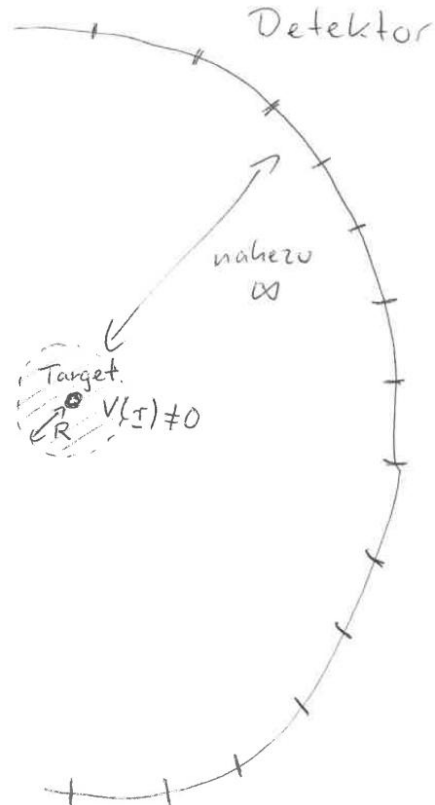
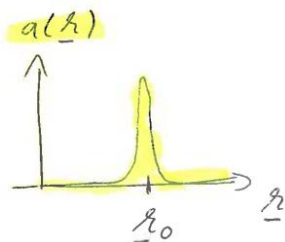
mit folgenden Eigenschaften:

- (1) $a(\mathbf{k})$ ist normiert, d.h. $\int d^3k |a(\mathbf{k})|^2 = 1$,
- (2) $|a(\mathbf{k})|^2$ hat einen klar definierten Peak bei $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, seine Breite klein gegenüber $|\mathbf{k}_0|$, d.h. für alle \mathbf{k} mit $a(\mathbf{k}) \neq 0$ gilt $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0$ und $|\mathbf{k}_0| \gg |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}|$,
- (3) die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ hat vernachlässigbaren Überlapp zu $V(\mathbf{r})$,
- (4) $a(\mathbf{k})$ bzw. die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ sind so gewählt, dass das Teilchen zu einem späterem Zeitpunkt das Potential trifft, d.h. die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ ist in einem Bereich in $-\mathbf{k}_0$ -Richtung vom Ursprung entfernt lokalisiert.

Bild - 004



Wellenfunktion im Ortsraum $\psi(\mathbf{r}, t_0)$



- Gesucht: Zeitentwicklung von $\psi(\mathbf{r}, t_0)$, d.h. $\psi(\mathbf{r}, t)$, da diese die vollständige Information über den Streuprozess enthält.
- Dafür werden Eigenfunktionen der stationären SG benötigt,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(k)\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (83)$$

mit $E(k) = (\hbar k)^2/2m$ und $k = |\mathbf{k}|$.

- An dieser Stelle ist es noch nicht offensichtlich, dass der Wellenzahlvektor \mathbf{k} die Lösungen durchnummeriert.
 - Geradliniger wäre die Notation $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow \phi_n(\mathbf{r})$, $E(k) \rightarrow E_n$.
 - Dass \mathbf{k} eine geeignete Wahl für einen “Label” ist, wird sich weiter unten zeigen.
 - Wir verwenden bereits jetzt \mathbf{k} , um ein späteres Abändern der Notation zu vermeiden.
- Damit gilt

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r}) = \int d^3k A(\mathbf{k})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad A(\mathbf{k}) = \int d^3r \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}) \quad (84)$$

und für die gesuchte Zeitentwicklung

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k e^{-iE(k)(t-t_0)/\hbar} A(\mathbf{k})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (85)$$

(die Koeffizienten $A(\mathbf{k})$ werden im Folgenden bestimmt).

- Ein Umschreiben der stationären SG in eine Integralgleichung ist zweckmäßig:
 - Wellenfunktionen gebundener Zustände, d.h. mit $E < 0$, fallen für $|\mathbf{r}| > R$ exponentiell ab. Sie haben daher vernachlässigbare Überlapps zu $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r})$, da das Wellenpaket hinreichend weit vom Potential entfernt ist (Bedingung (3) zu Beginn dieses Unterkapitels). Wir suchen daher ausschließlich Lösungen mit $E > 0$.

- Umstellen der stationären SG,

$$\left(\Delta + k^2 \right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (86)$$

- Verwende die Greenschen Funktion von $\Delta + k^2$,

$$\left(\Delta + k^2 \right) G_+(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}), \quad (87)$$

damit

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k},\text{homogen}}(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}')\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \quad (88)$$

wobei $\phi_{\mathbf{k},\text{homogen}}(\mathbf{r})$

$$\left(\Delta + k^2 \right) \phi_{\mathbf{k},\text{homogen}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (89)$$

erfüllt, sonst aber beliebig gewählt werden kann.

- Die Lösungen von (89) sind bekannt, ebene Wellen $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ (deshalb wurde weiter oben \mathbf{k} als Label für die Eigenfunktionen $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gewählt). Damit hat man einen vollständigen Satz von Lösungen,

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \quad (90)$$

- Die Greensche Funktion ist

$$G_+(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{+ikr}}{r}. \quad (91)$$

* $r = |\mathbf{r}|$.

* $G_+(\mathbf{r})$ beschreibt eine auslaufende Kugelwelle (kann man zeigen, indem man die Stromdichte berechnet; ist voraussichtlich Hausaufgabe).

* Die Greensche Funktion ist nicht eindeutig, da die Lösung der homogenen Gleichung (89) addiert werden kann.

* Die spezielle Wahl $G_+(\mathbf{r})$ erlaubt im Folgenden eine vergleichsweise einfache Rechnung (siehe (96)).

- Einsetzen in (90):

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \quad (92)$$

- Detektoren stehen weit entfernt vom um $\mathbf{r} = 0$ lokalisierten Potential, daher ist das Verhalten von $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ für $|\mathbf{r}| \gg R \geq |\mathbf{r}'|$ von speziellem Interesse:

- $k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = k\sqrt{\mathbf{r}^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}' + \mathbf{r}'^2} \approx kr - k(\mathbf{r}/r)\mathbf{r}' = kr - \tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)\mathbf{r}'$ mit $\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi) = k(\mathbf{r}/r)$ ($\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)$ ist ein Wellenzahlvektor mit Betrag k und Richtung $\hat{\mathbf{r}}$).

- (92) vereinfacht sich damit zu

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{e^{+ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right) \quad \text{für } |\mathbf{r}| \gg R \quad (93)$$

mit der sogenannten **Streuamplitude**

$$f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) = -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \quad (94)$$

(im Exponent darf $\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)\mathbf{r}'$ nicht vernachlässigt werden, trägt mit endlicher Phase bei; im Nenner kann $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ durch r ersetzt werden, Addition eines endlichen Terms zu einem unendlichen Term verändert Letzteren nicht).

- Die Streuamplitude beschreibt Streuprozesse, ähnlich wie $S(E)$ in Abschnitt 3.1, daher ist sie eine der zentralen Größen der Streutheorie.

- Bestimmung der Koeffizienten $A(\mathbf{k})$ in der Zeitentwicklung (85):

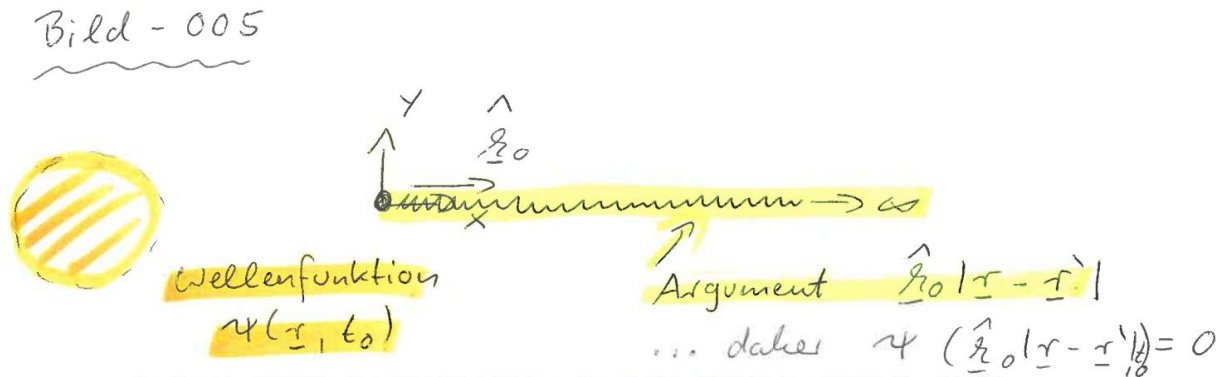
- Ausgangspunkt ist (82) (enthält $a(\mathbf{k})$), Einsetzen von (92) (Ziel ist es, einen Koeffizientenvergleich mit (85) vorzunehmen, enthält $A(\mathbf{k})$),

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t_0) &= \psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \\ &= \int d^3k a(\mathbf{k}) \left(\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \right). \end{aligned} \quad (95)$$

- Aufgrund von $k_0 = |\mathbf{k}_0| \gg |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ (Bedingung (2) zu Beginn des Unterkapitels) gilt $k = \sqrt{(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2} \approx \sqrt{k_0^2 + 2\mathbf{k}_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)} \approx \hat{\mathbf{k}}_0 \mathbf{k}$ (d.h. der Winkel zwischen \mathbf{k}_0 und \mathbf{k} ist vernachlässigbar klein).
- Vertausche die Integrale im 2-ten Term von (95), betrachte die innere Integration,

$$\begin{aligned} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') &\approx \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{+i\hat{\mathbf{k}}_0 \mathbf{k} |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \phi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}') = \\ &= (2\pi)^{3/2} \underbrace{\psi(\hat{\mathbf{k}}_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, t_0)}_{=0} \phi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}') = 0; \end{aligned} \quad (96)$$

(bei \approx wurde außerdem $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0$ verwendet [Bedingung (2) zu Beginn des Unterkapitels]).



- (95) vereinfacht sich damit zu

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r}) \approx \int d^3k a(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (97)$$

Ein Koeffizientenvergleich mit (84) liefert $A(\mathbf{k}) \approx a(\mathbf{k})$ und (85) wird zu

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx \int d^3k e^{-iE(k)(t-t_0)/\hbar} a(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (98)$$

***** 04. Mai 2023 (8. Vorlesung) *****

- $\psi(\mathbf{r}, t)$ für große Abstände vom Potential:

- Für $|\mathbf{r}| \gg R$, z.B. im Bereich des Detektors, kann die Näherung (93) eingesetzt werden,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &\approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{-iE(k)(t-t_0)/\hbar} a(\mathbf{k}) \left(e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{e^{+ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right) = \\ &= \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{-iE(k)(t-t_0)/\hbar + i\mathbf{k}\mathbf{r}}}_{=\psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t)} \\ &\quad + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) \frac{e^{-iE(k)(t-t_0)/\hbar + ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \end{aligned} \quad (99)$$

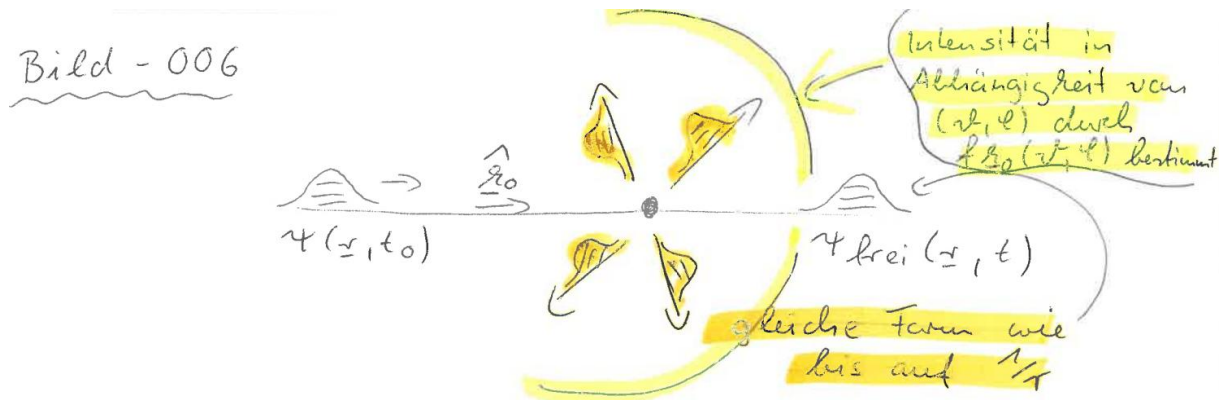
($\psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t)$ ist die Wellenfunktion bei t , die bei t_0 $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r})$ war, wenn $V(\mathbf{r}) = 0$ wäre [d.h. die freie Entwicklung des Wellenpakets, bis auf das übliche ‐Zerlaufen‐ bleibt das Wellenpaket unverändert]).

- Verwende erneut $k \approx \hat{\mathbf{k}}_0 k$ und $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0$:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &\approx \psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) \frac{e^{-iE(k)(t-t_0)/\hbar + i\mathbf{k}\mathbf{k}_0 r}}{r} f_{\mathbf{k}_0}(\vartheta, \varphi) = \\ &= \psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t) + \frac{\psi_{\text{frei}}(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t)}{r} f_{\mathbf{k}_0}(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (100)$$

- * Der gestreute Anteil verhält sich in radialer Richtung wie der ungestreute Anteil (bis auf Abschwächung durch den Faktor $1/r$), hat also die Form des einlaufenden Wellenpakets.
- * Die Winkelabhängigkeit des gestreuten Anteils ist durch die Streuamplitude bestimmt.

Diese beiden Aussagen und die Definition der Streuamplitude (94) sind die wesentlichen Punkte dieses Abschnitts.



3.2.2 Differentieller und totaler Wirkungsquerschnitt

- Gehe im Folgenden davon aus, dass die Näherungen aus dem vorherigen Abschnitt sehr gut erfüllt sind, d.h. schreibe ‐=‐ statt ‐≈‐.
- Definition **differentieller Wirkungsquerschnitt**:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) = \frac{\text{Anzahl der gestreuten Teilchen pro Raumwinkelelement pro Zeit}}{\text{Anzahl der einlaufenden Teilchen pro Fläche pro Zeit}}. \quad (101)$$

- Das, was der Experimentator misst.
- Das, was der Theoretiker berechnen muss, um z.B. seine Theorie zu verifizieren, Rückschlüsse auf das Potential $V(\mathbf{r})$ zu ziehen, etc.

- Betrachte zunächst einen kontinuierlichen Teilchenstrahl beschrieben durch eine einlaufende ebene Welle mit Impuls \mathbf{k} bzw. die asymptotische Lösung der stationären SG (93).

- Anzahl der durch die ebene Welle beschriebenen einlaufenden Teilchen ist unendlich, daher “Teilchen pro Fläche” in der Definition (101).
- Stromdichte:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) (\nabla \psi(\mathbf{r}, t)) - (\nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)) \psi(\mathbf{r}, t) \right). \quad (102)$$

- Für einlaufende Teilchen, beschrieben durch $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$, ergibt sich

$$\mathbf{j}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{(2\pi)^3 m}. \quad (103)$$

- Für gestreute Teilchen, asymptotisch beschrieben durch $e^{+ikr} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi)/(2\pi)^{3/2} r$, ergibt sich

$$\mathbf{j}_{\text{scatter}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m r^2} \left| f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right|^2 \mathbf{e}_r. \quad (104)$$

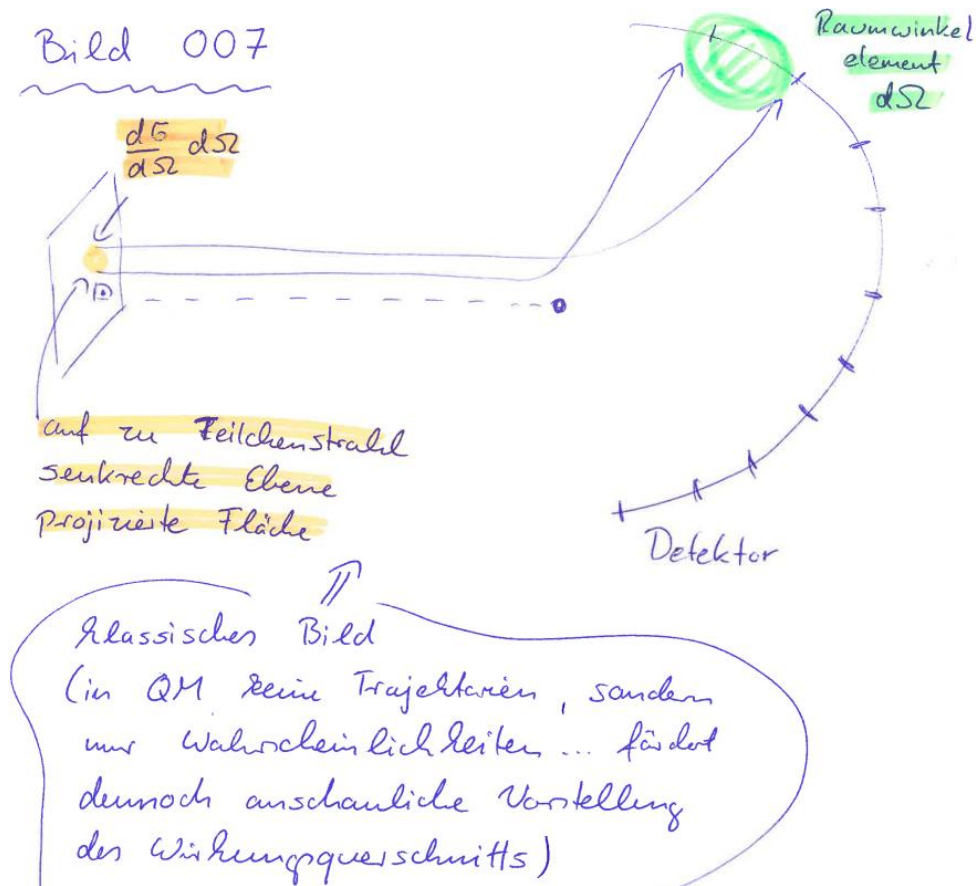
- Es folgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) = \frac{|\mathbf{j}_{\text{scatter}}(\mathbf{r}, t)| r^2}{|\mathbf{j}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)|} = \left| f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right|^2. \quad (105)$$

- Der **totale Wirkungsquerschnitt** ergibt sich durch Raumwinkelintegration,

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) = \int d\Omega \left| f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right|^2. \quad (106)$$

- Die Einheit von $d\sigma/d\Omega$ und von σ ist “Fläche”.
- Anschauliche Interpretation: Der Wirkungsquerschnitt ist die Fläche (senkrecht zur Einfallrichtung), in der Teilchen überhaupt bzw. innerhalb eines bestimmten Raumwinkels gestreut werden (“Mit welcher Fläche muss man Nenner in (101) multiplizieren, um 1 zu erhalten (100%ige Streuung)?”) ... bzw. der Wirkungsquerschnitt ist die projizierte Fläche des Targets.



- Siehe auch Vorlesungsaufzeichnungen zu “Theoretische Physik 1 – Mathematische Methoden”, Abschnitt 8.2, Diskussion von Streuung und Wirkungsquerschnitten in der klassischen Mechanik.
- Erweiterung auf einzelne Teilchen (Wellenpakete) geradlinig möglich:
 - Es muss über die Zeit integriert werden, da das Teilchen zu einem frñhem Zeitpunkt die Quelle verlñsst und zu einem spñtem Zeitpunkt einen Detektor erreicht.
 - Das Wellenpaket muss breiter als das Potential sein, d.h. aus Sicht des Potentials nñherungsweise eine ebene Welle.
 - Siehe z.B. F. Schwabl, “Quantenmechanik (QM I)”, Springer, Abschnitt 18.2.

3.2.3 Wiederholung: Freie stationäre SG in Kugelkoordinaten

- Die Lñsungen der freien stationären SG

$$(\Delta + k^2)\psi_n = 0 \quad (107)$$

sind z.B. ebene Wellen $\psi_n = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} / (2\pi)^{3/2}$.

- Eigenfunktionen sind nicht eindeutig. Linearkombinationen von Eigenfunktionen mit gleicher Energie, d.h. mit gleichem $|\mathbf{k}|$, sind ebenfalls Eigenfunktionen.
- Da \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z paarweise vertauschen, können Eigenfunktionen von \hat{H} gleichzeitig auch als Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z gewählt werden und mit entsprechenden Quantenzahlen E (bzw. $k = \sqrt{2mE}/\hbar$), l und m durchnummeriert werden, wobei

$$\hat{H}\psi_{klm} = E\psi_{klm} \quad (108)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2\psi_{klm} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{klm} \quad (109)$$

$$\hat{L}_z\psi_{klm} = \hbar m\psi_{klm}. \quad (110)$$

***** 09. Mai 2023 (9. Vorlesung) *****

- Eine Rechnung (siehe z.B. die Vorlesung “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik”) ergibt

$$\psi_{klm}(r, \vartheta, \varphi) = \left(A_{jl}(kr) + B_{n_l}(kr) \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (111)$$

- $j_l(kr)$: Sphärische Bessel-Funktionen, z.B. $j_0(x) = +\sin(x)/x$, $j_1(x) = +\sin(x)/x^2 - \cos(x)/x$.
- $n_l(kr)$: Sphärische Neumann-Funktionen, z.B. $n_0(x) = -\cos(x)/x$, $n_1(x) = -\cos(x)/x^2 - \sin(x)/x$.
- $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$: Kugelflächenfunktionen.
- Die Eigenfunktion sind durch k , l und m nicht eindeutig ausgezeichnet, da es zwei linear unabhängige Lösungen gibt.

- Eine beliebige Wellenfunktion $\phi(r, \vartheta, \varphi)$ kann gemäß

$$\phi(r, \vartheta, \varphi) = \int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} \left(A_{lm}(k)j_l(kr) + B_{lm}(k)n_l(kr) \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (112)$$

entwickelt werden.

- Eine Eigenfunktion $\phi_k(r, \vartheta, \varphi)$ von \hat{H} mit Energie $E = (\hbar k)^2/2m$ kann gemäß

$$\phi_k(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} \left(A_{lm}j_l(kr) + B_{lm}n_l(kr) \right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (113)$$

entwickelt werden, z.B. die in $+z$ -Richtung laufende ebene Welle

$$e^{+ikz} = \sum_{l=0}^\infty i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos(\vartheta)), \quad (114)$$

wobei

- $z = r \cos(\vartheta)$ (damit keine φ -Abhängigkeit; zur Entwicklung tragen nur Kugelflächenfunktionen $Y_{l0}(\vartheta, \varphi)$ bei, die φ -unabhängig sind),
- $Y_{l0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{(2l+1)/4\pi} P_l(\cos(\vartheta))$,
- die $P_l(x)$ bezeichnen Legendre-Polynome, Polynome l -ten Grades mit l Nullstellen im Intervall $[-1, +1]$, z.B. $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$, $P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$.

- Oft verwendet man sphärische Hankel-Funktionen statt sphärische Bessel- und Neumann-Funktionen:

$$h_l^{(1)}(x) = j_l(x) + in_l(x) \quad , \quad h_l^{(2)}(x) = (h_l^{(1)}(x))^* = j_l(x) - in_l(x), \quad (115)$$

$$\text{z.B. } h_0^{(1)}(x) = -ie^{+ix}/x, \quad h_0^{(2)}(x) = +ie^{-ix}/x.$$

- Sphärische Hankel-Funktionen beschreiben asymptotisch auslaufende bzw. einlaufende Kugelwellen (“ $e^{\pm ix}$ ”), sphärische Bessel- und Neumann-Funktionen stehende Wellen (“ $\sin(x)$ und $\cos(x)$ ”).

3.2.4 Partialwellen und Streuphasen

- Motivation: “Die Zerlegung einer Streuamplitude in Partialwellen, d.h. eine Reihenentwicklung nach Drehimpulsen, ist sinnvoll vor allem bei Wechselwirkungen mit kurzer Reichweite, wie z.B. der starken Wechselwirkung. Aufgrund der kurzen Reichweite tragen nämlich für niedrige Energien nur geringe Drehimpulse zur Streuung bei.” (Wikipedia)
- Betrachte im Folgenden ein rotationssymmetrisches Potential, d.h. $V(\mathbf{r}) = V(r)$.
- Betrachte im Folgenden eine einlaufende Welle in $+z$ -Richtung, $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ mit $\mathbf{k} = (0, 0, k)$. Diese kann wie in Abschnitt 3.2.3 diskutiert in Eigenfunktionen des freien Hamilton-Operators mit Energie $E = (\hbar k)^2/2m$ und der Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z entwickelt werden,

$$\begin{aligned} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= e^{+ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos(\vartheta)) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{1}{2} \left(h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right) P_l(\cos(\vartheta)). \end{aligned} \quad (116)$$

- Entwickle den Winkelanteil von $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ und $f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi)$ durch Kugelflächenfunktionen:

- Eine beliebige Funktion $F(r, \vartheta, \varphi)$ kann gemäß

$$F(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} R_{lm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (117)$$

geschrieben werden.

- Da die einlaufende Ebene Welle $e^{+ikz} = e^{+ikr \cos(\vartheta)}$ φ -unabhängig ist, gilt dies auch für $\phi_{\mathbf{k}} = \phi_k$ (sieht man z.B. an (90)); wenn man die linke Seite immer wieder in

rechte Seite einsetzt, generiert das ausschließlich φ -unabhängige Terme, da G_+ und V φ -unabhängig sind),

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (118)$$

mit zunächst unbestimmten $R_l(r)$ (die Faktoren $(2l+1)$ sind nicht notwendig, aber im Folgenden praktisch).

– $f_{\mathbf{k}}$ ist dann ebenfalls φ -unabhängig (sieht man z.B. an (94)),

$$f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) = f_{\mathbf{k}}(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos(\vartheta)) \quad (119)$$

mit zunächst unbestimmten **Partialwellenamplituden** f_l ($R_l(r)$ und f_l sind nicht unabhängig; f_l beschreibt $R_l(r)$ für große r ; siehe unten).

- (118) heißt **Partialwellenentwicklung** (= “Reihenentwicklung nach Eigenfunktionen des Drehimpulses”).
- Für $r > R$ ist $V(r) = 0$. Damit ist die Wellenfunktion $\phi_{\mathbf{k}}(r, \vartheta)$ für $r > R$ die eines freien Teilchens mit Energie $E = (\hbar k)^2/2m$. Es gilt also

$$R_l(r) = C \left(h_l^{(2)}(kr) + S_l(E) h_l^{(1)}(kr) \right) \quad (120)$$

- C ist eine E - und l -unabhängige Konstante, die wie folgt bestimmt werden kann:
 - * Gleichung (93): $\phi_{\mathbf{k}}$ entspricht einer einlaufenden ebene Welle $e^{+ikz}/(2\pi)^{3/2}$ (und damit einer Mischung aus einer ein- und auslaufenden Kugelwelle; siehe (116)) plus einer auslaufenden Kugelwelle.
 - * Gleichung (118): Die einlaufende Kugelwelle hat den Vorfaktor $C = 1/2(2\pi)^{3/2}$ (also ist C , wie oben behauptet, E - und l -unabhängig).
- $S_l(E)$ ist eine E -abhängige Funktion, die den Beitrag der l -ten Partialwelle zum Streuprozess beschreibt.

- Beweisskizze, dass $|S_l(E)| = 1$:

- Da $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$ gilt, kann eine Eigenfunktion $\phi_{\mathbf{k}}$ von \hat{H} mit Energieeigenwert $E = (\hbar k)^2/2m$ in Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{L}}^2$ entwickelt werden. Dies ist gerade Entwicklung (118), wobei $R_l(r)$ für $r > R$ die Form (120) hat.
 - Nicht nur $\phi_{\mathbf{k}}$ ist eine Lösung der stationären SG, sondern auch jeder Term in (118).
- Für jede Lösung $\psi(\mathbf{r})$ der stationären SG gilt

$$\oint d\mathbf{A} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0, \quad (121)$$

wobei $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ die Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist (Beweis ist Hausaufgabe, Aufgabenblatt 4, Aufgabe 2).

- Aus den vorherigen beiden Punkten folgt

$$\left| S_l(E) \right| = 1 \quad (122)$$

(Beweis ist Hausaufgabe).

- Definition von **Streuphasen** $\delta_l(E)$:

$$S_l(E) = e^{2i\delta_l(E)}. \quad (123)$$

- Einsetzen in (120):

$$R_l(r) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2}} \left(h_l^{(2)}(kr) + e^{+2i\delta_l(E)} h_l^{(1)}(kr) \right) \quad (124)$$

bzw. asymptotisch für $r \rightarrow \infty$

$$R_l(r) = \frac{e^{+i\delta_l(E)}}{(2\pi)^{3/2} 2ikr} \left(e^{+i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} \right), \quad (125)$$

wobei $h_l^{(2)}(x) = (h_l^{(1)}(x))^*$ und $h_l^{(1)}(x) \sim -(i/x)e^{+i(x-l\pi/2)}$ verwendet wurde.

- Wie schon bei 1-dimensionaler Streuung spiegelt sich der Effekt des Potentials in Phasenverschiebungen $\delta_l(E)$ wieder. Ohne Potential, d.h. für $V(r) = 0$, wäre $S_l(E) = 1$ und damit $\delta_l(E)$ ein Vielfaches von π .
- Die Beziehung zwischen Partialwellenamplituden $f_l = f_l(E)$ und Streuphasen $\delta_l(E)$ kann am asymptotischen Verhalten von $\phi_k(r, \vartheta)$ abgelesen werden:

- $\phi_k(r, \vartheta)$ ausgedrückt durch f_l : Startpunkt ist (93), dann Einsetzen der Entwicklungen (116) und (119) sowie $h_l^{(2)}(x) = (h_l^{(1)}(x))^*$ und $h_l^{(1)}(x) \sim -(i/x)e^{+i(x-l\pi/2)}$,

$$\begin{aligned} \phi_k(r, \vartheta) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{+ikz} + \frac{e^{+ikr}}{r} f_k(\vartheta) \right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} P_l(\cos(\vartheta)) \left(\frac{i^l}{2i} \left(e^{+i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)} \right) + k f_l e^{+ikr} \right). \end{aligned} \quad (126)$$

- $\phi_k(r, \vartheta)$ ausgedrückt durch $\delta_l(E)$: Startpunkt ist (118), dann Einsetzen von (125),

$$\begin{aligned} \phi_k(r, \vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta)) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} P_l(\cos(\vartheta)) \frac{i^l}{2i} e^{+i\delta_l(E)} \\ &\quad \left(e^{+i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} \right). \end{aligned} \quad (127)$$

- Ein Vergleich liefert

$$f_l = \frac{e^{+2i\delta_l(E)} - 1}{2ik} = \frac{e^{+i\delta_l(E)} \sin(\delta_l(E))}{k}. \quad (128)$$

- Streuamplitude (119) ausgedrückt durch Streuphasen:

$$f_k(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{+i\delta_l(E)} \sin(\delta_l(E)) P_l(\cos(\vartheta)). \quad (129)$$

- Differentieller Wirkungsquerschnitt (105) ausgedrückt durch Streuphasen:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) &= \left| f_k(\vartheta) \right|^2 = \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{+i(\delta_l(E)-\delta_{l'}(E))} \sin(\delta_l(E)) \sin(\delta_{l'}(E)) P_l(\cos(\vartheta)) P_{l'}(\cos(\vartheta)). \end{aligned} \quad (130)$$

- Totaler Wirkungsquerschnitt (106) ausgedrückt durch Streuphasen:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = \dots = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2, \quad (131)$$

wobei $\int_{-1}^{+1} dx P_l(x) P_{l'}(x) = 2\delta_{ll'}/(2l+1)$ verwendet wurde, bzw.

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad (132)$$

mit den Partialwellenbeiträgen

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2, \quad (133)$$

d.h. die Beiträge der Partialwellen addieren sich beim totalen Wirkungsquerschnitt (dies ist nicht so, d.h. komplizierter beim differentiellen Wirkungsquerschnitt).

- Streuphasen $\delta_l(E) \not\approx 0$ (d.h. deutlich abweichend von 0) nur für $l \lesssim kR$:
 - Der Drehimpuls ist $|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)} \approx \hbar l$ bzw. $|\mathbf{L}| = dp = d\hbar k$, wobei d Abstand ist, in dem das Teilchen das Potentialzentrum passiert.
 - Damit das Teilchen das Potential trifft, muss $d < R$ gelten.
 - Damit $R > d = |\mathbf{L}|/\hbar k \approx l/k$ bzw. $l \lesssim kR$.
- Die Partialwellenentwicklung ist vor allem hilfreich, wenn das Potential kurzreichweitig ist. Dann kann der Streuprozess durch wenige Zahlen bzw. Funktionen $\delta_l(E)$ (oder äquivalent f_l) charakterisiert werden.

3.2.5 Optisches Theorem (aus Zeitgründen in der Vorlesung nicht besprochen)

- Aus (129) folgt

$$\text{Im}(f_k(\vartheta)) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2 P_l(\cos(\vartheta)) \quad (134)$$

und für $\vartheta = 0$ und unter Verwendung von $P_l(1) = 1$, (132) und (133)

$$\text{Im}(f_k(0)) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2 = \frac{k}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{k\sigma}{4\pi} \quad (135)$$

bzw.

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f_k(0)) \quad (136)$$

(optisches Theorem).

- An der Streuamplitude für $\vartheta = 0$ kann unmittelbar der totale Wirkungsquerschnitt abgelesen werden.
- Durch Messung von σ und $(d\sigma/d\Omega)(\vartheta = 0)$ (entspricht Messung des Betrags von $f_k(\vartheta = 0)$) kann Phase von $f_k(\vartheta = 0)$ gemessen werden.

3.2.6 Bornsche Näherung für das gesamte Streuproblem

- Ziel (hier und in den folgenden Abschnitten): Berechnung der Streuamplitude und von damit zusammenhängenden Größen und Observablen, z.B. von Wirkungsquerschnitten.
- Starte mit der Integralgleichung (92):

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \quad (137)$$

- Die linke Seite kann sukzessive in die rechte Seite eingesetzt werden. Dies ergibt eine unendliche Reihe.
- Falls der Effekt des Potentials $V(\mathbf{r})$ auf die einlaufende ebene Welle schwach ist (d.h. der rechte Term auf der rechten Seite von (137) klein ist), erhält man eine gute Approximation, wenn man nach wenigen Schritten abbricht, d.h. statt dem vollen $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ nur noch die ebene Welle $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ rechts einsetzt.
- Ein sofortiges Abbrechen, d.h. direktes Einsetzen der ebenen Welle $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ in die rechte Seite liefert die **Bornsche Näherung**,

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \left(\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \right). \quad (138)$$

- Für die Streuamplitude (94) entspricht dies

$$\begin{aligned}
f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) &= -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \approx \\
&\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{+i(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi))\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') = -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)), \quad (139)
\end{aligned}$$

d.h. die Streuamplitude ist in Bornscher Näherung die Fourier-Transformierte des Potentials.

- Grobe Abschätzung, wann die Bornschen Näherung gut ist:
 - In der rechten Seite von (138) muss der zweite Term klein gegenüber dem ersten Term sein (genau dann ist der Effekt des Potentials auf die ebene Welle schwach).
 - Das Potential hat starken Einfluss vor allem in der Nähe seines Zentrums, d.h. in Gegend von $\mathbf{r} \approx 0$.
 - Betrachte ein rotationssymmetrisches Potential $V(\mathbf{r}) = V(r)$ und exemplarisch $\mathbf{r} = 0$ und berechne den zweiten Term:

$$\begin{aligned}
&\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ikr'}}{r'} V(r') e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}'} = \\
&= \frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' e^{+ikr'} V(r') \int_{-1}^{+1} d(\cos(\vartheta)) e^{+ikr' \cos(\vartheta)} = \\
&= \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr' e^{+ikr'} V(r') \sin(kr'), \quad (140)
\end{aligned}$$

d.h. die Bornsche Näherung ist gut, falls

$$\frac{2m}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty dr' e^{+ikr'} V(r') \sin(kr') \right| \ll 1, \quad (141)$$

also für große Energie der einfallenden Teilchen $E = (\hbar k)^2/2m$ und/oder schwaches Potential $V(r)$.

***** 16. Mai 2023 (12. Vorlesung) *****

3.2.7 Bornsche Näherung für Partialwellen

- Ist die Bornsche Näherung nicht für das gesamte Streuproblem anwendbar, kann sie dennoch für höhere Partialwellen eine gute Approximation sein.
- Entwicklung einer ebenen Welle in beliebiger Richtung (Wellenzahlvektor \mathbf{k}) nach Eigenfunktionen des freien Hamilton-Operators mit Energie $E = (\hbar k)^2/2m$ und der Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{L}}^2$ und \hat{L}_z :

$$e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(kr) \sum_{m=-l}^{+l} \left(Y_{lm}(\Omega_{\mathbf{k}}) \right)^* Y_{lm}(\Omega_{\mathbf{r}}) \quad (142)$$

(kann man zeigen; ist die Verallgemeinerung von (116); der Spezialfall (116) ergibt sich durch Einsetzen von $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ und Verwendung von $Y_{l0}(\vartheta = 0, \varphi) = \sqrt{2l+1}/\sqrt{4\pi}$ und $Y_{lm}(\vartheta = 0, \varphi) = 0$ für $m \neq 0$).

- Der Startpunkt ist (94) (für eine einlaufende Welle $e^{+ikz}/(2\pi)^{3/2}$ und $V(\mathbf{r}) = V(r)$), dann Einsetzen von (142) und (118):

$$\begin{aligned}
f_k(\vartheta) &= -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\tilde{\mathbf{k}}(k,\vartheta)\mathbf{r}'} V(r') \phi_k(r', \vartheta') = \\
&= -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \int d^3r' 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l j_l(kr') \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\Omega_{\tilde{\mathbf{k}}(k,\vartheta)}) \left(Y_{lm}(\Omega_{\mathbf{r}'}) \right)^* V(r') \\
&\quad \sum_{l'=0}^{\infty} i^{l'} (2l'+1) R_{l'}(r') P_{l'}(\cos(\vartheta')) = \dots
\end{aligned} \tag{143}$$

- Verwende

$$\int d\Omega \left(Y_{lm}(\Omega) \right)^* P_{l'}(\cos(\vartheta)) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} \int d\Omega \left(Y_{lm}(\Omega) \right)^* Y_{l'0}(\Omega) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} \delta_{l'l} \delta_{m0}. \tag{144}$$

- Fortsetzung von (143):

$$\dots = -\frac{2(2\pi)^{3/2}m}{\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos(\vartheta)) \int_0^{\infty} dr r^2 j_l(kr) V(r) R_l(r) \tag{145}$$

(die Integrationsvariable r' wurde zwecks einfacher Notation in r umbenannt).

- Damit folgt für die Partialwellenamplituden aus (119)

$$f_l = -\frac{2(2\pi)^{3/2}m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr r^2 j_l(kr) V(r) R_l(r). \tag{146}$$

- Falls das Potential geringen Einfluss auf die l -te Partialwelle besitzt, gilt $R_l(r) \approx j_l(kr)/(2\pi)^{3/2}$ (Gleichheit bei $V(r) = 0$; sieht man durch Vergleich von (116) und (118)) und $\delta_l \ll 1$. Damit kann (128) genähert werden,

$$f_l = \frac{e^{+2i\delta_l(E)} - 1}{2ik} \approx \frac{\delta_l(E)}{k}, \tag{147}$$

woraus

$$\delta_l \approx -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr r^2 \left(j_l(kr) \right)^2 V(r) \tag{148}$$

folgt (**Bornsche Näherung für die l -te Partialwelle**).

- Das Ersetzen von $R_l(r)$ durch $j_l(kr)/(2\pi)^{3/2}$ entspricht dem Ersetzen von $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ durch $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ im vorausgegangen Abschnitt 3.2.6.
- Die Bornsche Näherung für die l -te Partialwelle ist gut, wenn $l \gtrsim kR$ (d.h. wenn die Partialwelle kaum zum Streuprozess beiträgt; siehe die Diskussion am Ende von Abschnitt 3.2.4).

3.2.8 Näherungsfreie Bestimmung von Streuphasen

- Partialwellenentwicklung von $\phi_k(r, \vartheta)$:

$$\phi_k(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (149)$$

(Gleichung (118)).

- Notation:

$$R_l(r) = \begin{cases} R_l^<(r) & \text{falls } r \leq R \\ R_l^>(r) & \text{falls } r \geq R \end{cases} \quad (150)$$

(R ist die Reichweite des Potentials).

- Es gilt

$$R_l^>(r) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2}} \left(h_l^{(2)}(kr) + e^{+2i\delta_l(E)} h_l^{(1)}(kr) \right) \quad (151)$$

(Gleichung (124)).

- Die Streuphasen $\delta_l(E)$ ergeben sich aus $R_l^<(r)$. Sie müssen so gewählt werden, dass $\phi_k(r, \vartheta)$ stetig im Funktionswert und der ersten Ableitung ist, d.h. dass

$$R_l^<(R) = R_l^>(R) \quad , \quad \left. \frac{dR_l^<(r)}{dr} \right|_{r=R} = \left. \frac{dR_l^>(r)}{dr} \right|_{r=R} \quad (152)$$

gilt.

- Diese zwei Bedingungen legen nicht nur die Streuphase $\delta_l(E)$ fest, sondern auch die Normierung von $R_l^>(r)$, passend zur gewählten Normierung von $R_l^<(r)$. Am Ende muss eine weitere Normierung der gesamten Funktion $R_l(r)$ stattfinden, so dass der Anteil $R_l^>(r)$ der Normierung der einlaufenden ebenen Welle entspricht. Letzteres wurde für $R_l^>(r)$ in (151) aber bereits korrekt implementiert (der Vorfaktor $1/2(2\pi)^{3/2}$; siehe Abschnitt 3.2.4). Daher können die zwei Bedingungen (151) zu einer Bestimmungsgleichung für $\delta_l(E)$ kombiniert werden,

$$\left. \frac{d\ln(R_l^<(r))}{dr} \right|_{r=R} = \left. \frac{d\ln(R_l^>(r))}{dr} \right|_{r=R} \quad (153)$$

(“Gleichheit der logarithmischen Ableitung”).

- Verwende die Notation $\alpha_l = (d\ln(R_l^<(r))/dr)|_{r=R}$, dann Einsetzen von (151) und geradliniges Umstellen:

$$\cot(\delta_l(E)) = \left. \frac{dn_l(kr)/dr - \alpha_l n_l(kr)}{dj_l(kr)/dr - \alpha_l j_l(kr)} \right|_{r=R} \quad (154)$$

- $R_l^<(r)$ und damit α_l kann gegebenenfalls mit einem Computer bestimmt werden (vergleichsweise einfache Numerik).

3.2.9 Beispiel: Streuung an einer undurchdringlichen Kugel

- Potential einer undurchdringlichen Kugel:

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & \text{falls } r \leq R \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (155)$$

- Es muss gelten $\phi_k(r = R, \vartheta) = 0$. Damit $R_l^<(R) = 0$, damit $|\alpha_l| = \infty$, damit

$$\cot(\delta_l(E)) = \frac{n_l(kR)}{j_l(kR)} \quad (156)$$

(diese Bedingung folgt auch durch direktes Einsetzen von (151) in $R_l^>(R) = 0$).

- Für $l = 0$ ergibt sich

$$\delta_0(E) = -kR. \quad (157)$$

- Es tragen nur Partialwellen mit $l \lesssim kR$ bei (siehe Diskussion am Ende von Abschnitt 3.2.4), d.h. für $kR \lesssim 1$ im Wesentlichen nur die 0-te Partialwelle (“reine s -Wellen-Streuung”),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) \approx \frac{(\sin(\delta_0(E)))^2}{k^2} = \frac{(\sin(kR))^2}{k^2} \quad (158)$$

(aus Gleichung (130)), d.h. in diesem Grenzfall ist die Streuung isotrop (gleichverteilt in alle Richtungen), und

$$\sigma \approx \frac{4\pi(\sin(\delta_0(E)))^2}{k^2} = \frac{4\pi(\sin(kR))^2}{k^2}. \quad (159)$$

- Für $kR \ll 1$ ergibt sich außerdem

$$\sigma \approx 4\pi R^2, \quad (160)$$

das Vierfache des klassischen Streuquerschnitts einer undurchdringlichen Kugel.

3.2.10 Beispiel: Resonanzstreuung am sphärischen Potentialtopf

- Potential des sphärischen Potentialtopfs:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{falls } r \leq R \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (161)$$

($V_0 > 0$).

- Die Lösung im Inneren, d.h. für $r \leq R$, ist (149) und (150) mit

$$R_l^<(r) = A_l j_l(qr) \quad (162)$$

und $q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$, die nicht-singuläre Lösung für ein freies Teilchen mit Impuls $\hbar q$ und Drehimpulsquantenzahlen l und $m = 0$.

- Die logarithmische Ableitung ist damit

$$\alpha_l = \left. \frac{d \ln(R_l^<(r))}{dr} \right|_{r=R} = \frac{j_l'(qR)q}{j_l(qR)}. \quad (163)$$

***** 23. Mai 2023 (12. Vorlesung) *****

- Betrachte im Folgenden $kR \ll 1$, d.h. den Spezialfall niedriger Energie.

- (154) kann mit Hilfe von

$$j_l(x) \approx \begin{cases} x^l \\ \text{falls } x \ll 1 \end{cases}, \quad n_l(x) \approx -\frac{1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l-1)}{x^{l+1}} \quad (164)$$

genähert werden,

$$\begin{aligned} \tan(\delta_l(E)) &= \left. \frac{dj_l(kr)/dr - \alpha_l j_l(kr)}{dn_l(kr)/dr - \alpha_l n_l(kr)} \right|_{r=R} \approx \\ &\approx \frac{(2l+1)(kR)^{2l+1}(l - R\alpha_l)}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l+1))^2(l+1 + R\alpha_l)}. \end{aligned} \quad (165)$$

- Der Partialwellenbeitrag σ_l zum totalen Wirkungsquerschnitt wird maximal für $\delta_l(E) = (1/2 + n)\pi$ (Gleichung (133)). Dies ist der Fall, wenn rechte Seite von (165) divergiert, d.h. für

$$l+1 + R\alpha_l = 0 \quad (166)$$

(bezeichnet man als **Resonanz-Streuung**; Ähnlichkeit zur Streuung in 1 Raumdimension in Abschnitt 3.1, dort wurden Resonanzen als Maxima von $S(E)$ definiert).

- Abseits von Resonanzen und für große l ist der Partialwellenbeitrag σ_l sehr klein, da $\tan(\delta_l(E)) \propto (kR)^{2l+1}$.
- Betrachte im Folgenden einen tiefen Potentialtopf, d.h. $qR \gg 1, l$. Benutze außerdem die asymptotische Form $j_l(x) \sim \sin(x - l\pi/2)/x$ sowie $j_l(x) = ((l-1)/x)j_{l-1}(x) - j_{l-1}'(x)$ in (163) und (166),

$$\begin{aligned} l+1 = -R\alpha_l &= -qR \frac{j_l'(qR)}{j_l(qR)} \sim qR \frac{j_{l+1}(qR)}{j_l(qR)} = -qR \cot(qR - l\pi/2) \\ \rightarrow \cot(qR - l\pi/2) &= -\frac{l+1}{qR} \\ \rightarrow qR - l\pi/2 &\approx \frac{l+1}{qR} + (1/2 + n)\pi. \end{aligned} \quad (167)$$

- (167) ist die Bestimmungsgleichung für Resonanzenergien:
 - $E_R = (\hbar q)^2/2m - V_0$ mit q , das (167) erfüllt.
 - (167) ist identisch zur Bestimmungsgleichung für gebundene Zustände im Potentialtopf, d.h. mit $E < 0$ (siehe z.B. F. Schwabl, “Quantenmechanik (QM I)”, Springer, Abschnitt 17.4).
 - Dies zeigt, dass gebundene Zustände beim Übergang von $E < 0$ zu $E > 0$ zu speziellen Streuzuständen werden, den Resonanzen, die sich durch maximale Beiträge zum Wirkungsquerschnitt auszeichnen.
- Die Betrachtungen dieses Abschnitts sind geradlinig auf andere Potentiale übertragbar. Der tiefe sphärische Potentialtopf bei niedriger Energie der einfallenden Teilchen wurde nur deshalb gewählt, weil analytische Rechnungen möglich sind.
- $\delta_l(E)$ in der Nähe einer Resonanzenergie E_R :

- Zunächst Entwicklung von α_l :

$$R\alpha_l(E) = \underbrace{R\alpha(E_R)}_{=-(l+1)} + R \underbrace{\frac{d\alpha(E)}{dE}}_{=\alpha'_l(E_R)} \Big|_{E=E_R} (E - E_R) + \mathcal{O}((E - E_R)^2). \quad (168)$$

- Einsetzen in (165):

$$\begin{aligned} \tan(\delta_l(E)) &\approx \frac{(2l+1)(kR)^{2l+1}(l - R\alpha_l)}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l+1))^2(l+1 + R\alpha_l)} = \\ &= \frac{(kR)^{2l+1}}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l-1))^2 R\alpha'_l(E_R)(E - E_R)} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) = \\ &= -\frac{\Gamma/2}{E - E_R} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) \end{aligned} \quad (169)$$

mit

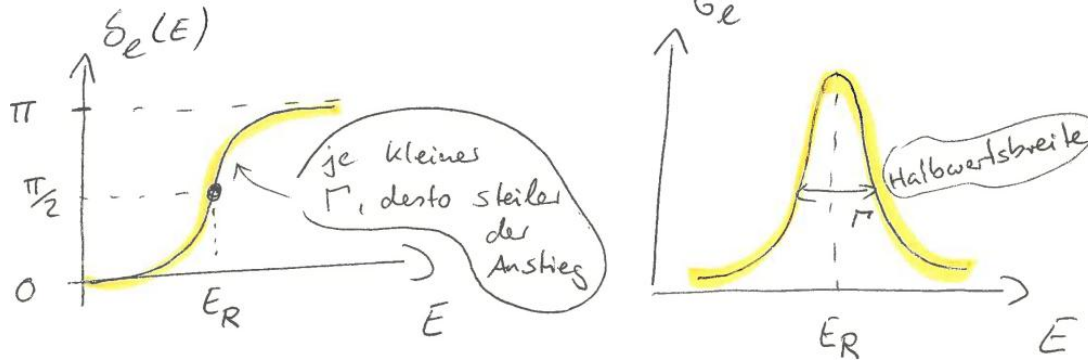
$$\Gamma/2 = -\frac{(kR)^{2l+1}}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l-1))^2 R\alpha'_l(E_R)} = \text{const.} \quad (170)$$

- Beitrag der l -ten Partialwelle zum totalen Wirkungsquerschnitt in der Nähe einer Resonanzenergie E_R :

$$\begin{aligned} \sigma_l &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\tan(\delta_l(E))^2}{1 + \tan(\delta_l(E))^2} \approx \\ &\approx \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) \end{aligned} \quad (171)$$

((133) wurde als Startpunkt verwendet).

Bild - 008



- Streuamplitude f_l in der Nähe einer Resonanzenergie E_R :

$$\begin{aligned}
 f_l &= \frac{e^{+i\delta_l(E)} \sin(\delta_l(E))}{k} = \frac{\tan(\delta_l(E))}{k(1 - i \tan(\delta_l(E)))} \approx \\
 &\approx \frac{-\Gamma/2}{k(E - E_R + i\Gamma/2)} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) \quad (172)
 \end{aligned}$$

((128) wurde als Startpunkt verwendet).

- Starke Ähnlichkeiten zu den in 1 Raumdimension diskutierten Resonanzen:

– Streuphase (169) entspricht (71):

$$\delta(E) \approx \arctan\left(\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)\right). \quad (173)$$

– Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt (171) entspricht (65):

$$|S(E)|^2 = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (174)$$

– Streuamplitude (172) entspricht (64):

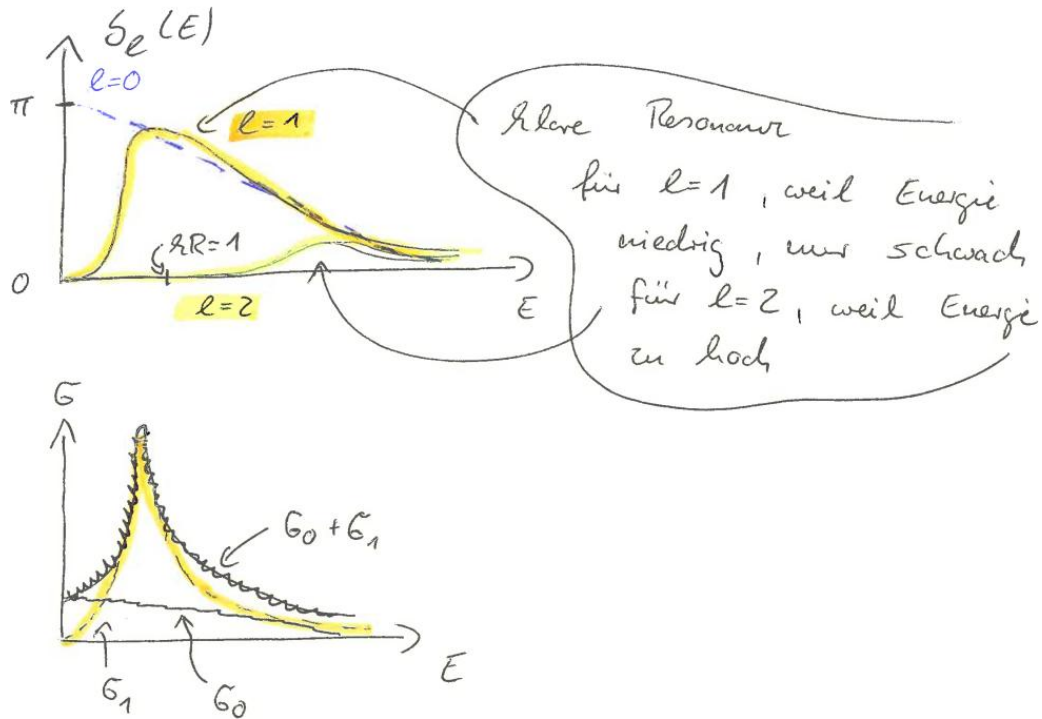
$$S(E) \approx (-1)^n e^{-2ika} \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2}. \quad (175)$$

Die Diskussion aus Abschnitt 3.1 ist daher im Wesentlichen auch hier in 3 Raumdimensionen gültig.

- Resonanzen sind deutlich ausgeprägt, wenn Γ klein ist, d.h. für niedrige Energie der einlaufenden Teilchen $E = (\hbar k)^2/2m$ und große Drehimpulse l .

Bild - 009

Siehe Buch von F. Schwabl für maßstabsgetreue Zeichnung.



- Verschiedene Möglichkeiten zur Identifikation einer Resonanz (sowohl Energie/Masse E_R als auch Breite/inverse Lebensdauer Γ):
 - Durch maximalen Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt (Gleichung (171))
→ Experimentator.
 - Durch schnelle Veränderung der Streuphase von ≈ 0 zu $\approx +\pi$ (Gleichung (169))
→ Theoretiker.
 - Durch Pol der Streuamplitude in der komplexen Energieebene (entspricht "Pol in der S -Matrix bzw. der T -Matrix"; (Gleichung (172))
→ Theoretiker.

4 Relativistische QM

4.1 Spezielle Relativitätstheorie

- Grundlage der relativistischen QM ist die spezielle Relativitätstheorie, daher im Folgenden eine kurze Wiederholung.
- Wesentliche Naturkonstanten:
 - Lichtgeschwindigkeit: $c = 2.997 \dots \times 10^{-8}$ m/s (verbindet Längen und Zeiten).
 - Plancksches Wirkungsquantum: $\hbar = 6.582 \dots \times 10^{-16}$ eVs (verbindet Energien und Zeiten).
- Natürliche Einheiten:
 - Definiere $c = 1$. Damit haben Längen und Zeiten die gleiche Einheit (“für eine Zeitspanne wird die Entfernung angegeben, die Licht in dieser Zeitspanne zurücklegt”), ebenso Impulse und Energien.
 - Definiere $\hbar = 1$. Damit haben Längen und Zeiten die inverse Einheit von Impulsen und Energien.
 - Typischer Weise gibt man alle dimensionsbehafteten Größen in entsprechenden Potenzen von entweder fm = 10^{-15} m oder MeV an.

4.1.1 “Herleitung” von Lorentz-Transformationen

- Raumzeitvektor: $x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (t, x, y, z) = (t, \mathbf{x})$.
- Betrachte den “Abstand” zweier Raumzeitvektoren x^μ und y^μ ,

$$s^2 \equiv \underbrace{(x^0 - y^0)^2}_{\equiv s^0} - \underbrace{(x^1 - y^1)^2}_{\equiv s^1} - \underbrace{(x^2 - y^2)^2}_{\equiv s^2} - \underbrace{(x^3 - y^3)^2}_{\equiv s^3}. \quad (176)$$

- Sind x^μ und y^μ durch ein Lichtsignal verbunden, gilt $s^2 = 0$.
- Experimente:
 - Licht breitet sich in allen Inertialsystemen mit der gleichen Geschwindigkeit c aus. Damit gilt für zwei Inertialsysteme Σ und Σ' $s^2 = 0 \leftrightarrow s'^2 = 0$.
 - $s^2 = s'^2$.
- Notation:
 - Unterscheide zwischen oberen und unteren Indizes.
 - Kontravarianter Vektor: x^μ .
 - Kovarianter Vektor: $x_\mu = (x_0, x_1, x_2, x_3) \equiv (t, -x, -y, -z) = (t, -\mathbf{x})$.

- Übergang zwischen kontra- und kovarianten Vektoren/Indizes mit Hilfe des metrischen Tensors/der Minkowski-Metrik $\eta_{\mu\nu}$, z.B. $x_\mu = \eta_{\mu\nu}x^\nu$ bzw. $x^\mu = \eta^{\mu\nu}x_\nu$, wobei $\eta_{\mu\nu} = \eta^{\mu\nu} = \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$.
- Damit $s^2 = s^\mu \eta_{\mu\nu} s^\nu = s^\mu s_\mu$.

- Welche Koordinatentransformationen verbinden Inertialsysteme?

- Die Homogenität von Raum und Zeit liefert eine Einschränkung auf inhomogene lineare Transformationen, $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu$.
- $s^2 = s'^2$ führt auf

$$s'^\mu \eta_{\mu\nu} s'^\nu = \Lambda^\mu{}_\alpha s^\alpha \eta_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\beta s^\beta. \quad (177)$$

Da s^μ beliebig sein kann, folgt

$$\underbrace{\Lambda^\mu{}_\alpha}_{=(\Lambda^T)_\alpha{}^\mu} \eta_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\beta = \eta_{\alpha\beta} \rightarrow \Lambda^T \eta \Lambda = \eta \quad (\text{Matrixform}) \quad (178)$$

(“ Λ ist also eine Art orthogonale Transformation.”). Transformationen Λ , die (178) erfüllen, werden als Lorentz-Transformationen (LTs) bezeichnet.

- Klassifikation von Größen gemäß ihres Transformationsverhaltens unter LTs:

- $x' = x \rightarrow$ Skalar.
- $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\alpha x^\alpha \rightarrow$ (kontravarianter) Vektor.
- $x'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda^\nu{}_\beta x^{\alpha\beta} \rightarrow$ (kontravarianter) Tensor (2-ter Stufe).
- ...

- Ableitungen transformieren unter LTs kovariant:

- $\partial_\mu \equiv (\partial_t, \partial_x, \partial_y, \partial_z) = (\partial_t, \nabla)$.
- Es folgt $\partial^\mu = (\partial_t, -\partial_x, -\partial_y, -\partial_z)$.
- D'Alembert-Operator: $\square \equiv \partial^\mu \partial_\mu = \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 = \partial_t^2 - \Delta$.

- Spezielle LTs:

- **(1) Rotationen:**

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix}, \quad (179)$$

wobei R eine Rotationsmatrix ist, also $R^T R = 1$ und $\det(R) = 1$. Damit $t' = t$ und $\mathbf{x}' = R\mathbf{x}$.

- **(2) Boost in x -Richtung (analog in y - oder z -Richtung):**

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & \pm\gamma\beta & 0 & 0 \\ \pm\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv v, \quad \gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1-v^2}}, \quad (180)$$

wobei sich die beiden Inertialsysteme relativ zueinander in x -Richtung mit Geschwindigkeit v bewegen. Damit $(t', x', y', z') = (\gamma(t \pm \beta x), \gamma(x \pm \beta t), y, z)$.

– **(3) Zeitumkehr:**

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}. \quad (181)$$

– **(4) Parität (Raumspiegelung):**

$$\Lambda = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (182)$$

– Jede LT lässt sich als Kombination von **(1)**, **(2)**, **(3)** und **(4)** schreiben.

- Inhomogene LTs (Poincare-Transformationen): LTs + Translation, d.h.

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + a^{\mu}. \quad (183)$$

- Naturgesetze sind in allen Inertialsystemen gleich. Diese sind durch Poincare-Transformationen verbunden.

→ Relativistische QM Verallgemeinerungen der SG müssen form-invariant unter Poincare-Transformationen sein.

***** 30. Juni 2023 (14. Vorlesung) *****

4.1.2 Energie und Impuls relativistischer Teilchen

- Weltlinie eines Teilchens in einem beliebigen Inertialsystem Σ : $x^{\mu}(t) = (t, \mathbf{x}(t))$.
- Im Ruhesystem des Teilchens (Inertialsystem Σ'): $dx'^{\mu} = (dt', 0) \equiv (d\tau, 0)$.
- $(dx)^2 = (dx')^2$ liefert $d\tau^2 = dt^2 - d\mathbf{x}^2 = dt^2(1 - \mathbf{v}^2)$, wobei $\mathbf{v} = d\mathbf{x}/dt$.
- Eigenzeit:

$$\tau = \int_{t_i}^{t_f} dt \sqrt{1 - \mathbf{v}^2} \quad (184)$$

(Zeit die im Ruhesystem Σ' des Teilchens vergangen ist, während der Zeitspanne $t_i \dots t_f$ im Inertialsystem Σ).

- Vierergeschwindigkeit:

$$u^{\mu} \equiv \frac{dx^{\mu}}{d\tau} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1 - \mathbf{v}^2}}}_{=\gamma} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}. \quad (185)$$

- Viererimpuls: $p^{\mu} \equiv mu^{\mu}$.

- $p^0 = mu^0 = m\gamma = m + m\mathbf{v}^2/2 + \mathcal{O}((\mathbf{v}^2)^2)$. Dies legt die Interpretation als Gesamtenergie nahe, also $p^0 = E$.
- $\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v} = m\mathbf{v} + \mathcal{O}(|\mathbf{v}|^3)$. Dies entspricht für kleine Geschwindigkeiten dem nicht-relativistischen Impuls $m\mathbf{v}$.
- Lorentz-Invariante p^2 :
 - Im Inertialsystem Σ : $p^2 = E^2 - \mathbf{p}^2$.
 - Im Ruhesystem Σ' : $p'^2 = m^2$.
 - Aufgrund von $p^2 = p'^2$ $E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2$ (relativistische Energie-Impuls-Beziehung).

4.2 Klein-Gordon-Gleichung

- Ziel: Aufstellen einer relativistischen Version der SG.
- (Nicht-relativistische) SG:
 - Starte mit der nicht-relativistischen Energie-Impuls-Beziehung $E = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{r})$.
 - Korrespondenzprinzip $E \rightarrow +i\partial_t$, $\mathbf{p} \rightarrow -i\nabla$ und Anwenden der resultierenden Operatoren auf eine Wellenfunktion ψ liefert

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{1}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right)\psi(\mathbf{r}, t). \quad (186)$$

- Analoges Vorgehen im relativistischen Fall:
 - Relativistische Energie-Impuls-Beziehung (für ein freies Teilchen): $E = \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}$.
 - Korrespondenzprinzip:

$$i\partial_t\phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{m^2 - \Delta}\phi(\mathbf{r}, t); \quad (187)$$

Probleme verursachen die Ableitungen in Δ unter der Wurzel. Eine Entwicklung führt zu unendlich hohen Ableitungen. Gleichung (187) ist daher ungeeignet.

- Weiterer Versuch:
 - Starte mit $E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2$.
 - Das Korrespondenzprinzip liefert die sogenannte **Klein-Gordon-Gleichung** (KGG):

$$-\partial_t^2\phi(\mathbf{r}, t) = \left(m^2 - \Delta \right)\phi(\mathbf{r}, t) \quad (188)$$

bzw.

$$\left(\square + m^2 \right)\phi(x) = 0 \quad (189)$$

($\square \equiv \partial^\mu\partial_\mu$ [d'Alembert-Operator]).

- Die KGG ist invariant unter Lorentz-Transformationen:
 - * $\partial^\mu\partial_\mu = \partial'^\mu\partial'_\mu$.
 - * $\phi = \phi'$ (das Transformationsverhalten eines Skalarfelds; das fordert man bzw. legt man so fest).

* Damit

$$\left(\square' + m^2\right)\phi' = 0. \quad (190)$$

- Lösung der KGG:

- Ansatz: Ebene Welle, $\phi(x) = e^{-ikx}$,

$$\left(\square + m^2\right)\phi(x) = \left(-k^\mu k_\mu + m^2\right)\phi(x) = 0, \quad (191)$$

also $-k^\mu k_\mu + m^2 = 0$ bzw. $-(k^0)^2 + \mathbf{k}^2 + m^2 = 0$ bzw. $k^0 = \pm\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$.

- Korrespondenzprinzip: k^0 entspricht der Energie, \mathbf{k} dem Impuls.

Außerdem $k^0 = \pm\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$.

→ Damit sind negative Energien erlaubt ...? (1. Problem der KGG)

- Allgemeine Lösung der KGG durch lineare Superposition:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \int d^3k \left(N_+(\mathbf{k}) e^{-i(+E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} + N_-(\mathbf{k}) e^{-i(-E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \right) = \\ &= \int d^3k \left(N_+(\mathbf{k}) e^{-i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} + N_-(\mathbf{-k}) e^{+i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \right) = \dots \end{aligned} \quad (192)$$

mit $E(\mathbf{k}) \equiv \sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$. Die Definition/Konvention

$$N_+(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} a(\mathbf{k}) \quad , \quad N_-(\mathbf{-k}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} b^*(\mathbf{k}) \quad (193)$$

führt auf

$$\phi(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} \left(a(\mathbf{k}) e^{-ikx} + b^*(\mathbf{k}) e^{+ikx} \right) \quad (194)$$

(hier $k^\mu \equiv (E(\mathbf{k}), \mathbf{k})$).

- Reelles ϕ : $b(\mathbf{k}) = a(\mathbf{k})$.
- Komplexes ϕ : $a(\mathbf{k})$ und $b(\mathbf{k})$ unabhängig.
- Die Lösung der KGG ist von eher geringer Bedeutung für die relativistische QM, sehr wichtig aber in der Quantenfeldtheorie (die KGG ist dann eine klassische Feldgleichung, die massive Spin-0-Teilchen beschreibt, analog z.B. zu den Maxwell-Gleichungen, die Photonen beschreiben).

- Es existiert eine Kontinuitätsgleichung $\partial_t \rho + \nabla \mathbf{j} = 0$ bzw. $\partial_\mu j^\mu = 0$ mit

$$j^\mu \equiv (\rho, \mathbf{j}) \quad , \quad \rho \equiv +i(\phi^*(\partial_t \phi) - (\partial_t \phi^*)\phi) \quad , \quad \mathbf{j} \equiv -i(\phi^*(\nabla \phi) - (\nabla \phi^*)\phi). \quad (195)$$

- Beweis:

$$\begin{aligned} \left(\square + m^2\right)\phi &= 0 \\ \rightarrow \left(\square + m^2\right)\phi^* &= 0 \\ 0 &= \phi^* \left(\square + m^2\right)\phi - \phi \left(\square + m^2\right)\phi^* = \phi^* \square \phi - \phi \square \phi^* = \\ &= \partial_\mu \left(\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^* \right) = -i \partial_\mu j^\mu. \end{aligned} \quad (196)$$

- \mathbf{j} hat die gleiche Form, wie die nicht-relativistische Wahrscheinlichkeitsstromdichte (58).
- Die Interpretation von ρ als Wahrscheinlichkeitsdichte scheidet allerdings aus, da ρ negativ sein kann (ϕ muss lediglich die KGG erfüllen, eine Differentialgleichung 2. Ordnung; dies erlaubt die beliebige Vorgabe von ABs $\phi(\mathbf{x}, t = t_i)$ und $\dot{\phi}(\mathbf{x}, t = t_i)$, z.B. so, dass ρ negativ ist) ...? (2. Problem der KGG)

***** 01. Juni 2023 (15. Vorlesung) *****

- Zusammenfassung: Die KGG führt zu Problemen,
 - (1) negative Energien,
 - (2) keine Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion (Ursache: die KGG ist eine DGl 2. Ordnung),
 - (3) Teilchenerzeugung/-vernichtung ist außerdem nicht beschreibbar (ein z.B. bei Teilchenbeschleunigern beobachtetes Phänomen, wenn Teilchen mit relativistischen Geschwindigkeiten kollidieren).
- Ausblick: ϕ beschreibt nicht die Wellenfunktion eines einzelnen Teilchens sondern im Rahmen der Quantenfeldtheorie ein Feld, dessen Anregungsquanten massiven Spin-0-Teilchen entsprechen (z.B. das Higgs-Boson). ρ ist dabei nicht die Wahrscheinlichkeitsdichte, sondern die elektrische Ladungsdichte.

4.3 Dirac-Gleichung

- Ziel: Aufstellen einer relativistischen Version der SG, die eine DGl 1. Ordnung ist (mit der Hoffnung, zumindest das Problem mit der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion zu lösen), also

$$i\partial_t\psi(x) = H\psi(x), \quad (197)$$

wobei H linear in den räumlichen Ableitungen ∂_j ist.

- Ansatz:

$$i\partial_0\psi(x) = \left(\sum_j \alpha_j(-i\partial_j) + \beta m \right) \psi(x). \quad (198)$$

- Bestimmung der Koeffizienten α_j, β :

- Ableiten mit $i\partial_0$ und Einsetzen von (198):

$$\begin{aligned} -\partial_0^2\psi(x) &= \left(\sum_j \alpha_j(-i\partial_j) + \beta m \right) i\partial_0\psi(x) = \\ &= \left(\sum_j \alpha_j(-i\partial_j) + \beta m \right) \left(\sum_k \alpha_k(-i\partial_k) + \beta m \right) \psi(x) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(-\sum_j \alpha_j^2 \partial_j^2 + \beta^2 m^2 \right) \psi(x) \\
&\quad - \left(\frac{1}{2} \sum_{j \neq k} (\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j) \partial_j \partial_k + im \sum_j (\alpha_j \beta + \beta \alpha_j) \partial_j \right) \psi(x). \tag{199}
\end{aligned}$$

– Das Korrespondenzprinzip $i\partial_0 \rightarrow \hat{p}^0$ und $-i\partial_j \rightarrow \hat{p}^j$ führt auf

$$\begin{aligned}
(\hat{p}^0)^2 |\psi\rangle &= \left(\sum_j \alpha_j^2 (\hat{p}^j)^2 + \beta^2 m^2 \right) |\psi\rangle \\
&\quad + \left(\frac{1}{2} \sum_{j \neq k} (\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j) \hat{p}^j \hat{p}^k + m \sum_j (\alpha_j \beta + \beta \alpha_j) \hat{p}^j \right) |\psi\rangle, \tag{200}
\end{aligned}$$

was der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung entsprechen sollte. Es folgen die Bedingungen

$$\alpha_j^2 = \beta^2 = 1 \quad , \quad \alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 0 \quad \text{für } j \neq k \quad , \quad \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0. \tag{201}$$

Diese können nicht von vertauschbaren “Zahlen” α_j und β erfüllt werden. Verwende daher Matrizen α_j und β .

– Zusätzliche Bedingung: \hat{H} soll hermitesch sein, also $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$. Dies erfordert $\alpha_j = \alpha_j^\dagger$ und $\beta = \beta^\dagger$.

– Weitere Eigenschaften:

* Aufgrund von $\alpha_j^2 = \beta^2 = 1$ und $\alpha_j = \alpha_j^\dagger$, $\beta = \beta^\dagger$ sind die Eigenwerte von α_j , β ± 1 .

* $\text{Tr}(\alpha_j) = \text{Tr}(\alpha_j \beta^2) = \text{Tr}(\underbrace{\beta \alpha_j}_= -\alpha_j \beta \beta) = -\text{Tr}(\alpha_j)$, also $\text{Tr}(\alpha_j) = 0$.

* Analog $\text{Tr}(\beta) = 0$.

* Tr = Summe der Eigenwerte, daher ist eine gerade Dimension für α_j und β erforderlich.

– Mit 2×2 -Matrizen sind die obigen Bedingungen nicht zu erfüllen, aber mit 4×4 -Matrizen:

$$\alpha_j \equiv \begin{pmatrix} 0 & +\sigma_j \\ +\sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \beta \equiv \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{202}$$

mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{203}$$

Die Wahl (202) für α_j und β (“Standarddarstellung” oder “Dirac-Darstellung”) ist nicht eindeutig.

- Gleichung (198) mit den Matrizen (202) wird als **Dirac-Gleichung** (DG) bezeichnet. ψ hat vier Komponenten, ist aber kein Vierervektor, sondern ein “(Dirac-)Spinor” (anderes spezielles Transformationsverhalten unter LTs).

- Kovariante Form der DG:

– Definition:

$$\gamma^0 \equiv \beta \quad , \quad \gamma^j \equiv \beta \alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & +\sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}. \quad (204)$$

– Eigenschaften der γ -Matrizen:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu} \quad , \quad \gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger \quad , \quad \gamma^j = -(\gamma^j)^\dagger. \quad (205)$$

– Multiplikation von (198) mit β führt auf

$$i\beta\partial_0\psi(x) = \left(\sum_j \beta\alpha_j(-i\partial_j) + m \right) \psi(x) \quad (206)$$

bzw.

$$\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m \right) \psi(x) = 0 \quad (207)$$

(die γ -Matrizen Verändern sich nicht bei LT, auch wenn sie Viererindizes tragen; mehr dazu in Abschnitt 4.3.4).

• Lösung der DG:

– “Die DG enthält die KGG”, d.h. ein Spinor ψ , der die DG erfüllt, muss auch die KGG erfüllen (die DG wurde so konstruiert; siehe (199) und (201)).

– Benutze daher den Ansatz

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{k}) \\ \chi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} e^{\mp i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \quad , \quad E(\mathbf{k}) = \sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2} \quad (208)$$

(für das Vorzeichen $e^{+i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})}$ entspricht ein positives $E(\mathbf{k})$ dem Betrag der negativen Energie und \mathbf{k} entspricht dem negativen Impuls, d.h. für den Impuls gilt $\mathbf{p} = -\mathbf{k}$ [Korrespondenzprinzip]).

– Einsetzen des Ansatzes in die DG (207):

$$(E(\mathbf{k}) \mp m)\varphi(\mathbf{k}) - \vec{\sigma}\mathbf{k}\chi(\mathbf{k}) = 0 \quad (209)$$

$$(E(\mathbf{k}) \pm m)\chi(\mathbf{k}) - \vec{\sigma}\mathbf{k}\varphi(\mathbf{k}) = 0. \quad (210)$$

– Oberes Vorzeichen, $\psi \propto e^{-i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})}$, d.h. positive Energie:

* Umstellen von (210):

$$\chi(\mathbf{k}) = \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k}) + m} \varphi(\mathbf{k}). \quad (211)$$

* Einsetzen in (209):

$$\underbrace{\left(E(\mathbf{k}) - m - \frac{(\vec{\sigma}\mathbf{k})^2}{E(\mathbf{k}) + m} \right)}_{=0} \varphi(\mathbf{k}) = 0, \quad (212)$$

wobei $(\vec{\sigma}\mathbf{k})^2 = \mathbf{k}^2 = E(\mathbf{k})^2 - m^2 = (E(\mathbf{k}) + m)(E(\mathbf{k}) - m)$ verwendet wurde, d.h. jedes beliebige φ ist möglich, also existieren zwei linear unabhängige Lösungen $\varphi_1 = N(1, 0)$ und $\varphi_2 = N(0, 1)$ (Hinweis auf “Spin Up” und “Spin Down”; mehr dazu in Abschnitt 4.3.2).

* Spinoren positiver Energie:

$$\psi_{1,2}^+(x) = u_{1,2}(\mathbf{k})e^{-i(E(\mathbf{k})t-\mathbf{k}\mathbf{x})} \quad (213)$$

$$u_1(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{k}) \\ \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\varphi_1(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{+k^3}{E(\mathbf{k})+m} \\ \frac{+k^1+ik^2}{E(\mathbf{k})+m} \end{pmatrix} \quad (214)$$

$$u_2(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \varphi_2(\mathbf{k}) \\ \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\varphi_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{+k^1-ik^2}{E(\mathbf{k})+m} \\ \frac{-k^3}{E(\mathbf{k})+m} \end{pmatrix}. \quad (215)$$

– Unteres Vorzeichen, $\psi \propto e^{+i(E(\mathbf{k})t-\mathbf{k}\mathbf{x})}$, d.h. negative Energie:

* Umstellen von (209):

$$\varphi(\mathbf{k}) = \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\chi(\mathbf{k}). \quad (216)$$

* Einsetzen in (210):

$$\underbrace{\left(E(\mathbf{k}) - m - \frac{(\vec{\sigma}\mathbf{k})^2}{E(\mathbf{k})+m}\right)}_{=0}\chi(\mathbf{k}) = 0, \quad (217)$$

d.h. jedes beliebige χ ist möglich, also existieren zwei linear unabhängige Lösungen $\chi_1 = N(0, 1)$ und $\chi_2 = N(1, 0)$.

* Spinoren negativer Energie:

$$\psi_{1,2}^-(x) = v_{1,2}(\mathbf{k})e^{+i(E(\mathbf{k})t-\mathbf{k}\mathbf{x})} \quad (218)$$

$$v_1(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\chi_1(\mathbf{k}) \\ \chi_1(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \frac{+k^1-ik^2}{E(\mathbf{k})+m} \\ \frac{-k^3}{E(\mathbf{k})+m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (219)$$

$$v_2(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\chi_2(\mathbf{k}) \\ \chi_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \frac{+k^3}{E(\mathbf{k})+m} \\ \frac{+k^1+ik^2}{E(\mathbf{k})+m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (220)$$

– Normierung $N = \sqrt{E(\mathbf{k})+m}$ (eine Konvention); damit $u_r^\dagger(\mathbf{k})u_s(\mathbf{k}) = 2E(\mathbf{k})\delta_{rs}$ und $v_r^\dagger(\mathbf{k})v_s(\mathbf{k}) = 2E(\mathbf{k})\delta_{rs}$.

– Für kleine Impulse $|\mathbf{k}| \ll E(\mathbf{k})$ (nicht- bzw. schwach relativistischer Bereich) dominieren für positive Energien die oberen beiden Komponenten, für negative Energien die unteren beiden Komponenten.

– Allgemeine Lösung der DG durch lineare Superposition:

$$\psi(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} \sum_{r=1,2} \left(b_r(\mathbf{k})u_r(\mathbf{k})e^{-ikx} + d_r^*(\mathbf{k})v_r(\mathbf{k})e^{+ikx} \right) \quad (221)$$

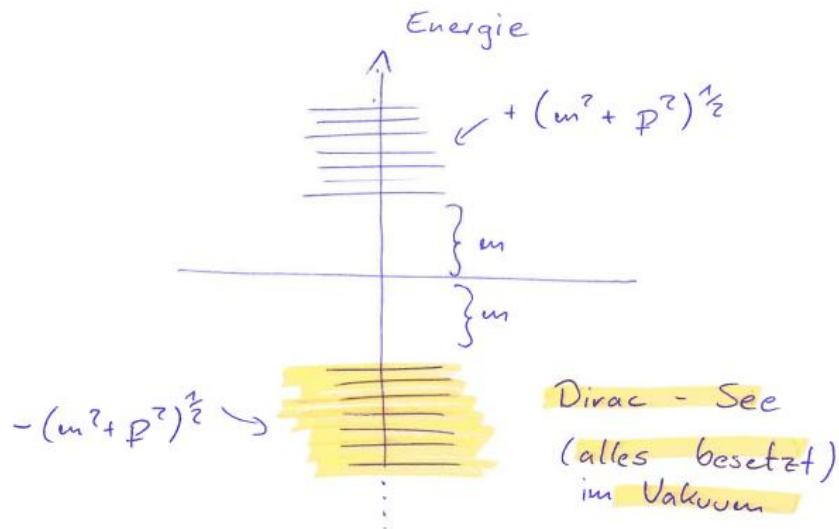
(hier $k^\mu \equiv (E(\mathbf{k}), \mathbf{k})$).

- Es existiert eine Kontinuitätsgleichung $\partial_t \rho + \nabla \mathbf{j} = 0$ bzw. $\partial_\mu j^\mu = 0$ mit $j^\mu = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$ mit $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0$ (adjungierter Spinor). Da $\rho = j^0 = \psi^\dagger \psi \geq 0$ ist Interpretation von ρ als Wahrscheinlichkeitsdichte denkbar, d.h. die DG ist diesbezüglich der KG überlegen.
- Ausblick: ψ beschreibt nicht die Wellenfunktion eines einzelnen Teilchens sondern im Rahmen der Quantenfeldtheorie ein Feld, dessen Anregungsquanten massiven Spin-1/2-Teilchen entsprechen (z.B. Elektronen, Quarks).

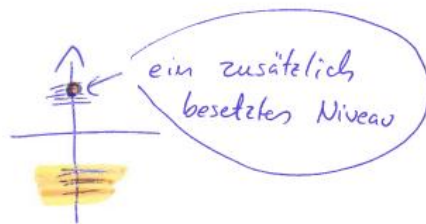
4.3.1 Lösungen mit negativer Energie

- Teilchen mit beliebig großen negativen Energien $-E(\mathbf{k}) = -\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ können nicht existieren (Energiegewinn durch “Abrutschen” zu immer negativeren Energien).
- Ignorieren/Wegwerfen der Lösungen mit negativer Energie? ... Fragwürdig, schlechte Theorie.
- Ausweg: **Dirac-See**.
 - Pauli-Prinzip: Zwei gleichartige Fermionen (z.B. Elektronen) können nicht im gleichen Zustand sein.
 - Vakuum: Alle negativen Energieniveaus sind besetzt, alle positiven unbesetzt.
 - Einzelnes Elektron mit Impuls \mathbf{k} :
Das Energieniveau $+E(\mathbf{k}) = +\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ ist zusätzlich besetzt.
 - Einzelnes Positron mit Impuls \mathbf{k} :
Das Energieniveau $-E(\mathbf{k}) = -\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ ist nicht besetzt (ein “Loch” im Dirac-See erhöht die Gesamtenergie, hat also positive Energie; die Ladung des Lochs hat das entgegengesetzte Vorzeichen der Ladung eines Elektrons; ein Loch beschreibt also ein Antiteilchen).
 - Elektron-Positron-Paarerzeugung: Ein Elektron mit negativer Energie wird auf ein positives Energieniveau gehoben (dafür minimal notwendige Energie: $2m$).
 - Der Dirac-See erklärt die Existenz von Antiteilchen.
 - Diese Betrachtungsweise ist z.B. in der Festkörpertheorie erfolgreich, scheitert jedoch für Bosonen.

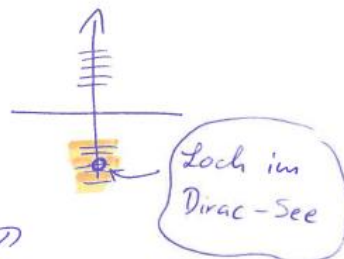
Bild -010



Teilchen



Antiteilchen



In beiden Fällen positive Energie, aber umgekehrte Ladung.

4.3.2 Spin

- Die DG beschreibt ein freies Teilchen, also ein rotationsinvariantes System.
→ Der Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} (Summe von Bahndrehimpuls und Spin) ist eine Erhaltungsgröße.
- Die Verwendung der Pauli-Matrizen als Bausteine der γ -Matrizen und die Existenz von jeweils zwei Lösungen mit gleichem Impuls sowohl für Teilchen als auch für Antiteilchen legt nahe, dass die DG Teilchen mit Spin 1/2 beschreibt.

- Erwartung: Der Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ ist keine Erhaltungsgröße,

$$[\mathbf{L}, H] = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}, \vec{\alpha}\mathbf{p} + \beta m] = [\mathbf{r}, \vec{\alpha}\mathbf{p}] \times \mathbf{p} = i\vec{\alpha} \times \mathbf{p}, \quad (222)$$

Die Erwartung ist damit bestätigt.

- Gesucht: Ein Spinoperator \mathbf{S} , der

$$[\mathbf{J}, H] = 0, \quad \mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (223)$$

erfüllt.

- Drehimpuls- und Spinoperatoren erfüllen die Drehimpulsalgebra, z.B. $[S_j, S_k] = i\epsilon_{jkl}S_l$. Die Drehimpulsalgebra wird von den Pauli-Matrizen erfüllt, $[\sigma_j/2, \sigma_k/2] = i\epsilon_{jkl}\sigma_l/2$.

- Versuch:

$$\mathbf{S} \equiv \frac{1}{2}\vec{\Sigma}, \quad \vec{\Sigma} \equiv \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3\vec{\alpha} = -i\gamma^1\gamma^2\gamma^3\vec{\gamma}. \quad (224)$$

***** 13. Juni 2023 (17. Vorlesung) *****

- Es folgt

$$[S_j, H] = \frac{1}{2}[\Sigma_j, \vec{\alpha}\mathbf{p} + \beta m] = \frac{1}{2}[\Sigma_j, \alpha_k]p^k = i\epsilon_{jkl}p^k\alpha_l = -i(\vec{\alpha} \times \mathbf{p})_j, \quad (225)$$

wobei $[\Sigma_j, \alpha_k] = 2i\epsilon_{jkl}\alpha_l$ und $[\Sigma_j, \beta] = 0$ verwendet wurde. (223) ist damit erfüllt, \mathbf{S} scheint also der Spinoperator zu sein.

- Die Eigenwerte s_j von S_j sind $\pm 1/2$ (die Eigenwerte der Pauli-Matrizen sind ± 1). Die Eigenwerte $s(s+1)$ von

$$\mathbf{S}^2 = \frac{1}{4}\vec{\Sigma}^2 = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (226)$$

sind $3/4$. Es folgt $s = 1/2$. Die DG beschreibt also Fermionen mit Spin $1/2$.

- Spineinstellungen der Lösungen der DG:

- (225) zeigt, dass nur die Spinkomponente parallel zum Impuls erhalten ist. Wähle daher o.B.d.A. $\mathbf{p} = (0, 0, p^3)$ und betrachte S_3 .
- Teilchen (siehe (213)):

$$S_3\psi_1^+(x) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{+k^3}{E(\mathbf{k})+m} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i(E(\mathbf{k})t-\mathbf{k}\mathbf{x})} = +\frac{1}{2}\psi_1^+(x) \quad (227)$$

$$S_3\psi_2^+(x) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-k^3}{E(\mathbf{k})+m} \end{pmatrix} e^{-i(E(\mathbf{k})t-\mathbf{k}\mathbf{x})} = -\frac{1}{2}\psi_2^+(x). \quad (228)$$

– Antiteilchen (siehe (218)) analog,

$$S_3\psi_1^-(x) = -\frac{1}{2}\psi_1^-(x) \quad , \quad S_3\psi_2^-(x) = +\frac{1}{2}\psi_2^-(x). \quad (229)$$

4.3.3 Lorentz-Kovarianz der DG, Transformationsverhalten von Spinoren

- Als relativistische Gleichung muss die DG invariant unter LTs sein, d.h. in jedem Inertialsystem gleich aussehen. Die Gleichungen

$$\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m\right)\psi = 0 \quad , \quad \left(i\gamma^\mu\partial'_\mu - m\right)\psi' = 0 \quad (230)$$

müssen also die gleiche Information beinhalten, d.h. durch LTs (und eventuell einige weitere mathematische Umformungen) ineinander überführbar sein. Dies legt das Transformationsverhalten von Spinoren unter LTs fest.

- Spinoren müssen aufgrund der Linearität der DG linear transformieren, d.h. $\psi \rightarrow \psi' \equiv S(\Lambda)\psi$.
- Gesucht: Eine im Spin-Raum wirkende 4×4 -Matrix $S(\Lambda)$.

– Aus $x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ folgt $\partial_\mu = (\partial x'^\nu / \partial x^\mu)\partial'_\nu = \Lambda^\nu{}_\mu\partial'_\nu$.

– Rechte Gleichung in (230):

$$0 = \left(i\gamma^\nu\partial'_\nu - m\right)\psi' = \left(i\gamma^\nu\partial'_\nu - m\right)S(\Lambda)\psi. \quad (231)$$

– Linke Gleichung in (230):

$$0 = \left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m\right)\psi = \left(i\gamma^\mu\Lambda^\nu{}_\mu\partial'_\nu - m\right)\psi. \quad (232)$$

Multipliziere diese Gleichung mit $S(\Lambda)$, um mit der “rechten Gleichung” (231) vergleichen zu können,

$$\begin{aligned} 0 &= S(\Lambda)\left(i\gamma^\mu\Lambda^\nu{}_\mu\partial'_\nu - m\right)S^{-1}(\Lambda)S(\Lambda)\psi(x) = \\ &= \left(iS(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu\partial'_\nu - m\right)S(\Lambda)\psi(x). \end{aligned} \quad (233)$$

– Der Vergleich von (231) und (233) ergibt die Bestimmungsgleichung für $S(\Lambda)$,

$$\gamma^\nu = S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu. \quad (234)$$

– Für infinitesimale LTs, $\Lambda^\mu{}_\nu = \eta^\mu{}_\nu + \epsilon^\mu{}_\nu$ mit $\epsilon^{\mu\nu} = -\epsilon^{\nu\mu}$, ergibt sich

$$S(\Lambda) = 1 - \frac{i}{4}\epsilon^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu} \quad , \quad \sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]. \quad (235)$$

– Endliche LTs können aus infinitesimalen zusammengesetzt werden,

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{i}{4}\epsilon^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right) \quad (236)$$

$$(\lim_{N \rightarrow \infty} (1 + x/N)^N = e^x).$$

4.3.4 Bilineare Kovarianten

- Man kann zeigen: $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ transformiert unter LTs wie ein Vierervektor.
- Dies erklärt die Verwendung eines Viererindex μ an konstanten 4×4 -Matrizen γ^μ .
- Beweis in Hausaufgabe.

***** 15. Juni 2023 (18. Vorlesung) *****

4.3.5 Relativistisches Fermion im elektromagnetischen Feld

- Ziel: Beschreibung eines relativistischen Fermions (Spin 1/2) im elektromagnetischen (em) Feld, d.h. Formulierung der DG in Anwesenheit eines em Felds.
- Elektrodynamik: Hamilton-Funktion eines nicht-relativistischen Teilchens im em Feld:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \quad (237)$$

mit dem Viererpotential $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$.

- Die Kopplung an das em Feld erfolgt also durch die Ersetzung $H \rightarrow H - e\phi$ und $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}$ bzw. in relativistischer Schreibweise $p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu$.
- Die SG eines nicht-relativistischen Teilchens im em Feld erhält man wie gewohnt über das Korrespondenzprinzip, $H \rightarrow +i\partial_t$, $\mathbf{p} \rightarrow -i\nabla$:

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{1}{2m} \left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (238)$$

- Analoges Vorgehen, um die DG in Anwesenheit eines em Felds zu erhalten, $i\partial^\mu \rightarrow i\partial^\mu - eA^\mu$:

$$\left(i\gamma^\mu \left(\partial_\mu + ieA_\mu(x) \right) - m \right) \psi(x) = 0 \quad (239)$$

bzw.

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\sum_j \alpha_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) + \beta m + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (240)$$

- Das Lösen dieser Gleichung für das Coulomb-Potential $A^\mu = (-Ze/r, 0, 0, 0)$ liefert für $Z = 1$ die relativistischen Korrekturen für das Wasserstoffatom ("Feinstruktur"). Eine detaillierte Rechnung findet sich z.B. in F. Schwabl, "Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)", Springer, Abschnitt 8.2.

4.3.6 Nicht-relativistischer Grenzfall eines Fermions im elektromagnetischen Feld, Pauli-Gleichung, gyromagnetischer Faktor des Elektrons

- Studiere den nicht-relativistischen Grenzfall der DG in Anwesenheit eines em Felds, Gleichung (239) bzw. (240). Dies muss die SG mit em Feld ergeben, Gleichung (238), die zusätzlich den Spin des Teilchens enthält.
- Betrachte im Folgenden ausschließlich Lösungen mit positiver Energie, d.h. Teilchen (die Behandlung von Antiteilchen verläuft analog).
- Splitte die DG (240) in zwei obere und zwei untere Gleichungen auf, $\psi(x) = (\varphi(x), \chi(x))$ (wie beim freien relativistischen Fermion sind auch hier zwei große und zwei vernachlässigbare Spinkomponenten zu erwarten):

$$i\partial_t\varphi(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \chi(\mathbf{r}, t) + m\varphi(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t)\varphi(\mathbf{r}, t) \quad (241)$$

$$i\partial_t\chi(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \varphi(\mathbf{r}, t) - m\chi(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t)\chi(\mathbf{r}, t). \quad (242)$$

- Im nicht-relativistischen Grenzfall ist m (bzw. mc^2) die größte im System vorhandene Energie. Die Lösung wird sich für schwaches em Feld außerdem ähnlich zur Lösung der freien DG mit positiver Energie verhalten, $\psi \propto e^{-i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{r})}$. Spalte daher den stark oszillierenden Anteil der Lösung ab, $\psi(x) = (\varphi(x), \chi(x)) \equiv e^{-imt}(\tilde{\varphi}(x), \tilde{\chi}(x))$,

$$i\partial_t\tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t)\tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \quad (243)$$

$$i\partial_t\tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) - 2m\tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t)\tilde{\chi}(\mathbf{r}, t). \quad (244)$$

- Da m die größte im System vorhandene Energie ist, kann in (244) $i\partial_t\tilde{\chi}$ und $e\phi\tilde{\chi}$ gegenüber $2m\tilde{\chi}$ vernachlässigt werden,

$$\tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \quad (245)$$

(ob das Vernachlässigen der beiden Terme tatsächlich gerechtfertigt ist, kann am Ende einer Rechnung sicherheitshalber geprüft werden).

- Einsetzen von (245) in (243) und Umbenennen $\tilde{\varphi} \rightarrow \psi = (\psi_1, \psi_2)$:

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) &= \left(\frac{1}{2m} \left(\sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= \left(\frac{1}{2m} \left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \frac{e}{2m} \vec{\sigma}\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (246)$$

wobei

$$\left(\sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \right)^2 = \left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - e\vec{\sigma}\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (247)$$

(Nachrechnen ist Hausaufgabe) und $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ verwendet wurde.

- (246) wird als **Pauli-Gleichung** bezeichnet (die SG mit em Feld, die zusätzlich Spin enthält).
- Betrachte nun ein räumlich und zeitlich konstantes magnetisches Feld, $\mathbf{B} = \text{const}$ bzw. $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$.
- Verwende den Spinoperator $\mathbf{S} \equiv \vec{\sigma}/2$ (die Definition mit dem Faktor 1/2 ist nicht willkürlich, nur $\mathbf{S} \equiv \vec{\sigma}/2$ erfüllt die Drehimpulsalgebra $[S_j, S_k] = i\epsilon_{jkl}S_l$, nicht z.B. $\mathbf{S} \equiv \vec{\sigma}$).
- Nebenrechnung:

$$\left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 = \left(-i\nabla - \frac{e}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 = \mathbf{p}^2 - e\mathbf{L}\mathbf{B} + e^2(\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \quad (248)$$

mit $\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ und $\mathbf{p} \equiv -i\nabla$ (Nachrechnen ist Hausaufgabe).

- Damit wird (246) zu

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\mathbf{B} + \frac{e^2}{2m}(\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \right)\psi(\mathbf{r}, t). \quad (249)$$

- Der Spin koppelt doppelt so stark an ein magnetisches Feld, wie von einem Bahndrehimpuls erwartet (die Interpretation des Spins eines elementaren Fermions, z.B. eines Elektrons, als Eigendrehimpuls ist somit fragwürdig).

– Magnetisches Moment:

$$\vec{\mu} \equiv \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) \quad (250)$$

mit

$$\vec{\mu}_{\text{Bahn}} \equiv \frac{e}{2m}\mathbf{L} \quad , \quad \vec{\mu}_{\text{Spin}} \equiv \frac{e}{2m}g\mathbf{S}, \quad (251)$$

wobei g der gyromagnetische Faktor ist.

- Für Elektronen (elementare Fermionen) misst man $g = 2.002\dots$ (Abweichung von $g = 2$ aufgrund der Quantenelektrodynamik). Dies kommt automatisch aus der DG heraus. Die DG erklärt also den gyromagnetischen Faktor des Elektrons.

5 Ausgewählte Grundlagen und Anwendungen der Gruppentheorie und von Symmetrien in der Quantenmechanik

- Die Vorgabe von Symmetrien (z.B. Translations-Invarianz, Rotations-Invarianz, Lorentz-Invarianz, Supersymmetrie, ...) schränkt mögliche Theorien bzw. Naturgesetze stark ein.
- Symmetrieeoperationen können i.d.R. durch Gruppen beschrieben werden.
- Symmetrieüberlegungen und Gruppentheorie sind daher wesentliche Werkzeuge in der Physik und auch in der QM.

5.1 Gruppen

- **Gruppe:** *“Eine Menge von Elementen G zusammen mit einer Verknüpfung \circ , die je zwei Elementen aus G ein drittes Element aus G zuordnet und dabei drei Bedingungen, die Gruppenaxiome, erfüllt: das Assoziativgesetz, die Existenz eines neutralen Elements und die Existenz von inversen Elementen.”* (Wikipedia)
 - Assoziativgesetz: $a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c$ für alle $a, b, c \in G$.
 - Es gibt ein neutrales Element $e \in G$, mit dem für alle $a \in G$ die Beziehung $a \circ e = e \circ a = a$ erfüllt ist.
 - Zu jedem $a \in G$ existiert ein $a^{-1} \in G$, mit dem $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e$ erfüllt ist.

***** 20. Juni 2023 (19. Vorlesung) *****

- **Abelsche Gruppe:** Eine Gruppe für die zusätzlich das Kommutativgesetz erfüllt ist.
 - Kommutativgesetz: $a \circ b = b \circ a$ für alle $a, b \in G$.
- Beispiele für Gruppen:
 - Ganze Zahlen mit der Verknüpfung “Addition” (Abelsche Gruppe).
 - Rotationsmatrizen in 2 Dimensionen mit der Verknüpfung “Matrixmultiplikation” (Abelsche Gruppe).
 - Rotationsmatrizen in 3 Dimensionen mit der Verknüpfung “Matrixmultiplikation” (nicht-Abelsche Gruppe).
- Symmetrien bzw. Symmetrieeoperationen lassen sich i.d.R. durch Gruppen beschreiben, z.B. Rotationssymmetrie durch die eben genannten Gruppen der Rotationen in 2 oder 3 Dimensionen.

5.2 Lie-Gruppen

- *“Eine Lie-Gruppe ... ist eine mathematische Struktur, die zur Beschreibung von kontinuierlichen Symmetrien verwendet wird. Lie-Gruppen sind in fast allen Teilen der heutigen Mathematik sowie in der theoretischen Physik, vor allem der Teilchenphysik, wichtige Werkzeuge.”* (Wikipedia)

- *“Eine Lie-Gruppe ist eine glatte reelle Mannigfaltigkeit, die zusätzlich die Struktur einer Gruppe besitzt, so dass die Gruppenverknüpfung und die Inversion beliebig oft differenzierbar sind. Die Dimension der Lie-Gruppe ist die Dimension der unterliegenden Mannigfaltigkeit. Ist diese endlich, so ist die unterliegende Mannigfaltigkeit automatisch analytisch und die Gruppenmultiplikation und Inversion sind analytische Funktionen.”* (Wikipedia)
- Für uns bzw. im Rahmen dieser Vorlesung ist eine Lie-Gruppe eine Beschreibung kontinuierlicher Transformationen (z.B. Rotationen, Boosts, Translationen, etc.), d.h. Transformationen die durch kontinuierliche Parameter charakterisiert werden. Ziel ist weniger eine strenge Definition oder ein abstrakter und möglichst allgemeiner Formalismus, stattdessen geht es eher um Verständnis anhand von Beispielen.

5.2.1 Beispiel: Gruppe der Rotationen in 3 Dimensionen

- Rotationsmatrizen in 3 Dimensionen sind 3×3 -Matrizen mit $R^T R = 1$ und $\det(R) = 1$.
 - Diese Matrizen bilden die Gruppe $SO(3)$ (“O” für orthogonal, d.h. $R^T R = 1$; “S” für speziell, d.h. $\det(R) = 1$).
 - $R^T R = 1$ entspricht $(R^T)_{jk} R_{kl} = R_{kj} R_{kl} = \delta_{jl}$ (6 Bedingungen).
 - $\det(R) = \pm 1$ ist damit erfüllt (kann man zeigen).
 - $\det(R) = 1$ stellt keine Bedingung dar, die die Anzahl der Parameter zusätzlich reduziert, sondern schließt lediglich Spiegelungen aus (die Anzahl der Gruppenelemente wird halbiert).

→ Rotationsmatrizen in 3 Dimensionen bzw. $SO(3)$ -Matrizen werden durch 3 kontinuierliche Parameter beschrieben (9 Matrixeinträge, 6 Bedingungen).

- Rotationsmatrizen um die x -, die y - und die z -Achse:

$$R_x(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & +\cos(\alpha) & +\sin(\alpha) \\ 0 & -\sin(\alpha) & +\cos(\alpha) \end{pmatrix} \quad (252)$$

$$R_y(\alpha) = \begin{pmatrix} +\cos(\alpha) & 0 & -\sin(\alpha) \\ 0 & 1 & 0 \\ +\sin(\alpha) & 0 & +\cos(\alpha) \end{pmatrix} \quad (253)$$

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} +\cos(\alpha) & +\sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & +\cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (254)$$

- Infinitesimale Rotationsmatrizen um x -, die y - und die z -Achse, d.h. infinitesimale Drehwinkel Winkel α :

$$R_x(\alpha) = 1 + i\alpha J_x \quad , \quad J_x \equiv -i \frac{dR_x(\alpha)}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (255)$$

$$R_y(\alpha) = 1 + i\alpha J_y \quad , \quad J_y \equiv -i \frac{dR_y(\alpha)}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (256)$$

$$R_z(\alpha) = 1 + i\alpha J_z \quad , \quad J_z \equiv -i \frac{dR_z(\alpha)}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} = -i \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (257)$$

- J_x, J_y und J_z nennt man **Erzeugende** (Englisch: **Generators**).
- J_x, J_y und J_z sind linear unabhängig. Daher bilden infinitesimale Drehwinkel um die Koordinatenachsen eine geeignete Wahl der 3 Parameter, die infinitesimale SO(3)-Matrizen beschreiben.
- Die Wahl der 3 Parameter und der zugehörigen Erzeugenden ist nicht eindeutig.

- Interessant ist vor allem: “Kann man zwei Rotationen vertauschen? Bzw. was passiert, wenn man zwei Rotationen in umgekehrter Reihenfolge ausführt?”

- Antworten auf diese Fragen charakterisieren die Struktur der Lie-Gruppe SO(3).
- Z.B.

$$\begin{aligned} R_x(\alpha)R_y(\alpha) - R_y(\alpha)R_x(\alpha) &= \alpha^2 (J_x J_y - J_y J_x) + \mathcal{O}(\alpha^3) = \\ &= \alpha^2 [J_x, J_y] + \mathcal{O}(\alpha^3), \end{aligned} \quad (258)$$

d.h. die Kommutatoren der Erzeugenden beschreiben die Struktur einer Lie-Gruppe.

- Man kann sich leicht von der Eigenschaft

$$[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl} J_l \quad (259)$$

überzeugen, d.h. die Erzeugenden der SO(3)-Matrizen erfüllen die Drehimpulsalgebra.

- Anschaulich: Rotiert man einen Vektor zunächst um einen kleinen Winkel α um die x -Achse, dann um α um die y -Achse ... und den gleichen Vektor zunächst um α um die y -Achse, dann um α um die x -Achse ... dann entspricht die Differenz beider Ergebnisse dem Effekt einer Rotation um den winzigen Winkel α^2 um z -Achse.

- Nicht-infinitesimale SO(3)-Matrizen können gemäß

$$R(\vec{\alpha}) = e^{+i\alpha_j J_j} \quad (260)$$

geschrieben werden, d.h. durch Drehwinkel $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ um die Koordinatenachsen und Erzeugende ausgedrückt werden.

5.2.2 Beispiel: Gruppe der “komplexen Rotationen” in 2 Dimensionen

- Komplexe Verallgemeinerungen von Rotationsmatrizen in 2 Dimensionen sind komplexe 2×2 -Matrizen mit $R^\dagger R = 1$ und $\det(R) = 1$.

- Diese Matrizen bilden die Gruppe SU(2) (“U” für unitär, d.h. $R^\dagger R = 1$; “S” für speziell, d.h. $\det(R) = 1$).
- $R^\dagger R = 1$ entspricht $(R^\dagger)_{jk} R_{kl} = R_{kj}^* R_{kl} = \delta_{jl}$ (4 Bedingungen).

- Damit ist lediglich $|\det(R)| = 1$ erfüllt (kann man zeigen).
- $\det(R) = 1$ ist also eine Bedingung, die die Anzahl der Parameter zusätzlich um 1 reduziert (anders als bei $SO(3)$ -Matrizen; siehe Abschnitt 5.2.1).

→ $SU(2)$ -Matrizen werden durch 3 kontinuierliche reelle Parameter beschrieben (8 Matrixeinträge, 5 Bedingungen).

- Infinitesimale $SU(2)$ -Matrizen mit linear unabhängigen Erzeugenden:

$$R_x(\alpha) = 1 + i\alpha J_x \quad , \quad J_x \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_x}{2} \quad (261)$$

$$R_y(\alpha) = 1 + i\alpha J_y \quad , \quad J_y \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_y}{2} \quad (262)$$

$$R_z(\alpha) = 1 + i\alpha J_z \quad , \quad J_z \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_z}{2} \quad (263)$$

(Beweis, dass es sich dabei um $SU(2)$ -Matrizen handelt, ist Hausaufgabe).

- Man kann leicht

$$[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl} J_l \quad (264)$$

nachrechnen, d.h. die Erzeugenden der $SU(2)$ -Matrizen erfüllen ebenfalls die Drehimpulsalgebra.

- Nicht-infinitesimale $SU(2)$ -Matrizen können gemäß

$$R(\vec{\alpha}) = e^{+i\alpha_j J_j} \quad (265)$$

geschrieben werden, d.h. analog zu (260) durch Winkel $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ und Erzeugende ausgedrückt werden (die anschauliche bzw. geometrische Bedeutung dieser Winkel ist weniger offensichtlich als für $SO(3)$ -Matrizen).

***** 22. Juni 2023 (20. Vorlesung) *****

5.2.3 Gruppe versus Algebra

- (259) und (264) nennt man **Algebra** oder **Lie-Algebra**.
- Die Gruppen $SO(3)$ und $SU(2)$ haben dieselbe Algebra (Drehimpulsalgebra).
- Die Grundlegende mathematische Struktur und einige wichtige Eigenschaften werden durch die Algebra festgelegt, $SO(3)$ -Matrizen und $SU(2)$ -Matrizen verhalten sich daher sehr ähnlich.
- Eine weitere Darstellung der Drehimpulsalgebra (ein Satz von Erzeugenden, angegeben in Form mathematischer Objekte, die die Drehimpulsalgebra erfüllen) ist

$$J_j \equiv \hat{L}_j \quad , \quad \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (266)$$

- Durch Exponentieren einer Darstellung der Drehimpulsalgebra gemäß $e^{+i\alpha_j J_j}$ erhält man die zugehörige Gruppe. Die Gruppenelemente wirken auf mathematische Objekte die bereits von den Erzeugenden vorgegeben werden, z.B.
 - SO(3)-Matrizen auf 3-komponentige Vektoren,
 - SU(2)-Matrizen auf 2-komponentige Vektoren,
 - $e^{+i\alpha_j \hat{L}_j}$ mit \hat{L}_j gemäß (266) auf Zustände $|\psi\rangle$, bzw. nach Anwenden des Korrespondenzprinzips auf Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r})$.
- Die identische Algebra dieser drei Gruppen garantiert für die Objekte auf die sie wirken ein gemeinsames konsistentes und sinnvolles Transformationsverhalten bezüglich Rotationen:
 - Für SO(3)-Matrizen ist dies offensichtlich (SO(3)-Matrizen beschreiben Rotationen 3-komponentiger Vektoren; die Drehimpulsalgebra wurde durch Analyse von SO(3)-Matrizen gefunden).
 - $e^{+i\alpha_j \hat{L}_j}$, d.h. Exponentieren von Drehimpulsoperatoren:
 - * Die Rotation einer Wellenfunktion kann durch Drehimpulsoperatoren geschrieben werden,

$$R(\vec{\alpha})\left(\psi(\mathbf{r})\right) = e^{+i\alpha_j L_j} \psi(\mathbf{r}) = \psi(R(\vec{\alpha})\mathbf{r}) \quad (267)$$
 mit $L_j = \epsilon_{jkl} r_k (-i\partial_l)$ (kann man zeigen).
 - * Nachweis anhand eines Beispiels, Rotation um die z-Achse:

$$\begin{aligned} R(0, 0, \alpha)\left(\psi(\mathbf{r})\right) &= e^{+i\alpha L_z} \psi(\mathbf{r}) = e^{+i\alpha(-i\partial_\varphi)} \psi(r, \vartheta, \varphi) = \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\alpha^j}{j!} \frac{\partial^j \psi}{\partial \varphi} (r, \vartheta, \varphi) = \psi(r, \vartheta, \varphi + \alpha) = \psi(R(0, 0, \alpha)\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (268)$$
 wobei $L_z = -i\partial_\varphi$ verwendet wurde.
 - SU(2)-Matrizen beschreiben Rotationen 2-komponentiger komplexer Spinoren, z.B. wie sie in der Pauli-Gleichung (246) auftreten.
- Wesentliche Idee und Anwendung in Physik:
 - Die Konstruktion sinnvoller physikalischer Theorien oder Gleichungen erfordert Bausteine (Felder, Wellenfunktionen, Spinoren, ...), die in geeigneter konsistenter Weise transformieren.
 - Wichtige Transformationen sind dabei diejenigen, die den Symmetrien der Theorien entsprechen, typischer Weise LTs und Poincare-Transformationen, Erweiterungen davon (z.B. Supersymmetrie) und interne Symmetrien (z.B. Farb- oder Flavorsymmetrie der QCD).
 - Mehr dazu in Abschnitt 5.4.

5.3 Lorentz- und Poincare-Gruppe

- Wie in Abschnitt 4.1.1 diskutiert, müssen physikalisch sinnvolle Wellen- oder Feldgleichungen invariant unter LTs bzw. Poincare-Transformationen sein.

- LTs $\Lambda^\mu{}_\nu$ (Boosts und Rotationen; siehe Abschnitt 4.1.1) sowie Poincare-Transformationen (LTs und Translationen) bilden eine Gruppe.
- Die Lorentz- und die Poincare-Gruppe sind daher wichtige Gruppen insbesondere in der Elementarteilchenphysik.

5.3.1 Lorentz-Gruppe

- Erzeugende von Rotationen:

- Wurden bereits in Abschnitt 5.2.1 im Zusammenhang mit der Gruppe $SO(3)$ diskutiert:

$$J_x \equiv -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (269)$$

$$J_y \equiv -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (270)$$

$$J_z \equiv -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (271)$$

- Rotationen um einen infinitesimalen Winkel α um die j -Achse: $\Lambda^\mu{}_\nu = 1 + i\alpha J_j$.
- Rotationen um einen endlichen Winkel α um die j -Achse: $\Lambda^\mu{}_\nu = e^{+i\alpha J_j}$.

- Erzeugende von Boosts:

- **Rapidity:**

- * Bisher wurden Boosts durch die Relativgeschwindigkeit v parametrisiert.
- * Zweckmäßiger ist die Verwendung der Rapidity η definiert via $\sinh(\eta) \equiv \gamma\beta = v/\sqrt{1-v^2}$.
- * Es folgt $\cosh(\eta) = \gamma = 1/\sqrt{1-v^2}$.
- * Wesentlicher Vorteil: Zwei hintereinander ausgeführte Boosts entlang einer Achse mit Rapiditäten η_1 und η_2 entsprechen einem Boost mit Rapidity $\eta = \eta_1 + \eta_2$, d.h. Rapiditäten sind additiv (genau wie Winkel bei Rotationen).

- Boost mit Rapidity η in x -Richtung:

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} +\cosh(\eta) & +\sinh(\eta) & 0 & 0 \\ +\sinh(\eta) & +\cosh(\eta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (272)$$

Diese Boost-Matrix weist nach Parametrisierung durch die Rapidity starke Ähnlichkeit zu Rotationsmatrizen auf.

- Aus einem Boost mit infinitesimaler Rapidität η in x -Richtung,

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & +\eta & 0 & 0 \\ +\eta & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (273)$$

ergibt sich wie gehabt via

$$\Lambda^\mu{}_\nu = 1 + i\eta K_x \quad (274)$$

die zugehörige Erzeugende

$$K_x = -i \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (275)$$

- Analog:

$$K_y = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_z = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (276)$$

- Aus den Erzeugenden kann die **Algebra der Lorentz-Gruppe** berechnet werden:

$$[J_j, J_k] = +i\epsilon_{jkl}J_l, \quad [K_j, K_k] = -i\epsilon_{jkl}J_l, \quad [J_j, K_k] = +i\epsilon_{jkl}K_l. \quad (277)$$

- Eine weitere Darstellung der Algebra der Lorentz-Gruppe analog zu (266) bildet

$$J_j \equiv \epsilon_{jkl}x^k(-i\partial_l), \quad K_j \equiv -x^0(-i\partial_j) + x^j(+i\partial_0) \quad (278)$$

(kann man leicht nachrechnen).

5.3.2 Poincare-Gruppe

- Die Translation eines Vierervektors $x^\mu \rightarrow x^\mu + a^\mu$ ist nicht durch eine Multiplikation von x^μ mit einer 4×4 -Matrix darstellbar. Die 4×4 Matrixdarstellung der Lorentz-Gruppe eignet sich daher nicht zu einer (nicht-trivialen) Erweiterung auf die Poincare-Gruppe.
- Verwende stattdessen Ableitungsoperatoren, die (278) ergänzen:

- Translation einer Funktion ϕ von x^μ in der Zeit um ein endliches a^0 :

$$\phi(x^0 + a^0, \mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a^0)^j}{j!} \frac{\partial^j \phi}{\partial_0^j}(x^0, \mathbf{x}). \quad (279)$$

- Translation einer Funktion ϕ von x^μ in der Zeit um ein infinitesimales a^0 :

$$\phi(x^0 + a^0, \mathbf{x}) = \left(1 + ia^0 P_0\right)\phi(x^0, \mathbf{x}), \quad P_0 \equiv -i\partial_0, \quad (280)$$

wobei P_0 die entsprechende Erzeugende ist.

– Translation einer Funktion ϕ von x^μ im Raum analog:

$$P_j \equiv -i\partial_j. \quad (281)$$

- Aus diesen Erzeugenden kann die **Algebra der Poincare-Gruppe** berechnet werden:

$$[J_j, J_k] = +i\epsilon_{jkl}J_l \quad , \quad [K_j, K_k] = -i\epsilon_{jkl}J_l \quad , \quad [J_j, K_k] = +i\epsilon_{jkl}K_l \quad (282)$$

(die Algebra der Lorentz-Gruppe) sowie

$$\begin{aligned} [P_\mu, P_\nu] &= 0 \\ [J_j, P_0] &= 0 \quad , \quad [J_j, P_k] = +i\epsilon_{jkl}P_l \\ [K_j, P_0] &= -iP_j \quad , \quad [K_j, P_k] = -i\delta_{jk}P_0. \end{aligned} \quad (283)$$

***** 27. Juni 2023 (21. Vorlesung) *****

5.4 Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen ausgehend von Symmetrieüberlegungen

5.4.1 Wellenfunktionen und Felder

- Wie aus der DG oder aus den Maxwell-Gleichungen bekannt ist, können Wellenfunktionen und Felder mehrkomponentige Objekte sein, z.B. ein Dirac-Spinor $\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ oder ein Viererpotential $A^\mu = (A^0, A^1, A^2, A^3)$.
- Solche mehrkomponentigen Objekte müssen sich unter Poincare-Transformationen in konsistenter Weise verändern:
 - Die Transformationseigenschaften werden durch die Poincare-Algebra (282) und (283) vorgegeben, z.B.
 - * $[J_x, J_y] = +iJ_z$
Eine Rotation (um einen kleinen Winkel) um die y -Achse, dann um die x -Achse unterscheidet sich von einer Rotation um x -Achse, dann um die y -Achse ... die Differenz beider Operationen entspricht einer Rotation um die z -Achse,
 - * $[K_x, K_y] = -iJ_z$
Ein Boost (mit kleiner Relativgeschwindigkeit bzw. Rapidität) entlang der y -Achse, dann entlang der x -Achse unterscheidet sich von einem Boost entlang der x -Achse, dann entlang der y -Achse ... die Differenz beider Operationen entspricht einer Rotation um die z -Achse.
 - Wellenfunktionen und Felder können eine beliebige Anzahl von Komponenten aufweisen, aber ihr Transformationsverhalten muss die von der Poincare-Algebra festgelegten Eigenschaften erfüllen. Dann können sie als Bausteine für relativistisch sinnvolle Wellen- oder Feldgleichungen dienen.
 - Finde also eine Matrixdarstellungen der Poincare-Algebra. Eine gefundene $N \times N$ -Darstellung stellt eine N -komponentige Wellenfunktion bzw. ein N -komponentiges Feld als Baustein zur Verfügung und legt das entsprechende Transformationsverhalten bezüglich Poincare-Transformationen fest.

1-komponentige Wellenfunktionen und Felder

- Nur eine mögliche 1×1 -Matrixdarstellung:

$$J_j = 0 \quad , \quad K_j = 0. \quad (284)$$

- Diese wirkt auf die 1-komponentige Wellenfunktion bzw. das 1-komponentige Feld ψ . Z.B. ist ein Lorentz-Boost mit Rapidität η in x -Richtung durch

$$\phi' = e^{+i\eta K_x} \phi = \phi \quad (285)$$

gegeben.

- Allgemein: $\phi' = \phi$, d.h. ϕ ist Lorentz-Skalar.
- Die Wellenfunktion ϕ in der KGG entspricht dieser Darstellung.

4-komponentige Felder

- Ein bekanntes Beispiel ist das em Viererpotential A^μ mit J_j und K_j gemäß (269) bis (271), (275) und (276) und $P_\mu = 0$.
- Da $e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} = \Lambda^\mu{}_\nu$ mit Winkeln α_j und Rapiditäten η_j , folgt

$$A'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu A^\nu. \quad (286)$$

2-komponentige Wellenfunktionen und Felder

- Man findet z.B. die 2×2 -Matrixdarstellung

$$J_j = \sigma_j/2 \quad , \quad K_j = +i\sigma_j/2. \quad (287)$$

- Diese wirkt auf eine 2-komponentige Wellenfunktion bzw. ein 2-komponentiges Feld $\phi_L = (\phi_{L,1}, \phi_{L,2})$,

$$\phi'_L = e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} \phi_L. \quad (288)$$

- Ein weiteres Beispiel für eine 2×2 -Matrixdarstellung ist

$$\begin{aligned} \tilde{J}_x &= -\sigma_x/2 \quad , \quad \tilde{J}_y = -\sigma_y/2 \quad , \quad \tilde{J}_z = +\sigma_z/2 \quad , \\ \tilde{K}_x &= -i\sigma_x/2 \quad , \quad \tilde{K}_y = -i\sigma_y/2 \quad , \quad \tilde{K}_z = +i\sigma_z/2. \end{aligned} \quad (289)$$

- Diese Darstellung liefert kein neues Transformationsverhalten, da die Darstellungen (287) und (289) **äquivalent** sind, d.h. eine Matrix T existiert mit

$$\tilde{J}_j = T J_j T^{-1} \quad , \quad \tilde{K}_j = T K_j T^{-1} \quad (290)$$

(das Finden der Matrix T ist Hausaufgabe).

- Äquivalente Darstellungen sind durch eine Koordinatentransformation verbunden, d.h. durch ein Umordnen bzw. ein lineares Kombinieren der Komponenten der Wellenfunktion bzw. des Felds. Für das genannte Beispiel lautet die Koordinatentransformation $\tilde{\phi}_L = T\phi_L$, was die folgende Rechnung zeigt:

$$\begin{aligned}
\phi'_L &= e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} \phi_L \\
\rightarrow T\phi'_L &= T e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} T^{-1} T\phi_L = e^{+i(\alpha_j T J_j T^{-1} + \eta_j T K_j T^{-1})} T\phi_L \\
\rightarrow \tilde{\phi}'_L &= e^{+i(\alpha_j \tilde{J}_j + \eta_j \tilde{K}_j)} \tilde{\phi}_L
\end{aligned} \tag{291}$$

(das Nachrechnen der vorletzten Zeile ist Hausaufgabe).

- Es gibt genau eine weitere nicht-äquivalente 2×2 -Matrixdarstellung,

$$J_j = \sigma_j/2 \quad , \quad K_j = -i\sigma_j/2. \tag{292}$$

- Diese wirkt auf eine 2-komponentige Wellenfunktion bzw. ein 2-komponentiges Feld $\phi_R = (\phi_{R,1}, \phi_{R,2})$,

$$\phi'_R = e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} \phi_R. \tag{293}$$

- ϕ_L und ϕ_R heißen links- und rechtshändige **Weyl-Spinoren**.

Erweiterung von LTs auf Poincare-Transformationen

- In den vorausgegangenen Abschnitten wurden nur Rotationen und Boosts betrachtet, d.h. LTs.
- Die Erweiterung auf Poincare-Transformationen ist in allen Fällen trivial, via $P_\mu = 0$.

Höher dimensionale Darstellungen, reduzible Darstellungen

- Es lassen sich problemlos Darstellungen mit größeren Matrizen finden. Diese entsprechen häufig Teilchen mit höherem Spin.
- Nicht sinnvoll ist die Verwendung **reduzierbarer Darstellungen**.
 - Reduzible Darstellung: Die Erzeugenden weisen alle dieselbe Blockdiagonalstruktur auf bzw. können durch Koordinatentransformation, z.B. im Fall der Lorentz-Algebra (290), auf dieselbe Blockdiagonalstruktur gebracht werden.
 - Z.B. ist

$$J_j = \begin{pmatrix} \sigma_j/2 & 0 \\ 0 & \sigma_j/2 \end{pmatrix} \quad , \quad K_j = \begin{pmatrix} +i\sigma_j/2 & 0 \\ 0 & -i\sigma_j/2 \end{pmatrix} \tag{294}$$

eine reduzible Darstellung (die links- und rechtshändigen 2×2 -Darstellungen wurden einfach übereinander geschrieben).

- Eine irreduzible Darstellung kann im Gegensatz dazu nicht vereinfacht werden, d.h. zerfällt nicht in unabhängige Blöcke und damit Gruppen von Komponenten. Eine irreduzible Darstellungen liefert einen fundamentalen Baustein für relativistisch sinnvolle Wellen- oder Feldgleichungen.

***** 29. Juni 2023 (22. Vorlesung) *****

5.4.2 Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen

- Bausteine für relativistische Wellen- und Feldgleichungen:
 - Wellenfunktionen und Felder aus Abschnitt 5.4.1, z.B. ϕ (1-komponentig), A^μ (4-komponentig), ϕ_L und ϕ_R (2-komponentig), ...
 - Ableitungen ∂_μ .
 - Konstanten: Zahlen wie z.B. Masse m , aber auch Matrizen wie z.B. γ^μ , ...
- Wellen- und Feldgleichungen müssen invariant unter Poincare-Transformationen sein. Außerdem sollten Ableitungen quadratisch (z.B. KGG, Maxwell-Gleichungen, Newtonsche BGLs) oder linear (z.B. DG) auftreten.
- Die Natur wird erfahrungsgemäß durch sehr einfache Gleichungen beschrieben. Probiere daher einfache mögliche Kombinationen obiger Bausteine mit genannten Einschränkungen, dann ist die Chance gut, ein Naturgesetz zu “erwischen”.

Gleichung für ϕ (1-komponentig)

- Einfacher erster Versuch:

$$\partial_\mu \phi = 0 \tag{295}$$

ist invariant unter Poincare-Transformationen, da

$$\partial'_\mu \phi' = 0 \rightarrow \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu \phi = 0 \rightarrow \partial_\mu \phi = 0. \tag{296}$$

Diese 4 Gleichungen mit je einer linearen Ableitung sind allerdings zu primitiv, um interessante Physik zu beschreiben.

- Versuch mit quadratischer Ableitung:

$$\partial^\mu \partial_\mu \phi = \square \phi = 0 \tag{297}$$

ist offensichtlich invariant unter Poincare-Transformationen. Dies ist die KGG für ein masseloses skalares Teilchen.

- Das Hinzunehmen einer Konstante liefert

$$\left(\square + m^2\right)\phi = 0. \tag{298}$$

Dies ist die KGG für ein massives skalares Teilchen (siehe auch Abschnitt 4.2).

Gleichungen für A^μ (4-komponentig, Vierervektor)

- Die Gleichung

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \quad (299)$$

mit linearen Ableitungen ist invariant unter Poincare-Transformationen, allerdings zu primitiv, um interessante Physik zu beschreiben.

- Versuche mit quadratischer Ableitung:

$$\partial^\mu \partial_\mu A^\nu = \square A^\nu = 0 \quad , \quad \partial^\nu \partial_\mu A^\mu = 0 \quad (300)$$

(beide invariant unter Poincare-Transformationen).

- Die Feldgleichung des em Felds wird durch eine weitere Symmetrie einschränkt, die **Eichsymmetrie**:

- Die Eichsymmetrie ist eine grundlegende Symmetrie der Elementarteilchenphysik. Sie erlaubt die “Konstruktion bzw. Herleitung der Naturgesetze der vier fundamentalen Kräfte” (em WW [Wechselwirkung], starke WW, schwache WW, Gravitation).

- Hier nur ein kurzer Ausblick.

- Man fordert, dass die Feldgleichungen der em WW invariant unter U(1)-Eichtransformationen sind (**Eichprinzip**; zur Gruppe U(1) siehe Aufgabenblatt 11), d.h. die Eichtransformation

$$A'^\mu(x) = g(x) \left(A^\mu(x) - \frac{i}{e} \partial^\mu \right) g^{-1}(x) \quad (301)$$

darf die Feldgleichungen nicht verändern. Dabei ist $g(x) = e^{+i\alpha(x)} \in U(1)$, d.h. eine komplexe an jedem Raumzeitpunkt x unterschiedliche Phase und e eine Konstante (die elektrische Kopplungskonstante bzw. Ladung).

- Dies ist zum Beispiel der Fall für die Feldgleichungen

$$\partial_\mu \left(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \right) = \partial_\mu F^{\mu\nu} = 0 \quad (302)$$

(Maxwell-Gleichungen im Vakuum), nicht jedoch für die Versuche (300).

- Neben (302) existiert nur eine weitere denkbare unabhängige Kombination von Feldgleichungen, die sowohl invariant unter Poincare-Transformationen als auch eichinvariant ist (diese zu finden ist Hausaufgabe).

- Die Eichsymmetrie ist ein weiteres wichtiges Beispiel für die Anwendung von Gruppentheorie und Symmetrieüberlegungen (eine umfangreiche Diskussion findet sich z.B. in der Vorlesung “Quantenfeldtheorie 1”).

- Das Hinzunehmen einer Konstante, z.B.

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + mA^\nu = 0, \quad (303)$$

ist nicht möglich, da dies die Eichsymmetrie verletzt.

Gleichungen für ϕ und A^μ (eine Theorie in der durch ϕ beschriebene skalare Teilchen mit durch A^μ beschriebenen Photonen wechselwirken)

- ϕ -Gleichung: Das prinzipielle Vorgehen wurde bereits in Abschnitt 4.3.5 diskutiert, ersetze die auf ϕ wirkende Ableitungen in (298) gemäß $+i\partial^\mu \rightarrow +i\partial^\mu - eA^\mu$,

$$\left((\partial^\mu + ieA^\mu)(\partial_\mu + ieA_\mu) + m^2\right)\phi = 0. \quad (304)$$

- A^μ -Gleichungen:

- Erinnerung an Elektrodynamik: Inhomogene Maxwell-Gleichungen,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \#j^\nu \quad (305)$$

(j^ν : Viererstromdichte der elektrischen Ladungen; #: Konstante, übliche Konvention $\# = 4\pi$).

- Verwende die Viererstromdichte der Wellenfunktion der KGG (195), wobei die wie oben auf ϕ wirkenden Ableitungen gemäß $+i\partial^\mu \rightarrow +i\partial^\mu - eA^\mu$ ersetzt werden,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi ie \left(\phi^* ((\partial^\nu + ieA^\nu)\phi) - (\partial^\nu + ieA^\nu)\phi^* \phi \right). \quad (306)$$

- Gleichungen (304) und (306) sind offensichtlich forminvariant unter Poincare-Transformationen.

- Gleichungen (304) und (306) sind eichinvariant, wenn man für ϕ die Eichtransformation gemäß

$$\phi'(x) = g(x)\phi(x) \quad (307)$$

definiert (Beweis ist Hausaufgabe).

- ϕ kann mit den in Abschnitt diskutierten Einschränkungen als Wellenfunktion eines elektrisch geladenen skalaren Teilchens betrachtet werden.
- A^μ beschreibt jedoch das em Feld, nicht die Wellenfunktion eines Photons. Beide Gleichungen (304) und (306) zusammen sind daher sinnvoll im Rahmen der Quantenfeldtheorie (dort ist ϕ ebenfalls ein Feld, das elektrisch geladene skalare Teilchen beschreibt).

Gleichungen für ϕ_L und ϕ_R (2-komponentig, Weyl-Spinoren)

- Einfacher erster Versuch:

$$\partial_\mu \phi_L = 0 \quad (308)$$

- Eine Gleichung mit einer linearen Ableitung ist im Fall von Spinoren (Wellenfunktionen und Felder mit mehreren Komponenten) nicht automatisch zu primitiv, um interessante Physik zu beschreiben (z.B. ist die DG eine Gleichung dieses Typs).

- Die Gleichung ist invariant unter Poincare-Transformationen.

- Aber: Die Gleichungen für die Komponenten $\Phi_{L,1}$ und $\Phi_{L,2}$ entkoppeln,

$$\partial_\mu \phi_{L,1} = 0 \quad , \quad \partial_\mu \phi_{L,2} = 0. \quad (309)$$

- * Ein spezielles Transformationsverhalten von ϕ_L unter Poincare-Transformationen (288) ist daher nicht notwendig für Forminvarianz von (308).
- * $\Phi_{L,1}$ und $\Phi_{L,2}$ könnten z.B. auch invariant unter Poincare-Transformationen sein, d.h. zwei unabhängige skalare Größen bilden mit $\phi'_{L,1} = \phi_{L,1}$ und $\phi'_{L,2} = \phi_{L,2}$, (308) wäre dann noch immer invariant unter Poincare-Transformationen.
- * Nur wenn ein spezielles Transformationsverhalten gemäß der geforderten Poincare-Symmetrie notwendig für die Invarianz der Gleichung ist, ist eine solche Gleichung mit entsprechendem Transformationsverhalten der Wellenfunktion bzw. Felder ein guter Kandidat zur Beschreibung von Naturgesetzen. (Einfach ausgedrückt: "Verwende sich kompliziert transformierende Bausteine, nur wenn erforderlich.")
- * Die Komponenten von ϕ_L und von ∂_μ müssen also so kombiniert werden, dass das Transformationsverhalten (288) für Invarianz unter Poincare-Transformationen erforderlich ist.

***** 03. Juli 2023 (23. Vorlesung) *****

- Transformationsverhalten von ϕ_L und von ∂_μ unter Poincare-Transformationen:

$$\phi'_L = S_L \phi_L \quad , \quad S_L = e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} = e^{+i\alpha_j \sigma_j / 2 - \eta_j \sigma_j / 2} \quad (310)$$

$$\partial'_\mu = \Lambda_\mu{}^\nu \partial_\nu. \quad (311)$$

- Man kann zeigen:

$$\Lambda_\mu{}^\nu (S_L)^\dagger \sigma_L^\mu S_L = \sigma_L^\nu \quad (312)$$

mit $\sigma_L^\mu = (1, -\vec{\sigma})$.

- Damit ist

$$\sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L = 0 \quad (313)$$

invariant unter Poincare-Transformationen, da

$$\begin{aligned} \sigma_L^\mu \partial'_\mu \phi'_L = 0 &\rightarrow \sigma_L^\mu \Lambda_\mu{}^\nu \partial_\nu S_L \phi_L = 0 \rightarrow (S_L)^\dagger \sigma_L^\mu \Lambda_\mu{}^\nu \partial_\nu S_L \phi_L = 0 \rightarrow \\ &\rightarrow \sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L = 0. \end{aligned} \quad (314)$$

- (313) beschreibt ein linkshändiges masseloses Spin-1/2 Fermion (eine Gleichung zur Beschreibung von Neutrinos).
- Analog beschreibt

$$\sigma_R^\mu \partial_\mu \phi_R = 0 \quad (315)$$

mit $\sigma_R^\mu = (1, +\vec{\sigma})$ ein rechtshändiges masseloses Spin-1/2 Fermion.

- Erweiterung von (313) auf ein massives Spin-1/2 Fermion:

- Versuch: Addition von $m\phi_L$ (orientiert an der DG),

$$\sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L + m\phi_L = 0. \quad (316)$$

- Poincare-Transformation von $\sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L$:

$$\sigma_L^\mu \partial'_\mu \phi'_L = (S_L^\dagger)^{-1} \sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L = S_R \sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L, \quad (317)$$

wobei Rechenschritte wie in (314) sowie $S_R = e^{+i(\alpha_j J_j - \eta_j K_j)} = e^{+i\alpha_j \sigma_j/2 + \eta_j \sigma_j/2}$ und

$$\begin{aligned} (S_L^\dagger)^{-1} &= \left(\left(e^{+i\alpha_j \sigma_j/2 - \eta_j \sigma_j/2} \right)^\dagger \right)^{-1} = \left(e^{-i\alpha_j \sigma_j/2 - \eta_j \sigma_j/2} \right)^{-1} = \\ &= e^{+i\alpha_j \sigma_j/2 + \eta_j \sigma_j/2} = S_R \end{aligned} \quad (318)$$

verwendet wurden.

- Poincare-Transformation von $m\phi_L$:

$$m\phi'_L = mS_L \phi_L. \quad (319)$$

- $\sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L$ und $m\phi_L$ weisen unterschiedliche Transformationsverhalten auf. Damit ist (316) nicht invariant unter Poincare-Transformationen.

- Analog kann man

$$\sigma_R^\mu \partial'_\mu \phi'_R = (S_R^\dagger)^{-1} \sigma_R^\mu \partial_\mu \phi_R = S_L \sigma_R^\mu \partial_\mu \phi_R, \quad m\phi'_R = mS_R \phi_R \quad (320)$$

zeigen.

- Damit sind die folgenden beiden Gleichungen invariant unter Poincare-Transformationen:

$$i\sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L - m\phi_R = 0, \quad i\sigma_R^\mu \partial_\mu \phi_R - m\phi_L = 0 \quad (321)$$

(die Vorfaktoren i und m sind nicht durch Symmetrien vorgegeben, stellen sich aber am Ende durch Abgleich mit bekannten theoretischen Ergebnissen oder Experimenten als geeignete Wahl heraus; z.B. entspricht m der Masse des Teilchens).

- Nur eine der beiden Gleichungen zu verwenden ist zu primitiv, um interessante Physik zu beschreiben (sowohl ϕ_L als auch ϕ_R sollten in Ableitungstermen auftreten).

- Verwende daher beide Gleichungen zusammen. Diese können kompakt in einer Zeile geschrieben werden,

$$\left(i\tilde{\gamma}^\mu \partial_\mu - m \right) \tilde{\psi} = 0 \quad (322)$$

mit

$$\tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \phi_L \\ \phi_R \end{pmatrix}, \quad \tilde{\gamma}^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_R^\mu \\ \sigma_L^\mu & 0 \end{pmatrix}. \quad (323)$$

- (322) hat die gleiche Struktur wie die DG (207), allerdings treten andere 4×4 -Matrizen auf, $\tilde{\gamma}^\mu \neq \gamma^\mu$.

- (207) ist äquivalent zu (322), es handelt sich lediglich um eine andere Linearkombination der vier Gleichungen bzw. Spinorkomponenten:

* Man kann leicht nachrechnen

$$\tilde{\gamma}^\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \gamma^0 \gamma^5) \gamma^\mu \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0 \gamma^5) \quad (324)$$

$$1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \gamma^0 \gamma^5) \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0 \gamma^5) \quad (325)$$

mit $\gamma^5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3$.

* Damit

$$\begin{aligned} (i\tilde{\gamma}^\mu \partial_\mu - m)\tilde{\psi} &= 0 \quad \leftrightarrow \\ \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \gamma^0 \gamma^5)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0 \gamma^5)\tilde{\psi} &= 0 \quad \leftrightarrow \\ \leftrightarrow (i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi &= 0 \end{aligned} \quad (326)$$

mit

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0 \gamma^5)\tilde{\psi}. \quad (327)$$

- (322) und (323) nennt man “chirale Darstellung” oder “Weyl-Darstellung” ((204) und (207) dagegen “Standarddarstellung” oder “Dirac-Darstellung”).
- Einfaches Ausrechnen,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0 \gamma^5) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 & -1 \\ +1 & +1 \end{pmatrix}, \quad (328)$$

zeigt, dass große und kleine Komponenten (für kleine Impulse) der Standard-Darstellung 50%/50%-Kombinationen von links- und rechtshändigen Weyl-Spinoren sind bzw. links- und rechtshändige Weyl-Spinoren der chiralen Darstellung 50%/50%-Kombinationen von großen und kleine Komponenten sind.

- Das Transformationsverhalten von $\tilde{\psi}$ unter Poincare-Transformationen ergibt sich direkt aus den Transformationsverhalten der links- und rechtshändigen Weyl-Spinoren (288) und (293),

$$\tilde{\psi}' = \begin{pmatrix} e^{+i\alpha_j \sigma_j / 2 - \eta_j \sigma_j / 2} & 0 \\ 0 & e^{+i\alpha_j \sigma_j / 2 + \eta_j \sigma_j / 2} \end{pmatrix} \tilde{\psi}. \quad (329)$$

Dieses ist äquivalent zu (236) (Beweis ist Hausaufgabe).

5.5 Zusammenfassung

- In diesem Kapitel wurde ein spezielles Beispiel diskutiert, das zeigt, wie mächtig Symmetrieüberlegungen und Gruppentheorie in der Physik sind.
- Die DG wurde auf völlig anderem Weg als in Kapitel 4.3 erhalten, ausschließlich mit Hilfe von Symmetrieüberlegungen.
- Symmetrien schränken mögliche Naturgesetze nicht vollständig aber sehr stark ein.
- Die einfachsten aufgrund von Symmetrien erlaubten Gleichungen bilden offenbar bzw. häufig Naturgesetze.
- In der (Quanten-)Feldtheorie finden solche Überlegungen üblicher Weise auf Ebene der Lagrange-Funktion statt. Dies ist etwas praktischer und übersichtlicher als Überlegungen auf Ebene der Wellen- oder Feldgleichungen, die Grundidee und die Ergebnisse sind allerdings identisch.
- Das Standardmodell (em WW, starke WW, schwache WW) ist eine $U(1) \times SU(2) \times SU(3)$ Eichtheorie mit Poincare-Symmetrie. Außerdem existiert eine approximative $SU(2)$ bzw. $SU(3)$ Flavorsymmetrie der Quarks.

- Neben den erlernten technischen Grundlagen (z.B. Gruppentheorie, Lie-Gruppen) ist die vor allem wichtige Aussage dieses Kapitels: **Symmetrien schränken mögliche Naturgesetze radikal ein. Sie sind damit das wichtigste Hilfsmittel der (Elementarteilchen-)Physik. Ohne Symmetrien und Symmetrieüberlegungen hätte man kaum eine Chance, physikalisch komplizierte Gleichungen oder Theorien zu finden bzw. mathematisch niederzuschreiben.**

6 Vielteilchensysteme

6.1 Grundlagen zur Behandlung ununterscheidbarer Teilchen

6.1.1 Eigenschaften von Zuständen und Operatoren bei Teilchenvertauschung

- Betrachte Systeme mit $N \geq 2$ Teilchen.
- Unterscheidbare Teilchen, z.B. das Wasserstoffatom bestehend aus einem Proton und einem Elektron, d.h. $N = 2$:
 - Bereits bekannt, konzeptionell geradlinig ...
 - ... Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ (Notation im Folgenden $\psi(1, 2, \dots)$), ...
 - ... Hamilton-Operator $H(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ (Notation im Folgenden $H(1, 2, \dots)$), ...
 - ... dann Lösen der zugehörigen Schrödinger-Gleichung in $3N$ Variablen.
- Interessant sind daher im Folgenden ununterscheidbare Teilchen, z.B. Mehrelektronensysteme (die Atomhülle von Atomen jenseits des Wasserstoffatoms, Elektronen im Festkörper, ...).
- Betrachte im Weiteren den Spezialfall, dass alle N Teilchen identisch sind.
- **Permutationsoperator** P_{jk} :
 - P_{jk} vertauscht das Teilchen j mit dem Teilchen k , d.h.
$$P_{jk}\psi(\dots, j, \dots, k \dots) = \psi(\dots, k, \dots, j \dots). \quad (330)$$
 - Aufgrund von $(P_{jk})^2 = 1$ sind die Eigenwerte von $P_{jk} \pm 1$.

***** 06. Juli 2023 (24. Vorlesung) *****

- Für jede Observable \mathcal{O} muss für den zugehörigen Operator und jeden Zustand $|\psi\rangle$

$$\langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle = \langle \psi | P_{jk} \mathcal{O} P_{jk} | \psi \rangle \quad (331)$$

gelten, sonst wären die Teilchen unterscheidbar ($P_{jk} = P_{jk}^\dagger$ wurde verwendet, das kann man zeigen).

- Damit folgt $P_{jk} \mathcal{O} P_{jk} = \mathcal{O}$ bzw. $[P_{jk}, \mathcal{O}] = 0$.
- Da die Gesamtenergie eine Observable ist, folgt $[P_{jk}, H] = 0$.
- Damit kann man zeigen, dass die Eigenzustände von H auch als Eigenzustände zu allen $N(N-1)/2$ Permutationsoperatoren P_{jk} gewählt werden können.
- Da $[P_{jk}, H] = 0$, ist ein solcher Zustand auch zu späterer Zeit ein Eigenzustand zu allen $N(N-1)/2$ Permutationsoperatoren P_{jk} mit gleichen Eigenwerten ± 1 (“die Zeitentwicklung verändert Eigenschaften eines Zustands bezüglich Teilchenvertauschung nicht.”).

- In der Natur sind nur vollkommen symmetrische oder vollkommen antisymmetrische Zustände realisiert (zeigt sich durch Abgleich mit Experimenten):

- **Zustand ununterscheidbarer Bosonen**, ganzzahliger Spin (z.B. Pionen, Photonen, ...):

$$P_{jk}|\psi\rangle = +|\psi\rangle. \quad (332)$$

- **Zustand ununterscheidbarer Fermionen**, halbzahliger Spin (z.B. Elektronen, Protonen, Quarks, ...):

$$P_{jk}|\psi\rangle = -|\psi\rangle. \quad (333)$$

* (330): $P_{jk}\psi(\dots, \mathbf{r}_j, s_j, \dots, \mathbf{r}_k, s_k, \dots) = \psi(\dots, \mathbf{r}_k, s_k, \dots, \mathbf{r}_j, s_j, \dots)$ (s_j : Spineinstellung, z.B. 2-komponentiger Vektor).

* (333): $P_{jk}\psi(\dots, \mathbf{r}_j, s_j, \dots, \mathbf{r}_k, s_k, \dots) = -\psi(\dots, \mathbf{r}_j, s_j, \dots, \mathbf{r}_k, s_k, \dots)$.

* Damit $\psi(\dots, \mathbf{r}, s, \dots, \mathbf{r}, s, \dots) = -\psi(\dots, \mathbf{r}, s, \dots, \mathbf{r}, s, \dots)$, d.h.

$\psi(\dots, \mathbf{r}, s, \dots, \mathbf{r}, s, \dots) = 0$, d.h. die Wahrscheinlichkeit, zwei identische Fermionen mit gleicher Spineinstellung am gleichen Ort zu finden, verschwindet.

→ Das Pauli-Prinzip ergibt sich als Konsequenz der vollständigen Antisymmetrie.

6.1.2 Nicht-wechselwirkende Teilchen

- Der Hamilton-Operator ist eine Summe aus N identischen 1-Teilchen-Hamilton-Operatoren,

$$H(1, 2, \dots) = \sum_{j=1}^N H_1(j). \quad (334)$$

- Die Eigenzustände von $H(1, 2, \dots)$ sind damit Produkte von Eigenzuständen der 1-Teilchen-Hamilton-Operatoren,

$$H_1(j)\phi_n(j) = E_{1,n}\phi_n(j) \quad (335)$$

(n nummeriert die Eigenzustände des 1-Teilchen-Hamilton-Operators $H_1(j)$, z.B. “ $n = p$ ” [Impuls] bei einem freien Teilchen oder “ $n = (n, l, m)$ ” [Quantenzahlen des Wasserstoffatoms] bei einem Coulomb-Potential), gemäß

$$H(1, 2, \dots)\psi(1, 2, \dots) = E\psi(1, 2, \dots) \quad (336)$$

$$\psi(1, 2, \dots) = \phi_{n_1}(1)\phi_{n_2}(2)\dots, \quad E = E_{1,n_1} + E_{1,n_2} + \dots \quad (337)$$

- Die Zustände (337) sind im Allgemeinen weder total symmetrisch (notwendig für ununterscheidbare Bosonen) noch total antisymmetrisch (notwendig für ununterscheidbare Fermionen) bezüglich Teilchenvertauschung, wie in Abschnitt 6.1.1 gefordert.

Bosonen

- Aus einem 2-Teilchenzustand der Form (337) kann ein total symmetrischer Zustand konstruiert werden,

$$\psi(1, 2) = A \left(\phi_{n_1}(1) \phi_{n_2}(2) + \phi_{n_2}(1) \phi_{n_1}(2) \right), \quad (338)$$

wobei $A = 1/2$, falls $n_1 = n_2$, bzw. $A = 1/\sqrt{2}$ sonst.

- Verallgemeinerung auf N Teilchen:

$$\psi(1, 2, \dots) = A \sum_P P(\phi_{n_1}(1) \phi_{n_2}(2) \dots), \quad (339)$$

wobei \sum_P die Summe über alle $N!$ Teilchenpermutationen P bezeichnet und A eine geeignet zu wählende Normierung ist.

Fermionen

- Aus einem 2-Teilchenzustand der Form (337) kann ein total antisymmetrischer Zustand konstruiert werden,

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{n_1}(1) \phi_{n_2}(2) - \phi_{n_2}(1) \phi_{n_1}(2) \right). \quad (340)$$

- $\psi(1, 2) = 0$, falls $n_1 = n_2$, d.h. Fermionen können nicht im gleichen Zustand sein. Das Pauli-Prinzip also über Antisymmetrie automatisch realisiert.

- Verallgemeinerung auf N Teilchen:

$$\psi(1, 2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sgn}(P) P(\phi_{n_1}(1) \phi_{n_2}(2) \dots), \quad (341)$$

wobei $\text{sgn}(P) = (-1)^{\#}$ zu vertauschender Teilchenpaare das Vorzeichen der Permutation ist.

- (341) kann auch mit der sogenannten **Slater-Determinante** geschrieben werden,

$$\psi(1, 2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{n_1}(1) & \phi_{n_1}(2) & \dots \\ \phi_{n_2}(1) & \phi_{n_2}(2) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (342)$$

6.1.3 Bosonischer und fermionischer Grundzustand beim Potentialtopf

- Betrachte ununterscheidbare Teilchen in einer Box mit Kantenlänge L ($0 \leq x, y, z \leq L$).
- 1-Teilchenzustände:

$$\phi_{\mathbf{n}}(j) = \# \sin(p_x x) \sin(p_y y) \sin(p_z z) \quad , \quad \mathbf{p} = \frac{\pi}{L} \mathbf{n} \quad , \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots \quad (343)$$

mit Energien $E_{1,\mathbf{n}} = \mathbf{p}^2/2m$.

- Bosonischer Grundzustand: Alle N Teilchen im gleichen 1-Teilchenzustand ($\mathbf{n} = (1, 1, 1)$, energetisch niedrigster 1-Teilchenzustand),

$$\psi_0(1, 2, \dots) = \phi_{(1,1,1)}(1)\phi_{(1,1,1)}(2) \dots, \quad E_0 = \sum_{j=1}^N E_{1,(1,1,1)} = \frac{3N\pi^2}{2L^2m}. \quad (344)$$

- Fermionischer Grundzustand:

- Da sich keine zwei Teilchen im gleichen Zustand befinden können, verteilen sie sich auf die niedrigsten N 1-Teilchenzustände.
- Beachte, dass Spin-1/2-Fermionen zwei mögliche Spineinstellungen besitzen.
- Z.B. 2-Teilchen-Grundzustand:

$$\psi_0(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{(1,1,1,\uparrow)}(1)\phi_{(1,1,1,\downarrow)}(2) - \phi_{(1,1,1,\downarrow)}(1)\phi_{(1,1,1,\uparrow)}(2) \right). \quad (345)$$

- Z.B. 3-Teilchen-Grundzustand (6-fach entartet, d.h. nur eine von 6 Möglichkeiten):

$$\psi_0(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P \text{sgn}(P) P(\phi_{(1,1,1,\uparrow)}(1)\phi_{(1,1,1,\downarrow)}(2)\phi_{(2,1,1,\uparrow)}(3)). \quad (346)$$

- Die Energie des fermionischen Grundzustands ist für $N \geq 3$ offensichtlich größer als die des bosonischen Grundzustands.

***** 11. Juli 2023 (25. Vorlesung) *****

6.1.4 Helium

- Helium (ein Kern bestehend aus 2 Protonen sowie 2 Elektronen) ist das einfachste Mehr-elektronenatom.
- Verwende folgende Näherungen:
 - Der Kern ist im Koordinatenursprung festgehalten, d.h. nur die Elektronen besitzen Dynamik.
 - Keine WW zwischen den beiden Elektronen.
- Hamilton-Operator:

$$H(1, 2) = \underbrace{\frac{(\mathbf{p}_1)^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_1}}_{=H_1(1)} + \underbrace{\frac{(\mathbf{p}_2)^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_2}}_{=H_1(2)}. \quad (347)$$

- Die 1-Teilchen-Hamilton-Operatoren entsprechen dem Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms mit Kernladungszahl $Z = 2$. Die zugehörigen Eigenzustände sind damit bekannt, charakterisiert durch Quantenzahlen (n, l, m, s) ,
 - Hauptquantenzahl $n = 1, 2, \dots$,

- Drehimpulsquantenzahl $l = 0, \dots, n - 1$,
- magnetische Quantenzahl $m = -l, -l + 1, \dots, +l - 1, +l$,
- Spinquantenzahl $s = \uparrow, \downarrow$.

Die zugehörigen 1-Teilchenenergien sind $E_{1,(n,l,m,s)} = -Z^2 \text{Ry}/n^2 = -4 \text{Ry}/n^2$.

- Die beiden Elektronenspins können zu einem antisymmetrischen Singlet $((|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2})$, Gesamtspin $S = 0$) oder zu einem symmetrischem Triplet $(|\uparrow\uparrow\rangle, (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}, |\downarrow\downarrow\rangle)$, Gesamtspin $S = 1$) kombiniert werden.
- Zustände mit $S = 0$ bezeichnet man als **Parahelium**, Zustände mit $S = 1$ als **Orthohelium** (historische Gründe).

- Grundzustand von Parahelium:

- Da der Spin antisymmetrisch ist, muss die Ortswellenfunktion symmetrisch unter Elektronenvertauschung sein.
- Der Grundzustand ist damit

$$\psi_{\text{para},0}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{(1,0,0)}(1)\phi_{(1,0,0)}(2)\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right), \quad (348)$$
 Energie $E_{\text{para},0} = -8 \text{Ry}$.

- Grundzustand von Orthohelium:

- Da der Spin symmetrisch ist, muss die Ortswellenfunktion antisymmetrisch unter Elektronenvertauschung sein.
- Der Grundzustand ist damit

$$\psi_{\text{ortho},0}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{(1,0,0)}(1)\phi_{(2,l,m)}(2) - \phi_{(2,l,m)}(1)\phi_{(1,0,0)}(2)\right)|\text{spin}\rangle, \quad (349)$$

$$\text{spin} \in \left\{|\uparrow\uparrow\rangle, (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}, |\downarrow\downarrow\rangle\right\},$$
 12-fach entartet, Energie $E_{\text{ortho},0} = -5 \text{Ry}$.

- Die WW zwischen Elektronen kann z.B. mit Hilfe von Störungstheorie berücksichtigt werden (siehe z.B. F. Schwabl, "Quantenmechanik (QM I)", Springer, Abschnitt 13.2.2).

6.2 Hartree-Verfahren

- Ziel: Löse die Schrödinger-Gleichung für ein wechselwirkendes N -Teilchensystem,

$$\left(\sum_j \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}_j} + V(\mathbf{r}_j)\right)}_{=H_1(j)} + \sum_{j<k} V_{\text{ww}}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|)\right)\psi(1,2,\dots) = E\psi(1,2,\dots). \quad (350)$$

- Beispiel: Elektronenhülle eines Atoms mit Kernladungszahl Z ,

$$V(\mathbf{r}_j) = -\frac{Ze^2}{r_j} \quad (351)$$

$$V_{\text{ww}}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|) = +\frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|}. \quad (352)$$

- Die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung (350) ist selbst numerisch ausgesprochen schwierig, da es sich um eine partielle DGL in $3N$ Variablen handelt.
- Das **Hartree-Verfahren** ist eine Methode, um die Schrödinger-Gleichung (350) auch für größere N zumindest näherungsweise zu lösen.
- Grundidee:

- Der Ansatz für die Lösung ist

$$\psi(1, 2, \dots) = \phi_1(1)\phi_2(2) \dots, \quad (353)$$

d.h. ein Produkt von 1-Teilchen-Wellenfunktionen. Dies ist bereits eine Näherung, da die exakte Lösung i.A. nicht diese Struktur aufweisen wird.

- Bestimme die 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\phi_j(j)$ durch (typischer Weise numerisches) Lösen der **Hartree-Gleichungen**,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_j} + V(\mathbf{r}_j) + V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j) \right) \phi_j(j) = \epsilon_j \phi_j(j) \quad (354)$$

mit den **Hartree-Potentialen**

$$V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j) = \sum_{k \neq j} \int d^3 r_k \underbrace{\phi_k^*(k) \phi_k(k)}_{=\rho_k(\mathbf{r}_k)} V_{\text{ww}}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|) \quad (355)$$

($\rho_k(\mathbf{r}_k)$: Wahrscheinlichkeitsdichte, das k -te Teilchen bei \mathbf{r}_k zu finden).

- Interpretation: Das Hartree-Potential für das j -te Teilchen ergibt sich aus der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten aller anderen Teilchen $k \neq j$ und der WW dieser Teilchen mit j -ten Teilchen.
- Die Hartree-Gleichungen sind über die Hartree-Potentiale gekoppelt (in jeder der N Gleichungen treten alle $\phi_j(j)$ auf).
- Sind alle $\phi_k(k)$, $k \neq j$ bekannt bzw. werden diese vorgegeben, ist die j -te Hartree-Gleichung eine vergleichsweise primitive 1-Teilchen-SG (eine partielle DGL in 3 Variablen), d.h. ihre numerische Lösung ist unproblematisch.
- Iterativer Algorithmus zur Lösung der Hartree-Gleichungen:
 - (1) Starte mit näherungsweise korrekten $\phi_j(j)$. Verwende z.B. Lösungen der Hartree-Gleichungen (354) mit $V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j) = 0$.
 - (2) Berechne alle N Hartree-Potentiale $V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j)$ mit den aktuell vorliegenden $\phi_j(j)$.
 - (3) Löse mit den in (2) berechneten Hartree-Potentialen die Hartree-Gleichungen (354). Die neu gewonnenen $\phi_j(j)$ ersetzen die alten $\phi_j(j)$.
 - (4) Falls die neuen $\phi_j(j)$ nahezu identisch zu den alten $\phi_j(j)$ sind:
 - Beende das Hartree-Verfahren. Die näherungsweise Lösung der SG ist (353) mit den aktuell vorliegenden $\phi_j(j)$.
 - Sonst:
 - Gehe zu (2).
- Es handelt sich um ein iteratives Verfahren. Die $\phi_j(j)$ nähern sich i.d.R. immer weiter der gesuchten Lösung an. Konvergenz ist jedoch nicht garantiert.

- Wenn bei Beendigung des Hartree-Verfahrens die neuen $\phi_j(j)$ identisch zu den alten $\phi_j(j)$ sind, spricht man von “selbstkonsistenten Feldern $\phi_j(j)$ ” (das Hartree-Verfahren wird auch als “Methode der selbstkonsistenten Felder” bezeichnet).
- Der Zustand (353) ist nicht total antisymmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung. Das Pauli-Prinzip ist daher i.A. nicht realisiert. Ein ähnliches Verfahren, das das Pauli-Prinzip berücksichtigt, ist das Hartree-Fock-Verfahren (siehe z.B. F. Schwabl, “Quantenmechanik (QM I)”, Springer, Abschnitt 13.3.2).

***** 13. Juli 2023 (26. Vorlesung) *****

6.3 Ausblick: QM Behandlung von Systemen mit veränderlicher Teilchenzahl

- Bisher stets gleichbleibende Teilchenzahl.
- Ziel: Beschreibung von Prozessen, in denen Teilchen erzeugt oder vernichtet werden.

6.3.1 Fock-Raum

- Starte mit einer Basis von 1-Teilchenzuständen $|k\rangle$ (z.B. ebene Wellen, d.h. Zustände mit definiertem Impuls, “ $k = \mathbf{p}$ ”).
- Notation: $|k\rangle_j \rightarrow$ das j -te Teilchen befindet sich im 1-Teilchenzustand $|k\rangle$.
- Basiszustände eines N -Teilchensystems:

$$|k_1, k_2, \dots\rangle \equiv |k_1\rangle_1 |k_2\rangle_2 \dots \quad (356)$$

- Betrachte im Folgenden Bosonen mit korrekt implementierter Symmetrisierung bezüglich Teilchenvertauschung:

$$S(|k_1, k_2, \dots\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P P(|k_1, k_2, \dots\rangle). \quad (357)$$

- Zweckmäßig ist der Übergang zur **Besetzungszahldarstellung**:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} S(|k_1, k_2, \dots\rangle), \quad (358)$$

wobei n_k Anzahl der Teilchen in 1-Teilchenzustand $|k\rangle$ angibt.

- Beispiel: Verwende als Basis von 1-Teilchenzuständen ebene Wellen. Betrachte den 5-Teilchenzustand $|\psi\rangle$, bei dem 3 Teilchen Impuls \mathbf{p} und 2 Teilchen Impuls \mathbf{q} besitzen.

– Notation wie in (357):

$$|\psi\rangle \propto S(|\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{q}\rangle). \quad (359)$$

– Besetzungszahldarstellung (358):

$$|\psi\rangle = |n_{\mathbf{p}} = 3, n_{\mathbf{q}} = 2\rangle \quad (360)$$

(üblicher Weise werden nur von Null verschiedene Besetzungszahlen angegeben).

- Zustände, notiert in Besetzungszahldarstellung (358), mit beliebigen n_1, n_2, \dots bilden eine Basis für die Behandlung von Systemen mit veränderlicher Teilchenzahl. Sie spannen den sogenannten **Fock-Raum** auf:

– Vakuum: $|\Omega\rangle$ (alle $n_k = 0$).

– 1-Teilchenzustände: $|n_1 = 1\rangle, |n_2 = 1\rangle, \dots$

– 2-Teilchenzustände: $|n_1 = 2\rangle, |n_2 = 2\rangle, \dots |n_1 = 1, n_2 = 1\rangle, |n_1 = 1, n_3 = 1\rangle, \dots$

– ...

6.3.2 Teilchenerzeugung und -vernichtung

- Definiere **Erzeugungsoperatoren** a_k^\dagger und **Vernichtungsoperatoren** a_k :

$$a_k^\dagger |n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1, \dots\rangle \quad (361)$$

$$a_k |n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1, \dots\rangle. \quad (362)$$

- Gleiches Prinzip wie bei Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren beim harmonischen Oszillator (siehe Vorlesung “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik”).
- Jeder Operator (z.B. der Hamilton-Operator, der Gesamtimpulsoperator, ...) kann durch die a_k^\dagger und a_k ausgedrückt werden.
- Beispiel: Hamilton-Operator freier Bosonen mit Masse m in drei Dimensionen in einem Kasten mit Kantenlänge L ,

$$H = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\mathbf{k}(\mathbf{n})^2}{2m} a_{\mathbf{k}(\mathbf{n})}^\dagger a_{\mathbf{k}(\mathbf{n})} \quad (363)$$

mit $k_j = (2\pi/L)n_j$.

- Mit ähnlichen Operatoren, die typischer Weise mehr als zwei Erzeugungs- und/oder Vernichtungsoperatoren enthalten, lassen sich Teilchenwechselwirkungen sowie Übergänge zwischen Zuständen mit unterschiedlicher Teilchenzahl beschreiben.
- Mehr dazu z.B. in F. Schwabl, “Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)”, Springer, Kapitel 1 bis 4 oder in der Vorlesung “Einführung in die Quantenfeldtheorie und das Standardmodell der Teilchenphysik”.