

Höhere Quantenmechanik

Marc Wagner

Goethe-Universität Frankfurt am Main – Sommersemester 2017

Version: 18. Juli 2017

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	6
2	Streutheorie	8
2.1	Streuung in 1 Raumdimension	8
2.2	Streuung in 3 Raumdimensionen	12
2.2.1	Streuung eines durch ein Wellenpaket beschriebenen Teilchens	12
2.2.2	Differentieller und totaler Wirkungsquerschnitt	16
2.2.3	Wiederholung: Freie stationäre SG in Kugelkoordinaten	18
2.2.4	Partialwellen und Streuphasen	19
2.2.5	Optisches Theorem	23
2.2.6	Bornsche Näherung für gesamtes Streuproblem	23
2.2.7	Bornsche Näherung für Partialwellen	24
2.2.8	Näherungsfreie Bestimmung von Streuphasen	26
2.2.9	Beispiel: Streuung an undurchdringlicher Kugel	27
2.2.10	Resonanzstreuung am sphärischen Potentialtopf	27
3	Relativistische QM	31
3.1	Spezielle Relativitätstheorie	31
3.1.1	“Herleitung”, Lorentz-Transformationen	31
3.1.2	Energie und Impuls relativistischer Teilchen	33
3.2	Klein-Gordon-Gleichung	34
3.3	Dirac-Gleichung	36
3.3.1	Lösungen mit negativer Energie	40
3.3.2	Spin	40
3.3.3	Lorentz-Kovarianz der DG, Transformationsverhalten von Spinoren	41
3.3.4	Bilineare Kovarianten	42
3.3.5	Relativistisches Fermion im elektromagnetischen Feld	43
3.3.6	Nicht-relativistischer Grenzfall eines Fermions im elektromagnetischen Feld, Pauli-Gleichung, gyromagnetischer Faktor des Elektrons	43

4	Ausgewählte Grundlagen und Anwendungen der Gruppentheorie und von Symmetrien in der Quantenmechanik	46
4.1	Gruppen	46
4.2	Lie-Gruppen	46
4.2.1	Beispiel: Gruppe der Rotationen in 3 Dimensionen	47
4.2.2	Beispiel: Gruppe der “komplexen Rotationen” in 2 Dimensionen	48
4.2.3	Gruppe versus Algebra	49
4.3	Lorentz- und Poincare-Gruppe	50
4.3.1	Lorentz-Gruppe	50
4.3.2	Poincare-Gruppe	52
4.4	Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen ausgehend von Symmetrieüberlegungen	53
4.4.1	Wellenfunktionen und Felder	53
4.4.2	Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen	55
4.5	Zusammenfassung	61
5	Vielteilchensysteme	62
5.1	Grundlagen zur Behandlung ununterscheidbarer Teilchen	62
5.1.1	Eigenschaften von Zuständen und Operatoren bei Teilchenvertauschung	62
5.1.2	Nicht-wechselwirkende Teilchen	63
5.1.3	Bosonischer und fermionischer Grundzustand beim Potentialtopf	65
5.1.4	Helium	65
5.2	Hartree-Verfahren	66
5.3	Ausblick: QM Behandlung von Systemen mit veränderlicher Teilchenzahl	68
5.3.1	Fock-Raum	68
5.3.2	Teilchenerzeugung und -vernichtung	69

1 Wiederholung grundlegender Konzepte der Quantenmechanik (QM)

- Kapitel dient zur Erinnerung an “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik”.
- Keine lückenlose oder vollständige Darstellung.
- Grundlagen, die notwendige (aber nicht hinreichende) Voraussetzungen zum Verständnis der in dieser Vorlesung diskutierten fortgeschrittenen Konzepte der QM sind.
- *“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. ... On the other hand, I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics.” (Richard Feynman, 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 Gesamtenergie):

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

(Übergang von L zu H heißt Legendre-Transformation).

- **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 “bra”s $|X\rangle$ (bzw. “ket”s $\langle X|$) notiert werden. X ist dabei ein Label (nicht eine Formel oder ein mathematischer Ausdruck), der den Zustand beschreibt, z.B.

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

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 Dimension im Potential $V(x)$.

– Lagrange-Funktion:

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

– Kanonisch konjugierter Impuls:

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

– Hamilton-Funktion:

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

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

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

weil

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

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

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

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

die stationäre Schrödinger-Gleichung (SG; ist also keine fundamentale Gleichung, sondern kann "hergeleitet" werden).

- Darstellung nicht eindeutig, ebenso z.B.

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

möglich.

1.3 Eigenwerte von Operatoren, Messung von Observablen

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

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

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

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

betragen; System befindet sich danach im Zustand $|n\rangle$, Messung zerstört also Zustand $|\psi\rangle$. (Im Fall nicht-entarteter Eigenwerte; geradlinig auf entartete Eigenwerte erweiterbar.)

- Daraus ergibt sich Erwartungswert oder Mittelwert einer Messung (Mittelung über Messergebnisse bei Messung an unendlich vielen identischen, d.h. im Zustand $|\psi\rangle$ präparierten Systemen):

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

(Rechnung zeigt, dass $\langle \psi|\hat{O}|\psi\rangle$ Erwartungswert entspricht).

***** 25. April 2017 (2. Vorlesung) *****

1.4 Zeitentwicklung

- Dynamik eines qm Systems wird durch SG

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

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

- Für zeitunabhängiges \hat{H} folgt

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

- Berechnen von $|\psi(t)\rangle$ 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 Streutheorie

- Streuexperimente von zentraler Bedeutung
 - in Teilchenphysik (z.B. Erzeugung neuer Teilchen, für Rückschlüsse auf die zwischen Teilchen wirkenden Kräfte),
 - in Festkörperphysik (z.B. Untersuchung von Aufbau von Materie und Kristallstrukturen).
- Darstellung der Streutheorie orientiert sich an F. Schwabl, “Quantenmechanik (QM I)”, Springer.

2.1 Streuung in 1 Raumdimension

- Mathematik in 1 Raumdimension einfacher als in 3 Raumdimensionen, Abschnitt dient vorwiegend konzeptionellen Verständnis der Streutheorie.
- Betrachte nach rechts laufendes Teilchen bzw. aus solchen Teilchen zusammengesetzten Teilchenstrahl, der mit Potential wechselwirkt, d.h. daran gestreut wird.

- Wähle endlichen Potentialtopf (dann einfache Mathematik),

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } -a \leq x \leq +a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (22)$$

($V_0 > 0$).

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

XXXXX Bild-001 XXXXX

- Berechne stationäres 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 stationäre SG,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (23)$$

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).

- Lösung geradlinig (ist Hausaufgabe), man findet

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{für } x < -a \\ A_2 e^{+iqx} + B_2 e^{-iqx} & \text{für } -a \leq x \leq +a \\ A_3 e^{+ikx} & \text{für } +a < x \end{cases} \quad (24)$$

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

$$A_3 = A_1 S(E) \quad (25)$$

$$B_1 = A_1 S(E) \underbrace{\frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \sin(2qa)}_{=\bar{S}(E)} \quad (26)$$

$$S(E) = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2qa) - (i/2)((q/k) + (k/q)) \sin(2qa)} \quad (27)$$

und berechenbarem aber hier nicht interessantem A_2 und B_2 .

- Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(x, t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} - \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \psi(x, t) \right) \quad (28)$$

(bekannt aus Vorlesung "Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik"); damit entspricht

– von links einlaufenden Teilchen

$$j_{\text{in}} = +\hbar k |A_1|^2 / m, \quad (29)$$

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

$$j_{\text{transmission}} = +\hbar k |A_1|^2 |S(E)|^2 / m, \quad (30)$$

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

$$j_{\text{reflection}} = -\hbar k |A_1|^2 |\bar{S}(E)|^2 / m. \quad (31)$$

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

$$\left| S(E) \right|^2 = \frac{1}{1 + (1/4)((q/k) - (k/q))^2 \sin^2(2qa)} = \left(1 + \frac{\sin^2(2qa)}{4(E/V_0)(1 + (E/V_0))} \right)^{-1}. \quad (32)$$

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

$$\left| S(E) \right|^2 = 1 - \left| \bar{S}(E) \right|^2 \quad (33)$$

(wie erwartet).

- Eigenschaften von $S(E)$:

- Maxima von $|S(E)|^2$ bei $2qa = n\pi$ (aus $E > 0$ folgt $q > \sqrt{2mV_0}/\hbar$ und daraus $2(\sqrt{2mV_0}/\hbar)a/\pi < n$).
- Minima dazwischen, näherungsweise bei $2qa = (n + 1/2)\pi$.
- Maxima und Minima stark ausgeprägt, falls die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- * $E \ll V_0$, d.h. bei kleiner Energie der einlaufenden Teilchen und tiefem Topf.
- * Einige Energiemaxima deutlich unterhalb V_0 liegen, also für diese Maxima erste Bedingung erfüllt ist.

XXXXX Bild-002 XXXXX

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

$$S(E) \approx (-1)^n e^{-2ika} \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2} \quad (34)$$

bzw.

$$|S(E)|^2 = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (35)$$

(Lorentz-Kurve mit Halbwertsbreite Γ , heißt in diesem Kontext **Resonanzbreite**) mit

$$\Gamma/2 = \frac{2\hbar\sqrt{E_R}(E_R + V_0)}{\sqrt{2ma}(2E_R + V_0)} \quad (36)$$

bzw. bei kleiner Energie der einlaufenden Teilchen und tiefem Topf

$$\Gamma/2 \approx \frac{2\hbar\sqrt{E_R}}{\sqrt{2ma}} = \hbar v_R/a \quad (37)$$

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

***** 27. April 2017 (3. Vorlesung) *****

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

$$S(E) = |S(E)| e^{-2ika + i\delta(E)}. \quad (38)$$

* Rechnung

$$\begin{aligned} \psi_{\text{transmission}}(+a) &= A_3 e^{+ika} = A_1 S(E) e^{+ika} = A_1 |S(E)| e^{-ika + i\delta(E)} = \\ &= |S(E)| e^{+i\delta(E)} \psi_{\text{in}}(-a) \end{aligned} \quad (39)$$

zeigt, dass $\delta(E)$ Phasenverschiebung beschreibt, 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 $\psi_{\text{transmission}} = A_3 e^{+ika}$ Potential verlässt und nach rechts weiterläuft.

* Es gilt

$$\tan(\delta(E)) = \frac{\text{Im}(S(E)e^{+2ika})}{\text{Re}(S(E)e^{+2ika})} = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \tan(2qa) \quad (40)$$

((27) wurde verwendet) bzw. in Resonanznähe

$$\delta(E) \approx \arctan\left(\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)\right) \quad (41)$$

((34) wurde verwendet).

- Warum spricht man von Resonanzen?

- (35) und (41) erinnern an bekannte Resonanzphänomene.

XXXXX Bild-003 XXXXX

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

- * Newtonsche BGL:

$$\ddot{x}(t) + 2\alpha\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = f_0 \cos(\Omega t). \quad (42)$$

- * Partikulärlösung (bzw. Lösung für große Zeiten):

$$x(t) = |C(\Omega)| \cos(\Omega t + \arg(C(\Omega))) \quad (43)$$

mit

$$|C(\Omega)| = \frac{|f_0|}{\sqrt{(-\Omega^2 + \omega_0^2)^2 + 4\alpha^2\Omega^2}}, \quad \arg(C(\Omega)) = \operatorname{arccot}\left(\frac{-\Omega^2 + \omega_0^2}{-2\alpha\Omega}\right). \quad (44)$$

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

- Bewegung eines Teilchens mit nahezu Resonanzenergie:

- Von links einlaufendes Teilchen beschrieben durch Wellenpaket,

$$\psi_{\text{in}}(x, t) = \int_0^\infty dk g(k) e^{+ikx - iEt/\hbar} \quad (45)$$

(gültig für $x < -a$), wobei g 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. Gauß-Funktion).

- $|\psi_{\text{in}}(x, t)|$ und damit Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens groß, wenn sich Beiträge der k -Integration addieren, nicht aber “weginterferieren”; ist der Fall, wenn sich 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 Beziehung

$$\left. \frac{d}{dk} \left(+ikx - iEt/\hbar \right) \right|_{k=k_R} = +ix - i\hbar k_R t/m = 0 \quad (46)$$

stehen (“Stationarität der Phase”); dies liefert “Trajektorie” des einlaufenden Teilchens,

$$x = \frac{\hbar k_R}{m} t, \quad (47)$$

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

- Wellenfunktion des nach rechts weiterlaufenden Teilchens ergibt sich aus (24), (25), (38) und (45),

$$\psi_{\text{transmission}}(x, t) = \int_0^\infty dk g(k) |S(E)| e^{+ik(x-2a) + i\delta(E) - iEt/\hbar} \quad (48)$$

(gültig für $x > +a$).

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dk} \left(+ik(x-2a) + i\delta(E) - iEt/\hbar \right) \Big|_{k=k_R} &= \\ &= +i(x-2a) + i \frac{d}{dk} \delta(E) \Big|_{k=k_R} - i\hbar k_R t / m = 0 \end{aligned} \quad (49)$$

$$\text{Nebenrechnung: } \frac{d}{dk} \delta(E) = \frac{d\delta(E)}{dE} \frac{dE}{dk} \approx \frac{2/\Gamma}{1 + ((2/\Gamma)(E - E_R))^2} \frac{\hbar^2 k}{m} \quad (50)$$

$$\rightarrow x \approx 2a - \frac{2}{\Gamma} \frac{\hbar^2 k_R}{m} + \frac{\hbar k_R}{m} t = 2a + \frac{\hbar k_R}{m} \left(t - \frac{2\hbar}{\Gamma} \right) \quad (51)$$

(in (50) wurde (41) verwendet).

- Interpretation:

- * Teilchen benötigt Zeit $2\hbar/\Gamma$ um Potential der Breite $2a$ zu durchlaufen.
- * $2\hbar/\Gamma$ wird daher als **Lebendauer der Resonanz** bezeichnet.
- * Z.B. für $E \ll V_0$ (siehe (37)), $2\hbar/\Gamma = a/v_R = a/(k_R/m)$.
- * Klassisch würde man viel kürzere Zeit erwarten, $2a/(q_R/m)$, da $q_R \gg k_R$.
- * 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.

- Resonanzphänomen tritt häufig auf in Kern- und Elementarteilchenphysik:

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

***** 02. Mai 2017 (4. Vorlesung) *****

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

- Betrachte $S(E)$ in Form (34) 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 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 in Hausaufgabe, Blatt 2.

2.2 Streuung in 3 Raumdimensionen

2.2.1 Streuung eines durch ein Wellenpaket beschriebenen Teilchens

- Teilchen (Projektil) wird an Potential (Target) gestreut.

- Potential:

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

- Teilchen:

– t_0 ist Zeitpunkt vor Streuprozess.

– Impuls bei $t = t_0$ ist $\hbar\mathbf{k}_0$.

– Teilchen bei $t = t_0$ hinreichend weit von Potential entfernt.

– Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ kann als Wellenpaket geschrieben werden, bei $t = t_0$

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (52)$$

mit folgenden Eigenschaften:

(1) $a(\mathbf{k})$ normiert, d.h. $\int d^3k |a(\mathbf{k})|^2 = 1$,

(2) $|a(\mathbf{k})|^2$ hat klar definierten Peak bei $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, Breite klein gegenüber $|\mathbf{k}_0|$, d.h. für alle \mathbf{k} mit $a(\mathbf{k}) \not\approx 0$ gilt $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0$ und $|\mathbf{k}_0| \gg |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$,

(3) Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ hat vernachlässigbaren Überlapp zu $V(\mathbf{r})$,

(4) $a(\mathbf{k})$ bzw. Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ so gewählt, dass Teilchen zu späterem Zeitpunkt Potential trifft, d.h. Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ in einem Bereich in $-\mathbf{k}_0$ -Richtung vom Ursprung entfernt lokalisiert.

XXXXX Bild-004 XXXXX

- Gesucht: Zeitentwicklung von $\psi(\mathbf{r}, t_0)$, d.h. $\psi(\mathbf{r}, t)$, da diese vollständige Information über Streuprozess enthält.

- Dafür Eigenfunktionen der stationären SG benötigt,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(k) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (53)$$

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

– Hier noch nicht offensichtlich, dass Wellenzahlvektor \mathbf{k} Lösungen durchnummeriert.

– Geradliniger wäre Notation $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \rightarrow \phi_n(\mathbf{r})$, $E(k) \rightarrow E_n$.

– Dass \mathbf{k} geeignete Wahl für Label ist, wird sich unten zeigen.

– Verwende bereits jetzt \mathbf{k} , um späteres Abändern der Notation zu vermeiden.

- Damit

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r}) = \int d^3k A(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad A(\mathbf{k}) = \int d^3r \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) \quad (54)$$

und Zeitentwicklung

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k e^{-iE(k)(t-t_0)/\hbar} A(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (55)$$

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

- Umschreiben der stationären SG in Integralgleichung zweckmäßig:

- Wellenfunktionen gebundener Zustände, d.h. mit $E < 0$, fallen für $|\mathbf{r}| > R$ exponentiell ab, haben daher vernachlässigbaren Überlapp zu $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r})$, da Wellenpaket hinreichend weit von Potential entfernt (Bedingung (3) zu Beginn des Unterkapitels); suche daher ausschließlich Lösungen mit $E > 0$.

- Umstellen der stationären SG,

$$(\Delta + k^2)\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r})\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (56)$$

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

$$(\Delta + k^2)G_+(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}), \quad (57)$$

damit

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k},\text{homogen}}(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \quad (58)$$

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

$$(\Delta + k^2)\phi_{\mathbf{k},\text{homogen}}(\mathbf{r}) = 0 \quad (59)$$

erfüllt, sonst aber beliebig gewählt werden kann.

- Lösungen von (59) bekannt, ebene Wellen $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ (deshalb wurde oben \mathbf{k} als Label für Eigenfunktionen $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gewählt); damit vollständiger Satz von Lösungen mit $E > 0$

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')V(\mathbf{r}')\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \quad (60)$$

- Greensche Funktion ist

$$G_+(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{+ikr}}{r}. \quad (61)$$

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

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

* Greensche Funktion nicht eindeutig, da Lösung der homogenen Gleichung (59) addiert werden kann.

* Spezielle Wahl $G_+(\mathbf{r})$ für einfache Rechnung notwendig (siehe (66)).

- Einsetzen in (60):

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'), \quad (62)$$

- Detektoren weit entfernt vom um $\mathbf{r} = 0$ lokalisierten Potential, daher 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 Wellenzahlvektor mit Betrag k und Richtung $\hat{\mathbf{r}}$).

– (62) vereinfacht sich damit zu

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{e^{+ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right) \quad (63)$$

mit sogenannter **Streuamplitude**

$$f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) = -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \quad (64)$$

(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).

***** 04. Mai 2017 (5. Vorlesung) *****

– Streuamplitude beschreibt Streuprozesse, ähnlich wie $S(E)$ in Abschnitt 2.1, daher zentrale Größe in Streutheorie.

• Bestimmung der Koeffizienten $A(\mathbf{k})$ in Zeitentwicklung (55):

– Ausgangspunkt ist (52) (enthält $a(\mathbf{k})$), Einsetzen von (62) (Ziel ist Koeffizientenvergleich mit (55) vorzunehmen, enthält $A(\mathbf{k})$),

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t_0) &= \psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \\ &= \int d^3k a(\mathbf{k}) \left(\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \right). \end{aligned} \quad (65)$$

– 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. Winkel zwischen \mathbf{k}_0 und \mathbf{k} vernachlässigbar klein).

– Vertausche Integrale im 2-ten Term von (65), betrachte innere Integration,

$$\begin{aligned} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') &\approx \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{+i\mathbf{k}\hat{\mathbf{k}}_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \phi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}') = \\ &= (2\pi)^{3/2} \underbrace{\psi(\hat{\mathbf{k}}_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, t_0)}_{=0} \phi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}') = 0; \end{aligned} \quad (66)$$

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

XXXXX Bild-005 XXXXX

– (65) vereinfacht sich damit zu

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_0(\mathbf{r}) \approx \int d^3k a(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad (67)$$

Koeffizientenvergleich mit (54) liefert $A(\mathbf{k}) \approx a(\mathbf{k})$ und (55) wird zu

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx \int d^3k e^{-iE(\mathbf{k})(t-t_0)/\hbar} a(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (68)$$

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

- Für $|\mathbf{r}| \gg R$, z.B. im Bereich des Detektors, kann Näherung (63) eingesetzt werden,

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}, t) &\approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{-iE(\mathbf{k})(t-t_0)/\hbar} a(\mathbf{k}) \left(e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{e^{+ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right) = \\ &= \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) e^{-iE(\mathbf{k})(t-t_0)/\hbar + i\mathbf{k}\mathbf{r}}}_{=\psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t)} \\ &\quad + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) \frac{e^{-iE(\mathbf{k})(t-t_0)/\hbar + ikr}}{r} f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi)\end{aligned}\quad (69)$$

($\psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t)$ ist 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. freie Entwicklung des Wellenpakets, bis auf übliches ‐Zerlaufen‐ bleibt Wellenpaket unverändert]).

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

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}, t) &\approx \psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k a(\mathbf{k}) \frac{e^{-iE(\mathbf{k})(t-t_0)/\hbar + i\mathbf{k}\hat{\mathbf{k}}_0 r}}{r} f_{\mathbf{k}_0}(\vartheta, \varphi) = \\ &= \psi_{\text{frei}}(\mathbf{r}, t) + \frac{\psi_{\text{frei}}(\hat{\mathbf{k}}_0 r, t)}{r} f_{\mathbf{k}_0}(\vartheta, \varphi).\end{aligned}\quad (70)$$

- * Gestreuter Anteil verhält sich in radialer Richtung wie ungestreuter Anteil (bis auf Abschwächung durch Faktor $1/r$), hat also Form des einlaufenden Wellenpakets.
- * Winkelabhängigkeit des gestreuten Anteils durch Streuamplitude bestimmt.

(Diese beiden Aussagen und die Definition der Streuamplitude (64) sind die wesentlichen Punkte dieses Abschnitts.)

XXXXX Bild-006 XXXXX

2.2.2 Differentieller und totaler Wirkungsquerschnitt

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) = \frac{\text{Anzahl der gestreuten Teilchen pro Raumwinkelelement}}{\text{Anzahl der einlaufenden Teilchen pro Fläche}}. \quad (71)$$

- Das, was Experimentator misst.
- Das, was Theoretiker berechnen muss, um z.B. seine Theorie zu verifizieren, Rückschlüsse auf Potential $V(\mathbf{r})$ zu ziehen, etc.
- Betrachte zunächst kontinuierlichen Teilchenstrahl beschrieben durch einlaufende ebene Welle mit Impuls \mathbf{k} bzw. asymptotisch Lösung der stationären SG (63).
- Anzahl der von ebener Welle beschriebenen einlaufenden Teilchen ist unendlich, daher ‐Teilchen pro Fläche‐ in Definition (71).

- Stromdichte ist

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(\mathbf{r}, t) (\nabla \psi(\mathbf{r}, t)) - (\nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)) \psi(\mathbf{r}, t) \right). \quad (72)$$

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

$$\mathbf{j}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{(2\pi)^3 m}. \quad (73)$$

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

$$\mathbf{j}_{\text{scatter}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m r^2} \left| f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right|^2 \mathbf{e}_r. \quad (74)$$

- Es folgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) = \frac{|\mathbf{j}_{\text{scatter}}(\mathbf{r}, t)| r^2}{|\mathbf{j}_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)|} = \left| f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right|^2. \quad (75)$$

- **Totaler Wirkungsquerschnitt** durch Raumwinkelintegration,

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta, \varphi) = \int d\Omega \left| f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) \right|^2. \quad (76)$$

- Einheit von $d\sigma/d\Omega$ und von σ ist Fläche.
- Anschauliche Interpretation: Wirkungsquerschnitt ist die Fläche (senkrecht zur Einfallsrichtung), in der Teilchen überhaupt bzw. innerhalb eines bestimmten Raumwinkels gestreut werden (*“Mit welcher Fläche muss man Nenner in (71) multiplizieren, um 1 zu erhalten (100%ige Streuung)?”*) ... bzw. Wirkungsquerschnitt ist projizierte Fläche des Targets.

XXXXX Bild-007 XXXXX

- Siehe auch Vorlesungsaufzeichnungen zu “Theoretische Physik 1 – Mathematische Methoden”, Abschnitt 8.2, Diskussion von Streuung und Wirkungsquerschnitten in klassischer Mechanik.
- Erweiterung auf einzelne Teilchen (Wellenpakete) geradlinig möglich:
 - Es muss über Zeit integriert werden, da Teilchen zu frühem Zeitpunkt Quelle verlässt und zu spätem Zeitpunkt Detektor erreicht.
 - Wellenpaket muss breiter als Potential sein, d.h. aus Sicht des Potentials näherungsweise ebene Welle.
 - Siehe z.B. F. Schwabl, “Quantenmechanik (QM I)”, Springer, Abschnitt 18.2.

***** 09. Mai 2017 (6. Vorlesung) *****

2.2.3 Wiederholung: Freie stationäre SG in Kugelkoordinaten

- Lösungen der freien stationären SG

$$\left(\Delta + k^2\right)\psi_n = 0 \quad (77)$$

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

- Eigenfunktionen nicht eindeutig, Linearkombinationen von Eigenfunktionen mit gleicher Energie, d.h. mit gleichem $|\mathbf{k}|$, 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

$$\hat{H}\psi_{klm} = E\psi_{klm} \quad (78)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2\psi_{klm} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{klm} \quad (79)$$

$$\hat{L}_z\psi_{klm} = \hbar m\psi_{klm}. \quad (80)$$

- Rechnung ergibt

$$\psi_{klm}(r, \vartheta, \varphi) = \left(A j_l(kr) + B n_l(kr)\right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (81)$$

- $j_l(kr)$: 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.
- Eigenfunktion durch k , l und m nicht eindeutig ausgezeichnet, zwei linear unabhängige Lösungen.

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

$$\phi(r, \vartheta, \varphi) = \int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} \left(A_{lm}(k) j_l(kr) + B_{lm}(k) n_l(kr)\right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (82)$$

entwickelt werden.

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

$$\phi_k(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} \left(A_{lm} j_l(kr) + B_{lm} n_l(kr)\right) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (83)$$

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

$$e^{+ikz} = \sum_{l=0}^\infty i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos(\vartheta)), \quad (84)$$

wobei

- $z = r \cos(\vartheta)$, damit keine φ -Abhängigkeit, zur Entwicklung tragen nur Kugelflächenfunktionen $Y_{l0}(\vartheta, \varphi)$ bei, die φ -unabhängig sind,
- $Y_{l0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{(2l+1)/4\pi} P_l(\cos(\vartheta))$,
- $P_l(x)$ 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:

$$h_l^{(1)}(x) = j_l(x) + in_l(x) \quad , \quad h_l^{(2)}(x) = (h_l^{(1)}(x))^* = j_l(x) - in_l(x), \quad (85)$$

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

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

2.2.4 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 rotationssymmetrisches Potential, d.h. $V(\mathbf{r}) = V(r)$.
- Betrachte im Folgenden einlaufende Welle in $+z$ -Richtung, $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ mit $\mathbf{k} = (0, 0, k)$, kann wie in Abschnitt 2.2.3 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,

$$\begin{aligned} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= e^{+ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos(\vartheta)) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{1}{2} \left(h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right) P_l(\cos(\vartheta)). \end{aligned} \quad (86)$$

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

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

$$F(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} R_{lm}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (87)$$

geschrieben werden.

- Da 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 (60), wenn man linke Seite immer wieder in rechte Seite

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

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (88)$$

mit zunächst unbestimmten $R_l(r)$ ($(2l+1)$ nicht notwendig, aber praktisch).

– $f_{\mathbf{k}}$ dann ebenfalls φ -unabhängig (sieht man z.B. an (64)),

$$f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) = f_{\mathbf{k}}(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos(\vartheta)) \quad (89)$$

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

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

$$R_l(r) = C \left(h_l^{(2)}(kr) + S_l(E) h_l^{(1)}(kr) \right) \quad (90)$$

– C ist E - und l -unabhängige Konstante, Bestimmung wie folgt:

- * Gleichung (63): $\phi_{\mathbf{k}}$ ist einlaufende ebene Welle $e^{+ikz}/(2\pi)^{3/2}$ (damit Mischung aus ein- und auslaufenden Kugelwellen; siehe (86)) plus auslaufende Kugelwelle.
- * Gleichungen (88) und (90): $\phi_{\mathbf{k}}$ ist Mischung aus ein- und auslaufenden Kugelwellen, einlaufende Kugelwelle hat Vorfaktor C .
- * Vergleich der einlaufenden Kugelwellen liefert $C = 1/2(2\pi)^{3/2}$ (also ist C , wie oben behauptet, E - und l -unabhängig).

– $S_l(E)$ ist E -abhängige Funktion, die Streuprozess für l -te Partialwelle beschreibt.

***** 11. Mai 2017 (7. Vorlesung) *****

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

– Da $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$ kann Eigenfunktion $\phi_{\mathbf{k}}$ von \hat{H} mit Energieeigenwert $E = (\hbar k)^2/2m$ in Eigenfunktionen von \hat{H} mit Energieeigenwert E die gleichzeitig Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{L}}^2$ sind entwickelt werden; dies ist gerade Entwicklung (88), wobei $R_l(r)$ für $r > R$ die Form (90) hat.

→ Nicht nur $\phi_{\mathbf{k}}$ ist Lösung der stationären SG, sondern auch jeder Term in (88).

– Für jede Lösung $\psi(\mathbf{r})$ der stationären SG gilt

$$\oint d\mathbf{A} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0, \quad (91)$$

wobei $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist (Beweis ist Hausaufgabe).

– Aus vorherigen beiden Punkten folgt

$$\left| S_l(E) \right| = 1 \quad (92)$$

(Beweis ist Hausaufgabe).

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

$$S_l(E) = e^{2i\delta_l(E)}. \quad (93)$$

- Einsetzen in (90):

$$R_l(r) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2}} \left(h_l^{(2)}(kr) + e^{+2i\delta_l(E)} h_l^{(1)}(kr) \right) \quad (94)$$

bzw. asymptotisch für $r \rightarrow \infty$

$$R_l(r) = \frac{e^{+i\delta_l(E)}}{(2\pi)^{3/2} 2ikr} \left(e^{+i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} \right), \quad (95)$$

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 1D Streuung spiegelt sich Effekt des Potentials in Phasenverschiebungen $\delta_l(E)$ wieder; ohne Potential, d.h. für $V(r) = 0$, wäre $S_l(E) = 1$ und damit $\delta_l(E)$ Vielfaches von π .
- 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 (63), dann Einsetzen der Entwicklungen (86) und (89) sowie $h_l^{(2)}(x) = (h_l^{(1)}(x))^*$ und $h_l^{(1)}(x) \sim -(i/x)e^{+i(x-l\pi/2)}$,

$$\begin{aligned} \phi_k(r, \vartheta) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{+ikz} + \frac{e^{+ikr}}{r} f_k(\vartheta) \right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} P_l(\cos(\vartheta)) \left(\frac{i^l}{2i} \left(e^{+i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)} \right) + k f_l e^{+ikr} \right). \end{aligned} \quad (96)$$

– $\phi_k(r, \vartheta)$ ausgedrückt durch $\delta_l(E)$: Startpunkt ist (88), dann Einsetzen von (95),

$$\begin{aligned} \phi_k(r, \vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta)) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{kr} P_l(\cos(\vartheta)) \frac{i^l}{2i} e^{+i\delta_l(E)} \left(e^{+i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_l(E))} \right). \end{aligned} \quad (97)$$

– Vergleich liefert

$$f_l = \dots = \frac{e^{+2i\delta_l(E)} - 1}{2ik} = \frac{e^{+i\delta_l(E)} \sin(\delta_l(E))}{k}. \quad (98)$$

- Streuamplitude (89) ausgedrückt durch Streuphasen:

$$f_k(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{+i\delta_l(E)} \sin(\delta_l(E)) P_l(\cos(\vartheta)). \quad (99)$$

- Differentieller Wirkungsquerschnitt (75) ausgedrückt durch Streuphasen:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) &= \left| f_k(\vartheta) \right|^2 = \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{+i(\delta_l(E)-\delta_{l'}(E))} \sin(\delta_l(E)) \sin(\delta_{l'}(E)) P_l(\cos(\vartheta)) P_{l'}(\cos(\vartheta)). \end{aligned} \quad (100)$$

- Totaler Wirkungsquerschnitt (76) ausgedrückt durch Streuphasen:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) = \dots = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2, \quad (101)$$

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

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad (102)$$

mit den Partialwellenbeiträgen

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2, \quad (103)$$

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

- Streuphasen $\delta_l(E) \not\approx 0$ nur für $l \lesssim kR$:
 - 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 Teilchen das Potentialzentrum passiert.
 - Damit Teilchen Potential trifft, muss $d < R$ gelten.
 - Damit $R > d = |\mathbf{L}|/\hbar k \approx l/k$ bzw. $l \lesssim kR$.
- Partialwellenentwicklung vor allem hilfreich, wenn Potential kurzreichweitig, dann kann Streuprozess durch wenige Zahlen bzw. Funktionen $\delta_l(E)$ (oder äquivalent f_l) charakterisiert werden.

2.2.5 Optisches Theorem

- Aus (99) folgt

$$\text{Im}(f_k(\vartheta)) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2 P_l(\cos(\vartheta)) \quad (104)$$

und für $\vartheta = 0$ und unter Verwendung von $P_l(1) = 1$, (102) und (103)

$$\text{Im}(f_k(0)) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E)) \right)^2 = \frac{k}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{k\sigma}{4\pi} \quad (105)$$

bzw.

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f_k(0)) \quad (106)$$

(**optisches Theorem**).

- An der Streuamplitude für $\vartheta = 0$ kann unmittelbar totaler 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.

***** 16. Mai 2017 (8. Vorlesung) *****

2.2.6 Bornsche Näherung für gesamtes Streuproblem

- Ziel (hier und in folgenden Abschnitten): Berechnung der Streuamplitude und von damit zusammenhängenden Größen und Observablen, z.B. von Wirkungsquerschnitten.
- Starte mit Integralgleichung (62):

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'). \quad (107)$$

- Linke Seite kann sukzessive in rechter Seite eingesetzt werden, ergibt eine unendliche Reihe.
- Falls Effekt des Potentials $V(\mathbf{r})$ auf ebene Welle schwach (d.h. rechter Term auf rechter Seite von (107) "klein"), erhält man gute Approximation, wenn man nach wenigen Schritten abbricht, d.h. statt vollem $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ nur ebene Welle $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ rechts einsetzt.
- Sofortiges Abbrechen, d.h. direktes Einsetzen der ebenen Welle $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ in rechter Seite liefert **Bornsche Näherung**,

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \left(\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \right). \quad (108)$$

- Für Streuamplitude (64) entspricht dies

$$\begin{aligned}
f_{\mathbf{k}}(\vartheta, \varphi) &= -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \int d^3 r' e^{-i\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') \approx \\
&\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r' e^{+i(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi))\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') = -\frac{\sqrt{2\pi m}}{\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{k}-\tilde{\mathbf{k}}(k, \vartheta, \varphi)), \quad (109)
\end{aligned}$$

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

- Grobe Abschätzung, wann Bornschen Näherung gut ist:
 - In rechter Seite von (108) muss zweiter Term klein gegenüber erstem Term sein (genau dann ist Effekt des Potentials auf ebene Welle schwach).
 - Potential hat starken Einfluss vor allem in Nähe seines Zentrums, d.h. in Gegend von $\mathbf{r} \approx 0$.
 - Betrachte rotationssymmetrisches Potential $V(\mathbf{r}) = V(r)$ und exemplarisch $\mathbf{r} = 0$ und berechne zweiten Term:

$$\begin{aligned}
\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 r' \frac{e^{+ikr'}}{r'} V(r') e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}'} &= \\
= \frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' e^{+ikr'} V(r') \int_{-1}^{+1} d(\cos(\vartheta)) e^{+ikr' \cos(\vartheta)} &= \\
= \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr' e^{+ikr'} V(r') \sin(kr'), \quad (110)
\end{aligned}$$

d.h. Bornsche Näherung gut, falls

$$\frac{2m}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty dr' e^{+ikr'} V(r') \sin(kr') \right| \ll 1, \quad (111)$$

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

2.2.7 Bornsche Näherung für Partialwellen

- Ist Bornsche Näherung nicht für gesamtes Streuproblem anwendbar, kann sie dennoch für höhere Partialwellen gute Approximation sein.
- Entwicklung ebener Welle in beliebige 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 :

$$e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(kr) \sum_{m=-l}^{+l} \left(Y_{lm}(\Omega_{\mathbf{k}}) \right)^* Y_{lm}(\Omega_{\mathbf{r}}) \quad (112)$$

(kann man zeigen; ist Verallgemeinerung von (86); Spezialfall (86) 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 $m \neq 0$).

- Startpunkt ist (64) (für einlaufende Welle $e^{+ikz}/(2\pi)^{3/2}$ und $V(\mathbf{r}) = V(r)$), dann Einsetzen von (112) und (88):

$$\begin{aligned}
f_k(\vartheta) &= -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\tilde{\mathbf{k}}(k,\vartheta)\mathbf{r}'} V(r') \phi_k(r', \vartheta) = \\
&= -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \int d^3r' 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l j_l(kr') \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}(\Omega_{\tilde{\mathbf{k}}(k,\vartheta)}) \left(Y_{lm}(\Omega_{\mathbf{r}'}) \right)^* V(r') \\
&\quad \sum_{l'=0}^{\infty} i^{l'} (2l'+1) R_{l'}(r') P_{l'}(\cos(\vartheta')) = \dots
\end{aligned} \tag{113}$$

- Verwende

$$\int d\Omega \left(Y_{lm}(\Omega) \right)^* P_l(\cos(\vartheta)) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} \int d\Omega \left(Y_{lm}(\Omega) \right)^* Y_{l0}(\Omega) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} \delta_{ll'} \delta_{m0}. \tag{114}$$

- Fortsetzung von (113):

$$\dots = -\frac{2(2\pi)^{3/2}m}{\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos(\vartheta)) \int_0^{\infty} dr r^2 j_l(kr) V(r) R_l(r) \tag{115}$$

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

- Damit folgt für Partialwellenamplituden aus (89)

$$f_l = -\frac{2(2\pi)^{3/2}m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr r^2 j_l(kr) V(r) R_l(r). \tag{116}$$

- Falls Potential geringen Einfluss auf Partialwelle besitzt, gilt $R_l(r) \approx j_l(kr)/(2\pi)^{3/2}$ (Gleichheit bei $V(r) = 0$; sieht man durch Vergleich von (86) und (88)) und Streuphase $\delta_l \ll 1$, damit kann (98) genähert werden,

$$f_l = \frac{e^{+2i\delta_l(E)} - 1}{2ik} \approx \frac{\delta_l(E)}{k}, \tag{117}$$

woraus

$$\delta_l \approx -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dr r^2 \left(j_l(kr) \right)^2 V(r) \tag{118}$$

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

***** 18. Mai 2017 (9. Vorlesung) *****

- Ersetzen von $R_l(r)$ durch $j_l(kr)/(2\pi)^{3/2}$ entspricht Ersetzen von $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ durch $e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}}/(2\pi)^{3/2}$ im vorausgegangen Abschnitt 2.2.6.
- Bornsche Näherung für l -te Partialwelle gut, wenn $l \gtrsim kR$ (d.h. wenn Partialwelle kaum zum Streuprozess beiträgt; siehe Diskussion am Ende von Abschnitt 2.2.4).

2.2.8 Näherungsfreie Bestimmung von Streuphasen

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

$$\phi_k(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_l(r) P_l(\cos(\vartheta)) \quad (119)$$

(Gleichung (88)).

- Notation:

$$R_l(r) = \begin{cases} R_l^<(r) & \text{falls } r \leq R \\ R_l^>(r) & \text{falls } r \geq R \end{cases} \quad (120)$$

(R ist wie gehabt Reichweite des Potentials).

- Es gilt

$$R_l^>(r) = \frac{1}{2(2\pi)^{3/2}} \left(h_l^{(2)}(kr) + e^{+2i\delta_l(E)} h_l^{(1)}(kr) \right) \quad (121)$$

(Gleichung (94)).

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

$$R_l^<(R) = R_l^>(R) \quad , \quad \left. \frac{dR_l^<(r)}{dr} \right|_{r=R} = \left. \frac{dR_l^>(r)}{dr} \right|_{r=R} . \quad (122)$$

- Zwei Bedingungen, legen nicht nur Streuphase $\delta_l(E)$ fest, sondern auch Normierung von $R_l^>(R)$; diese wurde aber bereits richtig implementiert durch Anpassen an Normierung der einlaufenden Welle (siehe Abschnitt 2.2.4); kombiniere die zwei Bedingungen zu einer Bestimmungsgleichung für $\delta_l(E)$,

$$\left. \frac{d \ln(R_l^<(r))}{dr} \right|_{r=R} = \left. \frac{d \ln(R_l^>(r))}{dr} \right|_{r=R} \quad (123)$$

(“Gleichheit der logarithmischen Ableitung”).

- Verwende Notation $\alpha_l = (d \ln(R_l^<(r))/dr)|_{r=R}$, Einsetzen von (121), geradliniges Umstellen,

$$\cot(\delta_l(E)) = \left. \frac{dn_l(kr)/dr - \alpha_l n_l(kr)}{dj_l(kr)/dr - \alpha_l j_l(kr)} \right|_{r=R} . \quad (124)$$

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

2.2.9 Beispiel: Streuung an undurchdringlicher Kugel

- Potential einer undurchdringlichen Kugel:

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & \text{falls } r \leq R \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (125)$$

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

$$\cot(\delta_l(E)) = \frac{n_l(kR)}{j_l(kR)} . \quad (126)$$

- Für $l = 0$ ergibt sich

$$\delta_0(E) = -kR . \quad (127)$$

- Es tragen nur Partialwellen mit $l \lesssim kR$ bei (siehe Diskussion am Ende von Abschnitt 2.2.4), d.h. für $kR \lesssim 1$ im Wesentlichen nur 0-te Partialwelle (“reine s-Wellen-Streuung”),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vartheta) \approx \frac{(\sin(\delta_0(E)))^2}{k^2} = \frac{(\sin(kR))^2}{k^2} \quad (128)$$

(aus Gleichung (100)), d.h. in diesem Grenzfall ist Streuung isotrop (gleichverteilt in alle Richtungen), und

$$\sigma \approx \frac{4\pi(\sin(\delta_0(E)))^2}{k^2} = \frac{4\pi(\sin(kR))^2}{k^2} . \quad (129)$$

- Für $kR \ll 1$ ergibt sich außerdem

$$\sigma \approx 4\pi R^2 , \quad (130)$$

das Vierfache des klassischen Streuquerschnitts einer undurchdringlichen Kugel.

2.2.10 Resonanzstreuung am sphärischen Potentialtopf

- Potential des sphärischen Potentialtopfs:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{falls } r \leq R \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (131)$$

($V_0 > 0$).

- Lösung im Inneren, d.h. für $r \leq R$, ist (119) mit Notation (120) und

$$R_l^<(r) = A_l j_l(qr) \quad (132)$$

mit $q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$.

- Logarithmische Ableitung ist damit

$$\alpha_l = \left. \frac{d \ln(R_l^{\leq}(r))}{dr} \right|_{r=R} = \frac{j_l'(qR)q}{j_l(qR)}. \quad (133)$$

***** 23. Mai 2017 (10. Vorlesung) *****

- Betrachte im Folgenden $kR \ll 1$, d.h. Spezialfall niedriger Energie.
- (124) kann mit Hilfe von

$$j_l(x) \approx \begin{cases} \frac{x^l}{1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l+1)} \\ \text{falls } x \ll 1 \end{cases}, \quad n_l(x) \approx -\frac{1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l-1)}{x^{l+1}} \quad (134)$$

genähert werden,

$$\begin{aligned} \tan(\delta_l(E)) &= \left. \frac{dj_l(kr)/dr - \alpha_l j_l(kr)}{dn_l(kr)/dr - \alpha_l n_l(kr)} \right|_{r=R} \approx \\ &\approx \frac{(2l+1)(kR)^{2l+1}(l - R\alpha_l)}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l+1))^2(l+1 + R\alpha_l)}. \end{aligned} \quad (135)$$

- Partialwellenbeitrag σ_l zum totalen Wirkungsquerschnitt wird maximal für $\delta_l(E) = (1/2 + n)\pi$ (Gleichung (103)), ist der Fall, wenn rechte Seite von (135) divergiert, d.h. für

$$l+1 + R\alpha_l = 0 \quad (136)$$

(bezeichnet man als **Resonanz-Streuung**; Ähnlichkeiten zu Streuung in 1 Raumdimension in Abschnitt 2.1, dort wurden Resonanzen als Maxima von $S(E)$ definiert).

- Abseits von Resonanzen und für große l ist Partialwellenbeitrag σ_l sehr klein, da $\tan(\delta_l(E)) \propto (kR)^{2l+1}$.
- Betrachte im Folgenden tiefen Potentialtopf (bezüglich gegebenem l), d.h. $qR \gg 1, l$; benutze 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 (133) und (136),

$$\begin{aligned} l+1 = -R\alpha_l &= -qR \frac{j_l'(qR)}{j_l(qR)} \sim qR \frac{j_{l+1}(qR)}{j_l(qR)} = -qR \cot(qR - l\pi/2) \\ \rightarrow \cot(qR - l\pi/2) &= -\frac{l+1}{qR} \\ \rightarrow qR - l\pi/2 &\approx \frac{l+1}{qR} + (1/2 + n)\pi. \end{aligned} \quad (137)$$

- (137) ist Bestimmungsgleichung für Resonanzenergien:

$$- E_R = (\hbar q)^2/2m - V_0 \text{ mit } q, \text{ das (137) erfüllt.}$$

- (137) 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).
- 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.
- Betrachtungen dieses Abschnitts geradlinig auf andere Potentiale übertragbar, tiefer sphärischer Potentialtopf bei niedriger Energie der einfallenden Teilchen nur deshalb gewählt, weil analytische Rechnungen möglich.
- $\delta_l(E)$ in Nähe einer Resonanzenergie E_R :

- Zunächst Entwicklung von α_l :

$$R\alpha_l(E) = \underbrace{R\alpha_l(E_R)}_{=-(l+1)} + R \underbrace{\frac{d\alpha_l(E)}{dE}}_{=-\alpha'_l(E_R)} \Big|_{E=E_R} (E - E_R) + \mathcal{O}((E - E_R)^2). \quad (138)$$

- Einsetzen in (135):

$$\begin{aligned} \tan(\delta_l(E)) &\approx \frac{(2l+1)(kR)^{2l+1}(l - R\alpha_l)}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l+1))^2(l+1 + R\alpha_l)} = \\ &= \frac{(kR)^{2l+1}}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l-1))^2 R\alpha'_l(E_R)(E - E_R)} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) = \\ &= -\frac{\gamma(kR)^{2l+1}}{E - E_R} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) \end{aligned} \quad (139)$$

mit

$$\gamma = -\frac{1}{(1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l-1))^2 R\alpha'_l(E_R)} = \text{const.} \quad (140)$$

XXXXX Bild-008 XXXXX

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

$$\begin{aligned} \sigma_l &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \left(\sin(\delta_l(E))\right)^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\tan(\delta_l(E))^2}{1 + \tan(\delta_l(E))^2} \approx \\ &\approx \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{(\gamma(kR)^{2l+1})^2}{(E - E_R)^2 + (\gamma(kR)^{2l+1})^2} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) \end{aligned} \quad (141)$$

((103) wurde als Startpunkt verwendet).

- Streuamplitude f_l in Nähe einer Resonanzenergie E_R :

$$\begin{aligned} f_l &= \frac{e^{+i\delta_l(E)} \sin(\delta_l(E))}{k} = \frac{\tan(\delta_l(E))}{k(1 - i \tan(\delta_l(E)))} \approx \\ &\approx \frac{-\gamma(kR)^{2l+1}}{k(E - E_R + i\gamma(kR)^{2l+1})} \left(1 + \mathcal{O}(E - E_R)\right) \end{aligned} \quad (142)$$

((98) wurde als Startpunkt verwendet).

- Starke Ähnlichkeiten zu den in 1 Raumdimension diskutierten Resonanzen, wenn man $\Gamma/2 = \gamma(kR)^{2l+1} \approx \text{const}$ definiert:

- Streuphase (139) entspricht (41):

$$\delta(E) \approx \arctan\left(\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)\right). \quad (143)$$

- Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt (141) entspricht (35):

$$|S(E)|^2 = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (144)$$

- Streuamplitude (142) entspricht (34):

$$S(E) \approx (-1)^n e^{-2ika} \frac{i\Gamma/2}{E - E_R + i\Gamma/2}. \quad (145)$$

Diskussion aus Abschnitt 2.1 im Wesentlichen auch hier in 3 Raumdimensionen gültig.

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

XXXXX Bild-009 XXXXX

- Verschiedene Möglichkeiten zur Identifikation einer Resonanz (sowohl Energie/Masse E_R als auch Breite/inverse Lebensdauer Γ):
 - Durch maximalen Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt (Gleichung (141))
→ Experimentator.
 - Durch schnelle Veränderung der Streuphase von ≈ 0 zu $\approx +\pi$ (Gleichung (139))
→ Theoretiker.
 - Durch Pol der Streuamplitude in der komplexen Energieebene (entspricht “Pol in der S -Matrix bzw. der T -Matrix”); (Gleichung (142))
→ Theoretiker.

3 Relativistische QM

3.1 Spezielle Relativitätstheorie

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

3.1.1 “Herleitung”, Lorentz-Transformationen

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

$$s^2 \equiv \underbrace{(x^0 - y^0)^2}_{\equiv s^0} - \underbrace{(x^1 - y^1)^2}_{\equiv s^1} - \underbrace{(x^2 - y^2)^2}_{\equiv s^2} - \underbrace{(x^3 - y^3)^2}_{\equiv s^3}. \quad (146)$$

- Sind x^μ und y^μ durch Lichtsignal verbunden, gilt $s^2 = 0$.
- Experimente:
 - Licht breitet sich in allen Inertialsystemen mit der gleicher 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?

- Homogenität von Raum und Zeit schränkt auf inhomogene lineare Transformationen ein, $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu$.
- $s^2 = s'^2$ führt auf

$$s'^\mu \eta_{\mu\nu} s'^\nu = \Lambda^\mu_\alpha s^\alpha \eta_{\mu\nu} \Lambda^\nu_\beta s^\beta; \quad (147)$$

da s^μ beliebig sein kann, folgt

$$\underbrace{\Lambda^\mu_\alpha}_{=(\Lambda^T)_\alpha^\mu} \eta_{\mu\nu} \Lambda^\nu_\beta = \eta_{\alpha\beta} \rightarrow \Lambda^T \eta \Lambda = \eta \quad (\text{Matrixform}) \quad (148)$$

(“ Λ ist also eine Art orthogonale Transformation.”); Transformationen Λ , die (148) 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:**

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix}, \quad (149)$$

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):**

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & \pm\gamma\beta & 0 & 0 \\ \pm\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv v, \quad \gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1-v^2}}, \quad (150)$$

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:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}. \quad (151)$$

– (4) Parität (Raumspiegelung):

$$\Lambda = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (152)$$

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

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

$$x'_\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu. \quad (153)$$

- Naturgesetze in allen Inertialsystemen gleich; diese sind durch Poincare-Transformationen verbunden.
→ Für relativistische QM Verallgemeinerungen der SG benötigt, die invariant unter Poincare-Transformationen sind.

3.1.2 Energie und Impuls relativistischer Teilchen

- Weltlinie eines Teilchens in beliebigem 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:

$$\tau = \int_{t_i}^{t_f} dt \sqrt{1 - \mathbf{v}^2} \quad (154)$$

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

***** 1. Juni 2017 (12. Vorlesung) *****

- Vierergeschwindigkeit:

$$u^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{d\tau} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1 - \mathbf{v}^2}}}_{=\gamma} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}. \quad (155)$$

- Viererimpuls: $p^\mu \equiv mu^\mu$.
 - $p^0 = mu^0 = m\gamma = m + m\mathbf{v}^2/2 + \mathcal{O}((\mathbf{v}^2)^2)$; legt Interpretation als Gesamtenergie nahe, also $p^0 = E$.
 - $\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v} = m\mathbf{v} + \mathcal{O}(|\mathbf{v}|^3)$; entspricht also 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' : $p'^2 = m^2$.
 - Auf Grund von $p^2 = p'^2$ $E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2$ (relativistische Energie-Impuls-Beziehung).

3.2 Klein-Gordon-Gleichung

- Ziel: Aufstellen einer relativistischen Version der SG.
- (Nicht-relativistische) SG:
 - Starte mit nicht-relativistischer 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

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{1}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right)\psi(\mathbf{r}, t). \quad (156)$$

- Analoges Vorgehen im relativistischen Fall:
 - Relativistische Energie-Impuls-Beziehung: $E = \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}$.
 - Korrespondenzprinzip:
 - $i\partial_t\phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{m^2 - \Delta}\phi(\mathbf{r}, t); \quad (157)$
- Probleme verursachen Ableitungen Δ unter Wurzel; Entwicklung führt zu unendlich hohen Ableitungen; Gleichung daher ungeeignet.

- Weiterer Versuch:
 - Starte mit $E^2 = m^2 + \mathbf{p}^2$.
 - Korrespondenzprinzip liefert sogenannte **Klein-Gordon-Gleichung** (KGG):
 - $-\partial_t^2\phi(\mathbf{r}, t) = (m^2 - \Delta)\phi(\mathbf{r}, t) \quad (158)$

bzw.

$$\left(\square + m^2 \right)\phi(x) = 0 \quad (159)$$

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

- KGG ist invariant unter Lorentz-Transformationen:
 - * $\partial^\mu\partial_\mu = \partial'^\mu\partial'_\mu$.
 - * $\phi = \phi'$ (Transformationsverhalten eines Skalarfelds, muss man fordern).

* Damit

$$\left(\square' + m^2\right)\phi' = 0. \quad (160)$$

• Lösung der KGG:

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

$$\left(\square + m^2\right)\phi(x) = \left(-k^\mu k_\mu + m^2\right)\phi(x) = 0, \quad (161)$$

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; $k^0 = \pm\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$.
→ Damit negative Energien erlaubt ...? (1. Problem der KGG)

– Allgemeine Lösung der KGG durch lineare Superposition:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \int d^3k \left(N_+(\mathbf{k}) e^{-i(+E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} + N_-(\mathbf{k}) e^{-i(-E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \right) = \\ &= \int d^3k \left(N_+(\mathbf{k}) e^{-i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} + N_-(-\mathbf{k}) e^{+i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \right) = \dots \end{aligned} \quad (162)$$

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

$$N_+(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} a(\mathbf{k}) \quad , \quad N_-(-\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} b^*(\mathbf{k}) \quad (163)$$

führt auf (Fortsetzung von (162))

$$\dots = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} \left(a(\mathbf{k}) e^{-ikx} + b^*(\mathbf{k}) e^{+ikx} \right) \quad (164)$$

(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.

– Lösung der KGG eher von geringer Bedeutung für relativistische QM, sehr wichtig für Quantenfeldtheorie (KGG ist dann klassische Feldgleichung, analog z.B. zu Maxwell-Gleichungen).

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

$$j^\mu \equiv (\rho, \mathbf{j}) \quad , \quad \rho \equiv +i \left(\phi^* (\partial_t \phi) - (\partial_t \phi^*) \phi \right) \quad , \quad \mathbf{j} \equiv -i \left(\phi^* (\nabla \phi) - (\nabla \phi^*) \phi \right). \quad (165)$$

– Beweis:

$$\begin{aligned} \left(\square + m^2\right)\phi &= 0 \\ \rightarrow \left(\square + m^2\right)\phi^* &= 0 \\ 0 &= \phi^* \left(\square + m^2\right)\phi - \phi \left(\square + m^2\right)\phi^* = \phi^* \square \phi - \phi \square \phi^* = \\ &= \partial_\mu \left(\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^* \right) = -i \partial_\mu j^\mu. \end{aligned} \quad (166)$$

- \mathbf{j} hat gleiche Form wie nicht-relativistische Wahrscheinlichkeitsstromdichte (28).
- 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 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)

- Zusammenfassung: KGG führt zu Problemen,
 - (1) negative Energien,
 - (2) keine Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion (Ursache: KGG ist DGL 2. Ordnung),
 - (3) Teilchenerzeugung/-vernichtung außerdem nicht beschreibbar (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 skalaren Teilchen entsprechen (z.B. Higgs-Boson); ρ ist nicht Wahrscheinlichkeitsdichte, sondern elektrische Ladungsdichte.

3.3 Dirac-Gleichung

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

$$i\partial_t\psi(x) = H\psi(x), \tag{167}$$

wobei H linear in räumlichen Ableitungen ∂_j ist.

- Ansatz:

$$i\partial_0\psi(x) = \left(\sum_j \alpha_j(-i\partial_j) + \beta m \right) \psi(x). \tag{168}$$

- Bestimmung der Koeffizienten α_j, β :

- Ableiten mit $i\partial_0$ und Einsetzen von (168):

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

$$-\left(\frac{1}{2}\sum_{j\neq k}(\alpha_j\alpha_k+\alpha_k\alpha_j)\partial_j\partial_k+im\sum_j(\alpha_j\beta+\beta\alpha_j)\partial_j\right)\psi(x). \quad (169)$$

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

$$\begin{aligned} (\hat{p}^0)^2|\psi\rangle &= \left(\sum_j\alpha_j^2(\hat{p}^j)^2+\beta^2m^2\right)|\psi\rangle \\ &+ \left(\frac{1}{2}\sum_{j\neq k}(\alpha_j\alpha_k+\alpha_k\alpha_j)\hat{p}^j\hat{p}^k+m\sum_j(\alpha_j\beta+\beta\alpha_j)\hat{p}^j\right)|\psi\rangle, \end{aligned} \quad (170)$$

sollte relativistischer Energie-Impuls-Beziehung entsprechen; daher

$$\alpha_j^2 = \beta^2 = 1, \quad \alpha_j\alpha_k + \alpha_k\alpha_j = 0 \quad \text{für } j \neq k, \quad \alpha_j\beta + \beta\alpha_j = 0; \quad (171)$$

Bedingungen können nicht von vertauschbaren “Zahlen” erfüllt werden; verwende daher Matrizen α_j und β .

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

– Weitere Eigenschaften:

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

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

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

* Tr = Summe der Eigenwerte, daher gerade Dimension von α_j, β .

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

$$\alpha_j \equiv \begin{pmatrix} 0 & +\sigma_j \\ +\sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (172)$$

mit Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad (173)$$

Wahl (172) (“Standarddarstellung” oder “Dirac-Darstellung”) nicht eindeutig.

• Gleichung (168) mit den Matrizen (172) 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:

$$\gamma^0 \equiv \beta, \quad \gamma^j \equiv \beta\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & +\sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}. \quad (174)$$

– Eigenschaften der γ -Matrizen:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu}, \quad \gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger, \quad \gamma^j = -(\gamma^j)^\dagger. \quad (175)$$

- Multiplikation von (168) mit β führt auf

$$i\beta\partial_0\psi(x) = \left(\sum_j \beta\alpha_j(-i\partial_j) + m \right) \psi(x) \quad (176)$$

bzw.

$$\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m \right) \psi(x) = 0 \quad (177)$$

(die γ -Matrizen Verändern sich nicht bei LT, auch wenn sie Viererindex tragen; mehr in Abschnitt 3.3.4).

***** 8. Juni 2017 (14. Vorlesung) *****

- Lösung der DG:

- “DG enthält KGG”, d.h. ein Spinor ψ , der DG erfüllt, muss auch KGG erfüllen (DG wurde so konstruiert; siehe (169) und (171)).

- Benutze daher Ansatz

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{k}) \\ \chi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} e^{\mp i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})}, \quad E(\mathbf{k}) = \sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2} \quad (178)$$

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

- Einsetzen des Ansatzes in DG (177):

$$(E(\mathbf{k}) \mp m)\varphi(\mathbf{k}) - \vec{\sigma}\mathbf{k}\chi(\mathbf{k}) = 0 \quad (179)$$

$$(E(\mathbf{k}) \pm m)\chi(\mathbf{k}) - \vec{\sigma}\mathbf{k}\varphi(\mathbf{k}) = 0. \quad (180)$$

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

- * Umstellen von (180):

$$\chi(\mathbf{k}) = \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k}) + m} \varphi(\mathbf{k}). \quad (181)$$

- * Einsetzen in (179):

$$\underbrace{\left(E(\mathbf{k}) - m - \frac{(\vec{\sigma}\mathbf{k})^2}{E(\mathbf{k}) + m} \right)}_{=0} \varphi(\mathbf{k}) = 0, \quad (182)$$

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 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 3.3.2).

- * Spinoren positiver Energie:

$$\psi_{1,2}^+(x) = u_{1,2}(\mathbf{k}) e^{-i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \quad (183)$$

$$u_1(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{k}) \\ \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k}) + m} \varphi_1(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{+k^3}{E(\mathbf{k}) + m} \\ \frac{+k^1 + ik^2}{E(\mathbf{k}) + m} \end{pmatrix} \quad (184)$$

$$u_2(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \varphi_2(\mathbf{k}) \\ \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\varphi_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{+k^1-ik^2}{E(\mathbf{k})+m} \\ \frac{-k^3}{E(\mathbf{k})+m} \end{pmatrix}. \quad (185)$$

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

* Umstellen von (179):

$$\varphi(\mathbf{k}) = \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\chi(\mathbf{k}). \quad (186)$$

* Einsetzen in (180):

$$\underbrace{\left(E(\mathbf{k}) - m - \frac{(\vec{\sigma}\mathbf{k})^2}{E(\mathbf{k})+m} \right)}_{=0} \chi(\mathbf{k}) = 0, \quad (187)$$

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

* Spinoren negativer Energie:

$$\psi_{1,2}^-(x) = v_{1,2}(\mathbf{k})e^{+i(E(\mathbf{k})t-\mathbf{k}\mathbf{x})} \quad (188)$$

$$v_1(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\chi_1(\mathbf{k}) \\ \chi_1(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \frac{+k^1-ik^2}{E(\mathbf{k})+m} \\ \frac{-k^3}{E(\mathbf{k})+m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (189)$$

$$v_2(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma}\mathbf{k}}{E(\mathbf{k})+m}\chi_2(\mathbf{k}) \\ \chi_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \frac{+k^3}{E(\mathbf{k})+m} \\ \frac{+k^1+ik^2}{E(\mathbf{k})+m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (190)$$

– Normierung $N = \sqrt{E(\mathbf{k})+m}$ (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 obere beiden Komponenten, für negative Energien untere beiden Komponenten.

– Allgemeine Lösung der DG durch lineare Superposition:

$$\psi(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} \sum_{r=1,2} \left(b_r(\mathbf{k})u_r(\mathbf{k})e^{-ikx} + d_r^*(\mathbf{k})v_r(\mathbf{k})e^{+ikx} \right) \quad (191)$$

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

- Es existiert Kontinuitätsgleichung $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ 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. DG ist diesbezüglich KG überlegen.
- Ausblick: ψ beschreibt nicht die Wellenfunktion eines einzelnen Teilchens sondern im Rahmen der Quantenfeldtheorie ein Feld, dessen Anregungsquanten fermionischen Spin-1/2-Teilchen entsprechen (z.B. Elektronen, Quarks).

3.3.1 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 selben Zustand sein.
 - Vakuum: Alle negativen Energieniveaus sind besetzt, alle positiven unbesetzt.
 - Einzelnes Elektron mit Impuls \mathbf{k} :
Energieniveau $+E(\mathbf{k}) = +\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ ist zusätzlich besetzt.
 - Einzelnes Positron mit Impuls \mathbf{k} :
Energieniveau $-E(\mathbf{k}) = -\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ ist nicht besetzt (“Loch” im Dirac-See erhöht Gesamtenergie, hat also positive Energie; Ladung des Lochs hat umgekehrtes Vorzeichen, wie Ladung des Elektrons; Loch beschreibt also Antiteilchen).
 - Elektron-Positron-Paarerzeugung: Elektron mit negativer Energie wird auf positives Energieniveau gehoben (dafür minimal notwendige Energie: $2m$).
 - Dirac-See erklärt Existenz von Antiteilchen.
 - Betrachtungsweise z.B. in Festkörpertheorie erfolgreich; scheitert jedoch für Bosonen.

XXXXX Bild-010 XXXXX

3.3.2 Spin

- DG beschreibt freies Teilchen, also rotationsinvariantes System.
→ Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} (Summe aus Bahndrehimpulsen und Spins) ist Erhaltungsgröße.
- Verwendung der Pauli-Matrizen als Bausteine der γ -Matrizen und Existenz von jeweils zwei Lösungen mit gleichem Impuls sowohl für Teilchen als auch Antiteilchen legt nahe, dass DG Teilchen mit Spin 1/2 beschreibt.
- Erwartung: Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ ist keine Erhaltungsgröße,

$$[\mathbf{L}, H] = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}, \vec{\alpha}\mathbf{p} + \beta m] = [\mathbf{r}, \vec{\alpha}\mathbf{p}] \times \mathbf{p} = i\vec{\alpha} \times \mathbf{p}, \quad (192)$$

Erwartung damit bestätigt.

***** 13. Juni 2017 (15. Vorlesung) *****

- Gesucht: Spinoperator \mathbf{S} , muss

$$[\mathbf{J}, H] = 0, \quad \mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (193)$$

erfüllen.

- Drehimpulse und Spins erfüllen Drehimpulsalgebra, z.B. $[S_j, S_k] = i\epsilon_{jkl}S_l$; Drehimpulsalgebra wird von Pauli-Matrizen erfüllt, $[\sigma_j/2, \sigma_k/2] = i\epsilon_{jkl}\sigma_l/2$.
- Versuch:

$$\mathbf{S} \equiv \frac{1}{2}\vec{\Sigma} \quad , \quad \vec{\Sigma} \equiv \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3\vec{\alpha} = -i\gamma^1\gamma^2\gamma^3\vec{\gamma}. \quad (194)$$

- Es folgt

$$[S_j, H] = \frac{1}{2}[\Sigma_j, \vec{\alpha}\mathbf{p} + \beta m] = \frac{1}{2}[\Sigma_j, \alpha_k]p^k = i\epsilon_{jkl}p^k\alpha_l = -i(\vec{\alpha} \times \mathbf{p})_j, \quad (195)$$

wobei $[\Sigma_j, \alpha_k] = 2i\epsilon_{jkl}\alpha_l$ und $[\Sigma_j, \beta] = 0$ verwendet wurde; (193) erfüllt, \mathbf{S} scheint damit der Spinoperator zu sein.

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

$$\mathbf{S}^2 = \frac{1}{4}\vec{\Sigma}^2 = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (196)$$

sind $3/4$, damit $s = 1/2$; DG beschreibt also Fermionen mit Spin $1/2$.

- Spineinstellung der Lösungen der DG:

- (195) zeigt, dass nur Spinkomponente parallel zum Impuls erhalten ist; wähle daher o.B.d.A. $\mathbf{p} = (0, 0, p^3)$ und betrachte S_3 .
- Teilchen (siehe (183)):

$$S_3\psi_1^+(x) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{+k^3}{E(\mathbf{k})+m} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} = +\frac{1}{2}\psi_1^+(x) \quad (197)$$

$$S_3\psi_2^+(x) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-k^3}{E(\mathbf{k})+m} \end{pmatrix} e^{-i(E(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\mathbf{x})} = -\frac{1}{2}\psi_2^+(x). \quad (198)$$

- Antiteilchen (siehe (188)) analog,

$$S_3\psi_1^-(x) = -\frac{1}{2}\psi_1^-(x) \quad , \quad S_3\psi_2^-(x) = +\frac{1}{2}\psi_2^-(x). \quad (199)$$

3.3.3 Lorentz-Kovarianz der DG, Transformationsverhalten von Spinoren

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

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0 \quad , \quad (i\gamma^\mu\partial'_\mu - m)\psi' = 0 \quad (200)$$

müssen also gleiche Information beinhalten, d.h. durch LTs ineinander überführbar sein; legt Transformationsverhalten von Spinoren unter LTs fest.

- Spinoren müssen auf Grund der Linearität der DG linear transformieren, d.h.

$$\psi \rightarrow \psi' \equiv S(\Lambda)\psi.$$

- Gesucht: 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 (200):

$$0 = \left(i\gamma^\nu \partial'_\nu - m \right) \psi' = \left(i\gamma^\nu \partial'_\nu - m \right) S(\Lambda)\psi. \quad (201)$$

- Linke Gleichung in (200):

$$0 = \left(i\gamma^\mu \partial_\mu - m \right) \psi = \left(i\gamma^\mu \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu - m \right) \psi; \quad (202)$$

multipliziere mit $S(\Lambda)$, um mit “rechter Gleichung” vergleichen zu können,

$$\begin{aligned} 0 &= S(\Lambda) \left(i\gamma^\mu \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu - m \right) S^{-1}(\Lambda) S(\Lambda)\psi(x) = \\ &= \left(iS(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu - m \right) S(\Lambda)\psi(x). \end{aligned} \quad (203)$$

- Vergleich von (201) und (203) ergibt die Bestimmungsgleichung für $S(\Lambda)$,

$$\gamma^\nu = S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu. \quad (204)$$

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

$$S(\Lambda) = 1 - \frac{i}{4} \epsilon^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \quad , \quad \sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]. \quad (205)$$

- Endliche LTs können aus infinitesimalen zusammengesetzt werden,

$$S(\Lambda) = \exp \left(-\frac{i}{4} \epsilon^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \right) \quad (206)$$

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

***** 20. Juni 2017 (16. Vorlesung) *****

3.3.4 Bilineare Kovarianten

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

3.3.5 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,

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \quad (207)$$

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

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

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{1}{2m} \left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (208)$$

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

$$\left(i\gamma^\mu \left(\partial_\mu + ieA_\mu(x) \right) - m \right) \psi(x) = 0 \quad (209)$$

bzw.

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\sum_j \alpha_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) + \beta m + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (210)$$

- Lösen dieser Gleichung z.B. für Coulomb-Potential $A^\mu = (-Ze/r, 0, 0, 0)$ liefert für $Z = 1$ relativistische Korrekturen für das Wasserstoffatom (“Feinstruktur”); Rechnung z.B. in F. Schwabl, “Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)”, Springer, Abschnitt 8.2.

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

- Studiere nicht-relativistischen Grenzfall der DG mit em Feld, Gleichung (209) bzw. (210); muss SG mit em Feld ergeben, Gleichung (208), die zusätzlich Spin enthält.
- Betrachte Lösungen mit positiver Energie, d.h. Teilchen (Behandlung von Antiteilchen analog).
- Splitte DG (210) 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):

$$i\partial_t\varphi(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \chi(\mathbf{r}, t) + m\varphi(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t)\varphi(\mathbf{r}, t) \quad (211)$$

$$i\partial_t\chi(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \varphi(\mathbf{r}, t) - m\chi(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t)\chi(\mathbf{r}, t). \quad (212)$$

- Im nicht-relativistischen Grenzfall ist m (bzw. mc^2) die größte im System vorhandene Energie; Lösung wird sich 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 stark oszillierenden Anteil der Lösung ab, $\psi(x) = (\varphi(x), \chi(x)) \equiv e^{-imt}(\tilde{\varphi}(x), \tilde{\chi}(x))$,

$$i\partial_t \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t) \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \quad (213)$$

$$i\partial_t \tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) = \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) - 2m\tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t) \tilde{\chi}(\mathbf{r}, t). \quad (214)$$

- Da m größte im System vorhandene Energie ist, kann in (214) $i\partial_t \tilde{\chi}$ und $e\phi \tilde{\chi}$ gegenüber $2m\tilde{\chi}$ vernachlässigt werden,

$$\tilde{\chi}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \quad (215)$$

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

- Einsetzen von (215) in (213) und Umbenennen $\psi = (\psi_1, \psi_2) \equiv \tilde{\varphi}$,

$$\begin{aligned} i\partial_t \psi(\mathbf{r}, t) &= \left(\frac{1}{2m} \left(\sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \right)^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= \left(\frac{1}{2m} \left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \frac{e}{2m} \vec{\sigma} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + e\phi(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (216)$$

wobei

$$\left(\sum_j \sigma_j \left(-i\partial_j - eA^j(\mathbf{r}, t) \right) \right)^2 = \left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - e\vec{\sigma} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (217)$$

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

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

$$\left(-i\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 = \left(-i\nabla - \frac{e}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 = \mathbf{p}^2 - e\mathbf{L}\mathbf{B} + e^2(\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \quad (218)$$

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

- Damit wird (216) zu

$$i\partial_t\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\mathbf{B} + \frac{e^2}{2m}(\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + e\phi(\mathbf{r}, t) \right)\psi(\mathbf{r}, t). \quad (219)$$

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

– Magnetisches Moment:

$$\vec{\mu} \equiv \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + g\mathbf{S}) \quad (220)$$

mit

$$\vec{\mu}_{\text{Bahn}} \equiv \frac{e}{2m}\mathbf{L} \quad , \quad \vec{\mu}_{\text{Spin}} \equiv \frac{e}{2m}g\mathbf{S}, \quad (221)$$

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, DG erklärt also gyromagnetischen Faktor des Elektrons.

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

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

4.1 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 $a \in G$ $a \circ e = e \circ a = a$ 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.
- **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 Verknüpfung “Addition” (Abelsche Gruppe).
 - Rotationsmatrizen in 2 Dimensionen mit Verknüpfung “Matrixmultiplikation” (Abelsche Gruppe).
 - Rotationsmatrizen in 3 Dimensionen mit Verknüpfung “Matrixmultiplikation” (nicht-Abelsche Gruppe).
- Symmetrien bzw. Symmetrieoperationen lassen sich i.d.R. durch Gruppen beschreiben, z.B. Rotationssymmetrie durch die eben genannten Gruppen der Rotationen in 2 oder 3 Dimensionen.

4.2 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; keine strenge Definition, Verständnis anhand von Beispielen.

4.2.1 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 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).
 - $\det(R) = \pm 1$ damit erfüllt (kann man zeigen).
 - $\det(R) = 1$ also keine “zusätzliche Bedingung”, die Anzahl der Parameter reduziert, schließt lediglich Spiegelungen aus.
- Rotationsmatrizen in 3 Dimensionen bzw. $SO(3)$ -Matrizen werden durch 3 kontinuierliche Parameter beschrieben (9 Matrixeinträge, 6 Bedingungen).

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

$$R_x(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & +\cos(\alpha) & +\sin(\alpha) \\ 0 & -\sin(\alpha) & +\cos(\alpha) \end{pmatrix} \quad (222)$$

$$R_y(\alpha) = \begin{pmatrix} +\cos(\alpha) & 0 & -\sin(\alpha) \\ 0 & 1 & 0 \\ +\sin(\alpha) & 0 & +\cos(\alpha) \end{pmatrix} \quad (223)$$

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} +\cos(\alpha) & +\sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & +\cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (224)$$

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

$$R_x(\alpha) = 1 + i\alpha J_x \quad , \quad J_x \equiv -i \left. \frac{dR_x(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (225)$$

$$R_y(\alpha) = 1 + i\alpha J_y \quad , \quad J_y \equiv -i \left. \frac{dR_y(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (226)$$

$$R_z(\alpha) = 1 + i\alpha J_z \quad , \quad J_z \equiv -i \left. \frac{dR_z(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = -i \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (227)$$

- J_x, J_y und J_z nennt man **Erzeugende** (Englisch: **Generators**).
 - J_x, J_y und J_z linear unabhängig; daher bilden infinitesimale Drehwinkel um Koordinatenachsen geeignete mögliche Wahl der 3 Parameter, die infinitesimale SO(3)-Matrizen beschreiben.
 - Wahl der 3 Parameter und der zugehörigen Erzeugenden nicht eindeutig.
- Interessant vor allem: “Kann man zwei Rotationen vertauschen? Bzw. was passiert, wenn man zwei Rotationen in umgekehrter Reihenfolge ausführt?”

- Antwort charakterisiert Struktur der Lie-Gruppe SO(3).
- Z.B.

$$\begin{aligned} R_x(\alpha)R_y(\alpha) - R_y(\alpha)R_x(\alpha) &= \alpha^2(J_x J_y - J_y J_x) + \mathcal{O}(\alpha^3) = \\ &= \alpha^2[J_x, J_y] + \mathcal{O}(\alpha^3), \end{aligned} \quad (228)$$

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

- Man kann leicht

$$[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl}J_l \quad (229)$$

nachrechnen, d.h. Erzeugende der SO(3)-Matrizen erfüllen Drehimpulsalgebra.

- Anschaulich: Rotiert man einen Vektor zunächst um x -Achse, dann um y -Achse ... und den gleichen Vektor zunächst um y -Achse, dann um x -Achse ... entspricht die Differenz beider Ergebnisse einer Rotation um z -Achse.

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

$$R(\vec{\alpha}) = e^{+i\alpha_j J_j} \quad (230)$$

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

***** 27. Juni 2017 (18. Vorlesung) *****

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

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

- Diese Matrizen bilden 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).
- Lediglich $|\det(R)| = 1$ damit erfüllt (kann man zeigen).
- $\det(R) = 1$ also “zusätzliche Bedingung”, die Anzahl der Parameter um 1 reduziert.

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

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

$$R_x(\alpha) = 1 + i\alpha J_x \quad , \quad J_x \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_x}{2} \quad (231)$$

$$R_y(\alpha) = 1 + i\alpha J_y \quad , \quad J_y \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_y}{2} \quad (232)$$

$$R_z(\alpha) = 1 + i\alpha J_z \quad , \quad J_z \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_z}{2} \quad (233)$$

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

- Man kann leicht

$$[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl} J_l \quad (234)$$

nachrechnen, d.h. Erzeugende der SU(2)-Matrizen erfüllen ebenfalls Drehimpulsalgebra.

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

$$R(\vec{\alpha}) = e^{+i\alpha_j J_j} \quad (235)$$

geschrieben werden, d.h. analog zu (230) durch Drehwinkel $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ und Erzeugende ausgedrückt werden.

4.2.3 Gruppe versus Algebra

- (229) und (234) nennt man **Algebra** oder **Lie-Algebra**.
- Gruppen SO(3) und SU(2) haben dieselbe Algebra (Drehimpulsalgebra).
- Grundlegende mathematische Struktur und einige wichtige Eigenschaften werden durch Algebra festgelegt, SO(3)-Matrizen und SU(2)-Matrizen verhalten sich daher sehr ähnlich.
- Weitere Darstellung der Drehimpulsalgebra (ein Satz von Erzeugenden, angegeben in Form mathematischer Objekte, die Drehimpulsalgebra erfüllen) ist

$$J_j \equiv \hat{L}_j \quad , \quad \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (236)$$

- Durch Exponentieren einer Darstellungen der Drehimpulsalgebra gemäß $e^{+i\alpha_j J_j}$ erhält man Darstellung der zugehörigen Gruppe; solche Gruppendarstellungen wirken auf unterschiedliche Objekte, 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 (236) auf Zustände $|\psi\rangle$, bzw. nach Anwenden des Korrespondenzprinzips auf Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r})$.

- Identische Algebra dieser drei Gruppendarstellungen garantiert für Objekte auf die sie wirken konsistentes und sinnvolles Transformationsverhalten bezüglich Rotationen:
 - Für SO(3)-Matrizen offensichtlich (SO(3)-Matrizen beschreiben Rotationen 3-komponentiger Vektoren; Drehimpulsalgebra wurde durch Analyse von SO(3)-Matrizen gefunden).
 - $e^{+i\alpha_j \hat{L}_j}$, d.h. Exponentieren von Drehimpulsoperatoren:
 - * Rotation einer Wellenfunktion kann durch Drehimpulsoperatoren geschrieben werden,

$$R(\vec{\alpha})\left(\psi(\mathbf{r})\right) = e^{+i\alpha_j L_j} \psi(\mathbf{r}) = \psi(R(\vec{\alpha})\mathbf{r}) \quad (237)$$
 mit $L_j = \epsilon_{jkl} r_k (-i\partial_l)$ (kann man zeigen).
 - * Nachweis anhand eines Beispiels, Rotation um z -Achse:

$$\begin{aligned} R(0, 0, \alpha)\left(\psi(\mathbf{r})\right) &= e^{+i\alpha L_z} \psi(\mathbf{r}) = e^{+i\alpha(-i\partial_\varphi)} \psi(r, \vartheta, \varphi) = \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\alpha^j}{j!} \frac{\partial^j \psi}{\partial \varphi} (r, \vartheta, \varphi) = \psi(r, \vartheta, \varphi + \alpha) = \psi(R(0, 0, \alpha)\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (238)$$
 wobei $L_z = -i\partial_\varphi$ verwendet wurde.
 - SU(2)-Matrizen beschreiben Rotationen 2-komponentiger komplexer Spinoren, z.B. wie sie in Pauli-Gleichung (216) auftreten.
- Wesentliche Idee und Anwendung in Physik:
 - 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 4.4.

4.3 Lorentz- und Poincare-Gruppe

- Wie in Abschnitt 3.1.1 diskutiert, müssen physikalisch sinnvolle Wellen- oder Feldgleichungen invariant unter LTs bzw. Poincare-Transformationen sein.
- LTs $\Lambda^\mu{}_\nu$ (Boosts und Rotationen; siehe Abschnitt 3.1.1) sowie Poincare-Transformationen (LTs und Translationen) bilden Gruppe.
- Lorentz- und Poincare-Gruppe daher wichtige Gruppen insbesondere in Elementarteilchenphysik.

4.3.1 Lorentz-Gruppe

- Erzeugende von Rotationen:

– Bereits in Abschnitt 4.2.1 im Zusammenhang mit Gruppe $SO(3)$ diskutiert:

$$J_x \equiv -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (239)$$

$$J_y \equiv -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (240)$$

$$J_z \equiv -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (241)$$

– Rotationen um infinitesimalen Winkel α um j -Achse: $\Lambda^\mu_\nu = 1 + i\alpha J_j$.

– Rotationen um endlichen Winkel α um j -Achse: $\Lambda^\mu_\nu = e^{+i\alpha J_j}$.

• Erzeugende von Boosts:

– **Rapidity:**

* Bisher Boosts durch Relativgeschwindigkeit v parametrisiert.

* Zweckmäßiger ist Verwendung von 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 entspricht einem Boost mit Rapidity $\eta = \eta_1 + \eta_2$, d.h. Rapiditäten sind additiv (genau wie Winkel bei Rotationen).

***** 29. Juni 2017 (19. Vorlesung) *****

– Boost mit Rapidity η in x -Richtung:

$$\Lambda^\mu_\nu = \begin{pmatrix} +\cosh(\eta) & +\sinh(\eta) & 0 & 0 \\ +\sinh(\eta) & +\cosh(\eta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (242)$$

weist nach Parametrisierung durch Rapidity starke Ähnlichkeit zu Rotationsmatrix auf.

– Aus Boost mit infinitesimaler Rapidity η in x -Richtung,

$$\Lambda^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1 & +\eta & 0 & 0 \\ +\eta & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (243)$$

ergibt sich wie gehabt via

$$\Lambda^\mu_\nu = 1 + i\eta K_x \quad (244)$$

die zugehörige Erzeugende

$$K_x = -i \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (245)$$

– Analog:

$$K_y = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_z = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (246)$$

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

$$[J_j, J_k] = +i\epsilon_{jkl}J_l, \quad [K_j, K_k] = -i\epsilon_{jkl}J_l, \quad [J_j, K_k] = +i\epsilon_{jkl}K_l. \quad (247)$$

- Weitere Darstellung der Algebra der Lorentz-Gruppe mit Ableitungsoperatoren gemäß (236):

$$J_j \equiv \epsilon_{jkl}x^k(-i\partial_l), \quad K_j \equiv -x^0(-i\partial_j) + x^j(+i\partial_0) \quad (248)$$

(kann man leicht nachrechnen).

4.3.2 Poincare-Gruppe

- Translation eines Vierervektors $x^\mu \rightarrow x^\mu + a^\mu$ nicht durch Multiplikation von x^μ mit 4×4 -Matrix darstellbar; 4×4 Matrixdarstellung der Lorentz-Gruppe eignet sich daher nicht zur Erweiterung auf Poincare-Gruppe.
- Verwende stattdessen Ableitungsoperatoren passend zu (248):

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

$$\phi(x^0 + a^0, \mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a^0)^j}{j!} \frac{\partial^j \phi}{\partial_0^j}(x^0, \mathbf{x}). \quad (249)$$

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

$$\phi(x^0 + a^0, \mathbf{x}) = \left(1 + ia^0 P_0\right) \phi(x^0, \mathbf{x}), \quad P_0 \equiv -i\partial_0, \quad (250)$$

wobei P_0 entsprechende Erzeugende ist.

– Analog:

$$P_j \equiv -i\partial_j. \quad (251)$$

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

$$[J_j, J_k] = +i\epsilon_{jkl}J_l, \quad [K_j, K_k] = -i\epsilon_{jkl}J_l, \quad [J_j, K_k] = +i\epsilon_{jkl}K_l \quad (252)$$

(die Algebra der Lorentz-Gruppe) sowie

$$\begin{aligned}
 [P_\mu, P_\nu] &= 0 \\
 [J_j, P_0] &= 0 \quad , \quad [J_j, P_k] = +i\epsilon_{jkl}P_l \\
 [K_j, P_0] &= -iP_j \quad , \quad [K_j, P_k] = -i\delta_{jk}P_0.
 \end{aligned} \tag{253}$$

4.4 Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen ausgehend von Symmetrieüberlegungen

4.4.1 Wellenfunktionen und Felder

- Wie aus DG oder aus Maxwell-Gleichungen bekannt können Wellenfunktionen und Felder mehrkomponentige Objekte sein, z.B. Dirac-Spinor $\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ oder Viererpotential $A^\mu = (A^0, A^1, A^2, A^3)$.
- Solche mehrkomponentigen Objekte müssen sich unter Poincare-Transformationen in konsistenter Weise verändern:
 - Eigenschaften werden durch Poincare-Algebra (252) und (253) vorgegeben, z.B.
 - * $[J_x, J_y] = +iJ_z$
Rotation (um kleinen Winkel) um y -Achse, dann um x -Achse unterscheidet sich von Rotation um x -Achse, dann um y -Achse ... Differenz beider Operationen entspricht Rotation um z -Achse,
 - * $[K_x, K_y] = -iJ_z$
Boost (mit kleiner Relativgeschwindigkeit bzw. Rapidität) entlang y -Achse, dann entlang x -Achse unterscheidet sich von Boost entlang x -Achse, dann entlang y -Achse ... Differenz beider Operationen entspricht Rotation um z -Achse.
 - Wellenfunktionen und Felder können beliebige Anzahl von Komponenten aufweisen, aber ihr Transformationsverhalten muss die von Poincare-Algebra festgelegten Eigenschaften erfüllen; dann können sie als Bausteine relativistisch sinnvoller Wellen- oder Feldgleichungen dienen.
 - Finde also Matrixdarstellungen der Poincare-Algebra; gefundene $N \times N$ -Darstellung stellt N -komponentige Wellenfunktion bzw. N -komponentiges Feld als Baustein zur Verfügung und legt Transformationsverhalten bezüglich Poincare-Transformationen fest.

1-komponentige Wellenfunktionen und Felder

- Nur eine mögliche 1×1 -Matrixdarstellung:

$$J_j = 0 \quad , \quad K_j = 0. \tag{254}$$

- Wirkt auf 1-komponentige Wellenfunktion bzw. 1-komponentiges Feld ψ , z.B. Lorentz-Boost mit Rapidität η in x -Richtung

$$\phi' = e^{+i\eta K_x} \phi = \phi. \tag{255}$$

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

4-komponentige Felder

- Bekanntes Beispiel ist ein Viererpotential A^μ mit J_j und K_j gemäß (239) bis (241), (245) und (246).
- Da $e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} = \Lambda^\mu{}_\nu$ mit Winkel α_j und Rapiditäten η_j , folgt

$$A'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu A^\nu. \quad (256)$$

2-komponentige Wellenfunktionen und Felder

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

$$J_j = \sigma_j/2, \quad K_j = +i\sigma_j/2. \quad (257)$$

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

$$\phi'_L = e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} \phi_L. \quad (258)$$

- Weiteres Beispiel für 2×2 -Matrixdarstellung ist

$$\begin{aligned} \tilde{J}_x &= -\sigma_x/2, & \tilde{J}_y &= -\sigma_y/2, & \tilde{J}_z &= +\sigma_z/2, \\ \tilde{K}_x &= -i\sigma_x/2, & \tilde{K}_y &= -i\sigma_y/2, & \tilde{K}_z &= +i\sigma_z/2. \end{aligned} \quad (259)$$

- Liefert kein neues Transformationsverhalten, da Darstellungen (257) und (259) **äquivalent**, d.h. Matrix T existiert mit

$$\tilde{J}_j = T J_j T^{-1}, \quad \tilde{K}_j = T K_j T^{-1} \quad (260)$$

(Finden der Matrix T ist Hausaufgabe).

- Entspricht lediglich der Koordinatentransformation $\tilde{\phi}_L = T \phi_L$, d.h. Umordnen bzw. linearem Kombinieren der internen Freiheitsgrade der Wellenfunktion bzw. des Felds ϕ_L :

$$\begin{aligned} \phi'_L &= e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} \phi_L \\ \rightarrow T \phi'_L &= T e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} T^{-1} T \phi_L = e^{+i(\alpha_j T J_j T^{-1} + \eta_j T K_j T^{-1})} T \phi_L \\ \rightarrow \tilde{\phi}'_L &= e^{+i(\alpha_j \tilde{J}_j + \eta_j \tilde{K}_j)} \tilde{\phi}_L \end{aligned} \quad (261)$$

(Nachrechnen der vorletzten Zeile ist Hausaufgabe).

***** 4. Juli 2017 (20. Vorlesung) *****

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

$$J_j = \sigma_j/2 \quad , \quad K_j = -i\sigma_j/2. \quad (262)$$

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

$$\phi'_R = e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} \phi_R. \quad (263)$$

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

Erweiterung von LTs auf Poincare-Transformationen

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

Höher dimensionale Darstellungen, reduzible Darstellungen

- Es lassen sich problemlos Darstellungen mit größeren Matrizen finden; diese entsprechen häufig Teilchen mit höherem Spin.
- Nicht sinnvoll ist Verwendung **reduzierbarer Darstellungen**.
 - Reduzible Darstellung: Erzeugende weisen dieselbe Blockdiagonalstruktur auf bzw. können durch Koordinatentransformation, im Fall der Lorentz-Algebra (260), auf dieselbe Blockdiagonalstruktur gebracht werden.

– Z.B. ist

$$J_j = \begin{pmatrix} \sigma_j/2 & 0 \\ 0 & \sigma_j/2 \end{pmatrix} \quad , \quad K_j = \begin{pmatrix} +i\sigma_j/2 & 0 \\ 0 & -i\sigma_j/2 \end{pmatrix} \quad (264)$$

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

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

4.4.2 Konstruktion relativistischer Wellen- und Feldgleichungen

- Bausteine für relativistische Wellen- und Feldgleichungen:
 - Wellenfunktionen und Felder aus Abschnitt 4.4.1, 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.
- Natur wird erfahrungsgemäß durch sehr einfache Gleichungen beschrieben; probiere daher einfache mögliche Kombinationen obiger Bausteine mit genannten Einschränkungen, dann Chance gut, ein Naturgesetz zu “erwischen”.

Gleichung für ϕ (1-komponentig)

- Einfacher erster Versuch:

$$\partial_\mu \phi = 0 \quad (265)$$

ist invariant unter Poincare-Transformationen, da

$$\partial'_\mu \phi' = 0 \rightarrow \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu \phi = 0 \rightarrow \partial_\mu \phi = 0, \quad (266)$$

aber Gleichung mit linearer Ableitung zu primitiv, um interessante Physik zu beschreiben.

- Versuch mit quadratischer Ableitung:

$$\partial^\mu \partial_\mu \phi = \square \phi = 0 \quad (267)$$

offensichtlich invariant unter Poincare-Transformationen, ist KGG für masseloses skalares Teilchen.

- Hinzunahme einer Konstante liefert

$$\left(\square + m^2\right)\phi = 0, \quad (268)$$

ist KGG für massives skalares Teilchen (siehe auch Abschnitt 3.2).

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

- Gleichung mit linearer Ableitung

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \quad (269)$$

ist invariant unter Poincare-Transformationen, aber zu primitiv, um interessante Physik zu beschreiben.

- Versuche mit quadratischer Ableitung:

$$\partial^\mu \partial_\mu A^\nu = \square A^\nu = 0 \quad , \quad \partial^\nu \partial_\mu A^\mu = 0, \quad (270)$$

beide invariant unter Poincare-Transformationen.

- Feldgleichung des em Felds wird durch weitere Symmetrie eingeschränkt, **Eichsymmetrie**:
 - Eichsymmetrie ist grundlegende Symmetrie der Elementarteilchenphysik, erlaubt “Konstruktion bzw. Herleitung der Naturgesetze der vier fundamentalen Kräfte” (em WW [Wechselwirkung], starke WW, schwache WW, Gravitation).

– Hier nur kurzer Ausblick.

- Forderung ist, dass Feldgleichung der em WW invariant unter U(1)-Eichsymmetrie ist (**Eichprinzip**; zur Gruppe U(1) siehe Aufgabenblatt 11), d.h. die Eichtransformation

$$A^\mu(x) = g(x) \left(A^\mu(x) + \frac{i}{e} \partial^\mu \right) g^{-1}(x) \quad (271)$$

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

- Ist zum Beispiel der Fall für Feldgleichung

$$\partial_\mu (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = \partial_\mu F^{\mu\nu} = 0 \quad (272)$$

(Maxwell-Gleichungen im Vakuum), nicht jedoch für Versuche (270).

- Neben (272) existiert nur eine weitere denkbare unabhängige Feldgleichung, die sowohl invariant unter Poincare-Transformationen als auch eichinvariant ist (diese zu finden ist Hausaufgabe).
- Eichsymmetrie ist weiteres wichtiges Beispiel für Anwendung von Gruppentheorie und Symmetrieüberlegungen (umfangreiche Diskussion in Vorlesung “Quantenfeldtheorie 1”).

- Hinzunahme einer Konstante, z.B.

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + mA^\nu = 0, \quad (273)$$

nicht möglich, da dann Eichsymmetrie verletzt.

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

- ϕ -Gleichung: Vorgehen bereits diskutiert in Abschnitt 3.3.5, ersetze auf ϕ wirkende Ableitungen in (268) gemäß $+i\partial^\mu \rightarrow +i\partial^\mu - eA^\mu$,

$$\left((\partial^\mu + ieA^\mu)(\partial_\mu + ieA_\mu) + m^2 \right) \phi = 0. \quad (274)$$

- A^μ -Gleichungen:

- Erinnerung an Elektrodynamik: Inhomogene Maxwell-Gleichungen,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \# j^\nu \quad (275)$$

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

- Verwende Viererstromdichte der Wellenfunktion der KGG (165), wobei wie oben auf ϕ wirkende Ableitungen gemäß $+i\partial^\mu \rightarrow +i\partial^\mu - eA^\mu$ ersetzt werden,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi ie \left(\phi^* ((\partial^\nu + ieA^\nu)\phi) - (\partial^\nu + ieA^\nu)\phi^* \phi \right). \quad (276)$$

- Gleichungen (274) und (276) offensichtlich forminvariant unter Poincare-Transformationen.

- Gleichungen (274) und (276) eichinvariant, wenn man für ϕ Eichtransformation gemäß

$$\phi'(x) = g(x)\phi(x) \quad (277)$$

definiert (Beweis ist Hausaufgabe).

- ϕ kann mit den in Abschnitt diskutierten Einschränkungen als Wellenfunktion eines Teilchens betrachtet werden.
- A^μ beschreibt jedoch ein Feld; beide Gleichungen (274) und (276) daher sinnvoll im Rahmen der Quantenfeldtheorie (dort ist ϕ ebenfalls Feld, das elektrisch geladene skalare Teilchen beschreibt).

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

- Einfacher erster Versuch:

$$\partial_\mu \phi_L = 0 \quad (278)$$

- Gleichung mit linearer Ableitung im Fall von Weyl-Spinoren nicht zu primitiv, um interessante Physik zu beschreiben (z.B. auch der Fall bei DG).
- Gleichung invariant unter Poincare-Transformationen.
- Aber: Gleichungen für Komponenten $\Phi_{L,1}$ und $\Phi_{L,2}$ entkoppeln,

$$\partial_\mu \phi_{L,1} = 0 \quad , \quad \partial_\mu \phi_{L,2} = 0. \quad (279)$$

- * Spezielles Transformationsverhalten von ϕ_L unter Poincare-Transformation (258) nicht notwendig für Forminvarianz von (278).
- * $\Phi_{L,1}$ und $\Phi_{L,2}$ könnten auch invariant unter Poincare-Transformationen sein, d.h. zwei unabhängige skalare Größen mit $\phi'_{L,1} = \phi_{L,1}$ und $\phi'_{L,2} = \phi_{L,2}$, (278) wäre dann noch immer invariant unter Poincare-Transformationen.
- * Nur wenn spezielles Transformationsverhalten gemäß geforderter Poincare-Symmetrie notwendig für 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.”)

* Komponenten von ϕ_L und von ∂_μ müssen so kombiniert werden, dass Transformationsverhalten (258) für Invarianz unter Poincare-Transformationen erforderlich ist.

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

$$\phi'_L = S_L \phi_L \quad , \quad S_L \equiv e^{+i(\alpha_j J_j + \eta_j K_j)} = e^{+i\alpha_j \sigma_j/2 - \eta_j \sigma_j/2} \quad (280)$$

$$\partial'_\mu = \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu. \quad (281)$$

- Man kann zeigen:

$$\Lambda_\mu^\nu (S_L)^\dagger \sigma_L^\mu S_L = \sigma_L^\nu \quad (282)$$

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

- Damit

$$\sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L = 0 \quad (283)$$

invariant unter Poincare-Transformationen, da

$$\begin{aligned} \sigma_L^\mu \partial'_\mu \phi'_L = 0 &\rightarrow \sigma_L^\mu \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu S_L \phi_L = 0 \rightarrow (S_L)^\dagger \sigma_L^\mu \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu S_L \phi_L = 0 \rightarrow \\ &\rightarrow \sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L = 0. \end{aligned} \quad (284)$$

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

$$\sigma_R^\mu \partial_\mu \phi_R = 0 \quad (285)$$

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

***** 11. Juli 2017 (22. Vorlesung) *****

- Erweiterung von (283) auf massives Spin-1/2 Fermion:

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

$$\sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L + m\phi_L = 0. \quad (286)$$

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

$$\sigma_L^\mu \partial'_\mu \phi'_L = (S_L^\dagger)^{-1} \sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L = S_R \sigma_L^\mu \partial_\mu \phi_L, \quad (287)$$

wobei Rechenschritte wie in (284) sowie $S_R \equiv e^{+i(\alpha_j J_j - \eta_j K_j)} = e^{+i\alpha_j \sigma_j/2 + \eta_j \sigma_j/2}$ und

$$\begin{aligned} (S_L^\dagger)^{-1} &= \left(\left(e^{+i\alpha_j \sigma_j/2 - \eta_j \sigma_j/2} \right)^\dagger \right)^{-1} = \left(e^{-i\alpha_j \sigma_j/2 - \eta_j \sigma_j/2} \right)^{-1} = \\ &= e^{+i\alpha_j \sigma_j/2 + \eta_j \sigma_j/2} = S_R \end{aligned} \quad (288)$$

verwendet wurden.

- Poincare-Transformation von $m\phi_L$:

$$m\phi'_L = mS_L\phi_L. \quad (289)$$

- $\sigma_L^\mu\partial_\mu\phi_L$ und $m\phi_L$ weisen unterschiedliches Transformationsverhalten auf, damit (286) nicht invariant unter Poincare-Transformationen.

- Analog kann man

$$\sigma_R^\mu\partial'_\mu\phi'_R = (S_R^\dagger)^{-1}\sigma_R^\mu\partial_\mu\phi_R = S_L\sigma_R^\mu\partial_\mu\phi_R, \quad m\phi'_R = mS_R\phi_R \quad (290)$$

zeigen.

- Damit folgende Gleichungen invariant unter Poincare-Transformationen:

$$i\sigma_L^\mu\partial_\mu\phi_L - m\phi_R = 0, \quad i\sigma_R^\mu\partial_\mu\phi_R - m\phi_L = 0 \quad (291)$$

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

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

- Verwende daher beide Gleichungen, können in einer Zeile geschrieben werden,

$$\left(i\tilde{\gamma}^\mu\partial_\mu - m\right)\tilde{\psi} = 0 \quad (292)$$

mit

$$\tilde{\psi} \equiv \begin{pmatrix} \phi_L \\ \phi_R \end{pmatrix}, \quad \tilde{\gamma}^\mu \equiv \begin{pmatrix} 0 & \sigma_R^\mu \\ \sigma_L^\mu & 0 \end{pmatrix}. \quad (293)$$

- (292) ist identisch zur DG (177), allerdings mit anderen 4×4 -Matrizen $\tilde{\gamma}^\mu \neq \gamma^\mu$.

- (177) äquivalent zu (292), lediglich andere Linearkombination der vier Gleichungen bzw. Spinorkomponenten:

- * Man kann leicht nachrechnen

$$\tilde{\gamma}^\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \gamma^0\gamma^5)\gamma^\mu\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0\gamma^5) \quad (294)$$

$$1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \gamma^0\gamma^5)\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0\gamma^5) \quad (295)$$

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

- * Damit

$$\begin{aligned} \left(i\tilde{\gamma}^\mu\partial_\mu - m\right)\tilde{\psi} &= 0 \quad \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \gamma^0\gamma^5)\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m\right)\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0\gamma^5)\tilde{\psi} &= 0 \quad \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m\right)\psi &= 0 \end{aligned} \quad (296)$$

mit

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0\gamma^5)\tilde{\psi}. \quad (297)$$

- (292) und (293) nennt man “chirale Darstellung” oder “Weyl-Darstellung” ((174) und (177) dagegen “Standarddarstellung” oder “Dirac-Darstellung”).

- Einfaches Ausrechnen

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \gamma^0\gamma^5) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 & -1 \\ +1 & +1 \end{pmatrix} \quad (298)$$

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.

- Transformationsverhalten von $\tilde{\psi}$ unter Poincare-Transformationen ergibt sich direkt aus Transformationsverhalten der links- und rechtshändigen Weyl-Spinoren (258) und (263),

$$\tilde{\psi}' = \begin{pmatrix} e^{+i\alpha_j\sigma_j/2 - \eta_j\sigma_j/2} & 0 \\ 0 & e^{+i\alpha_j\sigma_j/2 + \eta_j\sigma_j/2} \end{pmatrix} \tilde{\psi}, \quad (299)$$

ist äquivalent zu (206) (Beweis ist Hausaufgabe).

4.5 Zusammenfassung

- In diesem Kapitel ein spezielles Beispiel, wie mächtig Symmetrieüberlegungen und Gruppentheorie in Physik sind.
- DG auf völlig anderem Weg als in Kapitel 3.3 erhalten, ausschließlich mit Hilfe von Symmetrieüberlegungen.
- Symmetrien schränken mögliche Naturgesetze nicht vollständig aber sehr stark ein.
- Einfachste aufgrund von Symmetrien erlaubte Gleichungen bilden offenbar Naturgesetze.
- In (Quanten-)Feldtheorie finden solche Überlegungen üblicher Weise auf Ebene der Lagrange-Funktion statt; etwas praktischer und übersichtlicher als auf Ebene der Wellen- oder Feldgleichungen, Idee und Ergebnisse allerdings identisch.
- Standardmodell (em WW, starke WW, schwache WW) ist $U(1) \times SU(2) \times SU(3)$ Eichtheorie mit Poincaresymmetrie, außerdem approximative $SU(2)$ bzw. $SU(3)$ Flavorsymmetrie der Quarks.
- Neben erlernten Techniken (Gruppentheorie, Lie-Gruppen, Anwendung auf Physik) vor allem wichtige Aussage dieses Kapitels: **Symmetrien schränken mögliche Naturgesetze radikal ein, sind damit wichtigstes Hilfsmittel der (Elementarteilchen-)Physik, ohne Symmetrien kaum eine Chance, physikalisch komplizierte Gleichungen oder Theorien zu finden.**

5 Vielteilchensysteme

5.1 Grundlagen zur Behandlung ununterscheidbarer Teilchen

5.1.1 Eigenschaften von Zuständen und Operatoren bei Teilchenvertauschung

- Betrachte Systeme mit $N \geq 2$ Teilchen.
- Unterscheidbare Teilchen, z.B. Wasserstoffatom bestehend aus Proton und 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 daher im Folgenden ununterscheidbare Teilchen, z.B. Mehrelektronensysteme (Atomhülle von Atomen jenseits des Wasserstoffatoms, Elektronen im Festkörper,...).
- Betrachte im Weiteren Fall, dass alle N Teilchen identisch sind.

***** 13. Juli 2017 (23. Vorlesung) *****

- **Permutationsoperator P_{jk} :**

- P_{jk} vertauscht Teilchen j mit Teilchen k , d.h.

$$P_{jk}\psi(\dots, j, \dots, k \dots) = \psi(\dots, k, \dots, j \dots). \quad (300)$$

- Da $(P_{jk})^2 = 1$, sind Eigenwerte von $P_{jk} \pm 1$.

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

$$\langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle = \langle\psi|P_{jk}\mathcal{O}P_{jk}|\psi\rangle \quad (301)$$

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

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

- In Natur nur vollkommen symmetrische oder vollkommen antisymmetrische Zustände realisiert (zeigt sich z.B. durch Abgleich mit Experiment):

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

$$P_{jk}|\psi\rangle = +|\psi\rangle. \quad (302)$$

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

$$P_{jk}|\psi\rangle = -|\psi\rangle. \quad (303)$$

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

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

* 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. Wahrscheinlichkeit zwei identische Fermionen mit gleicher Spineinstellung am gleichen Ort zu finden verschwindet.

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

5.1.2 Nicht-wechselwirkende Teilchen

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

$$H(1, 2, \dots) = \sum_{j=1}^N H_1(j). \quad (304)$$

- Eigenzustände von $H(1, 2, \dots)$ sind Produkte von Eigenzuständen der 1-Teilchen-Hamiltonoperatoren,

$$H_1(j)\phi_n(j) = E_{1,n}\phi_n(j) \quad (305)$$

(n nummeriert Eigenzustände des 1-Teilchen-Hamiltonoperators $H_1(j)$, z.B. “ $n = p$ ” [Impuls] bei freiem Teilchen oder “ $n = (n, l, m)$ ” [Quantenzahlen des Wasserstoffatoms] bei Coulomb-Potential),

$$H(1, 2, \dots)\psi(1, 2, \dots) = E\psi(1, 2, \dots) \quad (306)$$

$$\psi(1, 2, \dots) = \phi_{n_1}(1)\phi_{n_2}(2)\dots, \quad E = E_{n_1} + E_{n_2} + \dots \quad (307)$$

- Zustände (307) im Allgemeinen weder total symmetrisch (notwendig für ununterscheidbare Bosonen) noch total antisymmetrisch (notwendig für ununterscheidbare Fermionen) bezüglich Teilchenvertauschung, wie in Abschnitt 5.1.1 gefordert.

Bosonen

- Aus beliebigem Zustand (307) für 2 Teilchen kann total symmetrischer Zustand konstruiert werden,

$$\psi(1, 2) = A \left(\phi_{n_1}(1)\phi_{n_2}(2) + \phi_{n_2}(1)\phi_{n_1}(2) \right), \quad (308)$$

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

- Verallgemeinerung auf N Teilchen:

$$\psi(1, 2, \dots) = A \sum_P P(\phi_{n_1}(1)\phi_{n_2}(2)\dots), \quad (309)$$

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

Fermionen

- Aus beliebigem Zustand (307) für 2 Teilchen kann total antisymmetrischer Zustand konstruiert werden,

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{n_1}(1)\phi_{n_2}(2) - \phi_{n_2}(1)\phi_{n_1}(2) \right). \quad (310)$$

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

- Verallgemeinerung auf N Teilchen:

$$\psi(1, 2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \text{sgn}(P) P(\phi_{n_1}(1)\phi_{n_2}(2)\dots), \quad (311)$$

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

- (311) kann auch mit sogenannter **Slater-Determinante** geschrieben werden,

$$\psi(1, 2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{n_1}(1) & \phi_{n_1}(2) & \dots \\ \phi_{n_2}(1) & \phi_{n_2}(2) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \quad (312)$$

***** 18. Juli 2017 (24. Vorlesung) *****

5.1.3 Bosonischer und fermionischer Grundzustand beim Potentialtopf

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

$$\phi_{\mathbf{n}}(j) = \# \sin(p_x x) \sin(p_y y) \sin(p_z z) \quad , \quad \mathbf{p} = \frac{\pi}{L} \mathbf{n} \quad , \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots \quad (313)$$

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

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

$$\psi_0(1, 2, \dots) = \phi_{(1,1,1)}(1)\phi_{(1,1,1)}(2) \dots \quad , \quad E_0 = \sum_{j=1}^N E_{1,(1,1,1)} = \frac{3N\pi^2}{2L^2m}. \quad (314)$$

- Fermionischer Grundzustand:

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

$$\psi_0(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{(1,1,1,\uparrow)}(1)\phi_{(1,1,1,\downarrow)}(2) - \phi_{(1,1,1,\downarrow)}(1)\phi_{(1,1,1,\uparrow)}(2) \right). \quad (315)$$

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

$$\psi_0(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P \text{sgn}(P) P(\phi_{(1,1,1,\uparrow)}(1)\phi_{(1,1,1,\downarrow)}(2)\phi_{(2,1,1,\uparrow)}(3)). \quad (316)$$

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

5.1.4 Helium

- Helium (Kern bestehend aus 2 Protonen, 2 Elektronen) ist einfachstes Mehrelektronenatom.
- Verwende folgende Näherungen:
 - Im Koordinatenursprung festgehaltener Kern, d.h. nur Elektronen besitzen Dynamik.
 - Keine WW zwischen Elektronen.
- Hamilton-Operator:

$$H(1, 2) = \underbrace{\frac{(\mathbf{p}_1)^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_1}}_{=H_1(1)} + \underbrace{\frac{(\mathbf{p}_2)^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_2}}_{=H_1(2)}. \quad (317)$$

- 1-Teilchen-Hamilton-Operatoren entsprechen dem des Wasserstoffatoms mit Kernladungszahl $Z = 2$, zugehörige Eigenzustände 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 $s = \uparrow, \downarrow$,

Energie $E_{1,(n,l,m,s)} = -Z^2 \text{Ry}/n^2 = -4 \text{Ry}/n^2$.

- Elektronenspins können zu antisymmetrischem Singlet $((|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2})$, Gesamtspin $S = 0$ oder zu 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 Spin antisymmetrisch, muss Ortswellenfunktion symmetrisch sein.
- Grundzustand damit

$$\psi_{\text{para},0}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{(1,0,0)}(1) \phi_{(1,0,0)}(2) (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (318)$$

Energie $E_{\text{para},0} = -8 \text{Ry}$.

- Grundzustand von Orthohelium:

- Da Spin symmetrisch, muss Ortswellenfunktion antisymmetrisch sein.
- Grundzustand damit

$$\psi_{\text{ortho},0}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{(1,0,0)}(1) \phi_{(2,l,m)}(2) - \phi_{(2,l,m)}(1) \phi_{(1,0,0)}(2) \right) |\text{spin}\rangle, \quad (319)$$

$$\text{spin} \in \left\{ |\uparrow\uparrow\rangle, (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}, |\downarrow\downarrow\rangle \right\},$$

12-fach entartet, Energie $E_{\text{ortho},0} = -5 \text{Ry}$.

- 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).

5.2 Hartree-Verfahren

- Ziel: Löse Schrödinger-Gleichung für wechselwirkendes N -Teilchensystem,

$$\left(\sum_j \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_j} + V(\mathbf{r}_j) \right)}_{=H_1(j)} + \sum_{j < k} V_{\text{ww}}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|) \right) \psi(1, 2, \dots) = E \psi(1, 2, \dots). \quad (320)$$

- Z.B. für Elektronenhülle von Atom mit Kernladungszahl Z

$$V(\mathbf{r}_j) = -\frac{Ze^2}{r_j} \quad (321)$$

$$V_{\text{ww}}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|) = +\frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|}. \quad (322)$$

- Exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung (320) selbst numerisch ausgesprochen schwierig, da partielle DGl in $3N$ Variablen.

***** 20. Juli 2017 (25. Vorlesung) *****

- **Hartree-Verfahren** ist Methode, um Schrödinger-Gleichung (320) auch für größere N zumindest näherungsweise zu lösen.

- Grundidee:

- Ansatz für Lösung ist

$$\psi(1, 2, \dots) = \phi_1(1)\phi_2(2)\dots, \quad (323)$$

d.h. Produkt von 1-Teilchen-Wellenfunktionen, ist Näherung, exakte Lösung wird i.A. nicht diese Struktur aufweisen.

- Bestimme 1-Teilchen-Wellenfunktionen $\phi_j(j)$ durch (typischer Weise numerisches) Lösen der **Hartree-Gleichungen**,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}_j} + V(\mathbf{r}_j) + V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j) \right) \phi_j(j) = \epsilon_j \phi_j(j) \quad (324)$$

mit **Hartree-Potentialen**

$$V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j) = \sum_{k \neq j} \int d^3 r_k \underbrace{\phi_k^*(k)\phi_k(k)}_{=\rho_k(\mathbf{r}_k)} V_{\text{ww}}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|) \quad (325)$$

($\rho_k(\mathbf{r}_k)$): Wahrscheinlichkeitsdichte, k -tes Teilchen bei \mathbf{r}_k zu finden).

- Interpretation: j -tes Hartree-Potential für j -tes Teilchen ergibt sich aus Aufenthaltswahrscheinlichkeiten aller anderen Teilchen $k \neq j$ und der WW dieser Teilchen mit j -tem Teilchen.
- Hartree-Gleichungen sind über 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 fest vorgegeben, ist j -te Hartree-Gleichung vergleichsweise primitive 1-Teilchen-SG (partielle DGl in 3 Variablen), d.h. numerische Lösung unproblematisch.

- Iterativer Algorithmus zur Lösung der Hartree-Gleichungen:

- (1) Starte mit näherungsweise korrekten $\phi_j(j)$, d.h. verwende z.B. Lösungen der Hartree-Gleichungen (324) mit $V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j) = 0$.
- (2) Berechne alle N Hartree-Potentiale $V_{\text{Hartree},j}(\mathbf{r}_j)$ mit aktuell vorliegenden $\phi_j(j)$.

- (3) Löse mit in (2) berechneten Hartree-Potentialen Hartree-Gleichungen (324); neu gewonnene $\phi_j(j)$ ersetzen alte $\phi_j(j)$.
- (4) Falls neue $\phi_j(j)$ identisch zu den alten $\phi_j(j)$ sind:
 - Beende Hartree-Verfahren, Lösung ist (323) mit aktuell vorliegenden $\phi_j(j)$.
 - Sonst:
 - Gehe zu (2).
- Iteratives Verfahren, $\phi_j(j)$ nähern sich i.d.R. immer weiter gesuchter Lösung an, Konvergenz jedoch nicht garantiert.
- Wenn bei Beendigung des Hartree-Verfahrens neue $\phi_j(j)$ identisch zu den alten $\phi_j(j)$ sind, spricht man von “selbstkonsistenten Feldern $\phi_j(j)$ ” (Hartree-Verfahren wird auch als “Methode der selbstkonsistenten Felder” bezeichnet).
- Zustand (323) nicht total antisymmetrisch bezüglich Teilchenvertauschung, daher Pauli-Prinzip i.A. nicht realisiert; ähnliches Verfahren, das Pauli-Prinzip berücksichtigt, ist Hartree-Fock-Verfahren (siehe z.B. F. Schwabl, “Quantenmechanik (QM I)”, Springer, Abschnitt 13.3.2).

5.3 Ausblick: QM Behandlung von Systemen mit veränderlicher Teilchenzahl

- Bisher: Teilchenzahl konstant.
- Ziel: Beschreibung von Prozessen, in denen Teilchen erzeugt oder vernichtet werden.

5.3.1 Fock-Raum

- Starte mit Basis von 1-Teilchenzuständen $|k\rangle$ (z.B. ebene Wellen, d.h. Zustände mit definiertem Impuls, “ $k = \mathbf{p}$ ”).
- $|k\rangle_j$ bezeichnet j -tes Teilchen im 1-Teilchenzustand $|k\rangle$.
- Basiszustände eines N -Teilchensystems:

$$|k_1, k_2, \dots\rangle \equiv |k_1\rangle_1 |k_2\rangle_2 \dots \quad (326)$$

- Betrachte im Folgenden Bosonen, Symmetrisierung bezüglich Teilchenvertauschung gemäß

$$S(|k_1, k_2, \dots\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P P(|k_1, k_2, \dots\rangle). \quad (327)$$

- Zweckmäßig ist Übergang zu **Besetzungszahldarstellung**:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} S(|k_1, k_2, \dots\rangle), \quad (328)$$

wobei n_k Anzahl der Teilchen in 1-Teilchenzustand $|k\rangle$ angibt.

- Beispiel: Verwende als Basis von 1-Teilchenzuständen ebene Wellen, betrachte 5-Teilchenzustand $|\psi\rangle$, bei dem 3 Teilchen Impuls \mathbf{p} und 2 Teilchen Impuls \mathbf{q} besitzen.
- Notation wie in (327):

$$|\psi\rangle \propto S(|\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{q}\rangle). \quad (329)$$

- Besetzungszahldarstellung (328):

$$|\psi\rangle = |n_{\mathbf{p}} = 3, n_{\mathbf{q}} = 2\rangle \quad (330)$$

(üblicher Weise werden nur von Null verschiedene Besetzungszahlen angegeben).

- Zustände, notiert in Besetzungszahldarstellung (328), mit beliebigen n_1, n_2, \dots bilden Basis für Behandlung von Systemen mit veränderlicher Teilchenzahl, spannen sogenannten **Fock-Raum** auf:
 - Vakuum: $|\Omega\rangle$ (alle $n_k = 0$).
 - 1-Teilchenzustände: $|n_1 = 1\rangle, |n_2 = 1\rangle, \dots$
 - 2-Teilchenzustände: $|n_1 = 2\rangle, |n_2 = 2\rangle, \dots |n_1 = 1, n_2 = 1\rangle, |n_1 = 1, n_3 = 1\rangle, \dots$
 - ...

5.3.2 Teilchenerzeugung und -vernichtung

- Definiere **Erzeugungsoperatoren** a_k^\dagger und **Vernichtungsoperatoren** a_k :

$$a_k^\dagger |n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1, \dots\rangle \quad (331)$$

$$a_k |n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1, \dots\rangle \quad (332)$$

- Gleiches Prinzip wie Erzeugungsoperatoren und Vernichtungsoperatoren beim harmonischen Oszillator (siehe Vorlesung “Theoretische Physik 4 – Quantenmechanik”).
- Jeder Operator (z.B. Hamiltonoperator, Gesamtimpulsoperator, ...) kann durch a_k^\dagger und a_k ausgedrückt werden.
- Mit solchen Operatoren lassen sich 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 Vorlesung “Einführung in die Quantenfeldtheorie und das Standardmodell der Teilchenphysik”).