

Quantenmechanik II

Zusammenfassung/Übersicht

erstellt von Tizian Römer

basierend auf der Vorlesung
Moderne Theoretische Physik 2 (Theo E)
von Prof. Dr. Dieter Zeppenfeld
aus dem Wintersemester 2016/2017
am Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Ich veröffentliche diese *Zusammenfassung/Übersicht* inklusive
der Grafiken unter der Creative-Commons-Lizenz

[CC BY-SA 4.0.](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/)

Zusammengefasst ist es jedem erlaubt, dieses Dokument (oder
Teile daraus) zu beliebigen Zwecken zu verbreiten, solange der
Name des Urhebers genannt wird.

Kontakt via E-Mail: tiroemer@yahoo.de

Inhaltsverzeichnis

1	Symmetrien und Drehimpuls	2
1.1	Translation	2
1.2	Drehungen	2
1.3	Addition von Drehimpulsen	3
1.4	Vektor- und Tensoroperatoren	3
1.5	Wigner-Eckert-Theorem	4
2	Zeitabhängige Störungstheorie	5
2.1	Zeitabhängige Systeme und Wechselwirkungsbild	5
2.2	Zeitabhängige Störungstheorie	5
2.3	Fermis Goldene Regel für konstante Störung	6
2.4	Fermis Goldene Regel für harmonische Störung	6
2.5	Wechselwirkung mit klassischem E-Feld	6
2.6	Photoelektrischer Effekt	7
2.7	Energieverschiebung und Zerfallsbreite	7
3	Identische Teilchen	8
3.1	Permutationen bei Vielteilchensystemen	8
3.2	Vielteilchensysteme in Atomen	8
4	Pfadintegrale	9
4.1	Pfadintegraldarstellung für Propagation	9
5	Relativistische QM	10
5.1	Vierervektoren	10
5.2	Klein-Gordon-Gleichung	10
5.3	Dirac-Gleichung	11
5.4	Kopplung an das EM-Feld: Pauli-Gleichung	11
5.5	Relativistische Korrektur, Darwin-Term	12
5.6	Allgemeine Lorentz-Transformation von Spinoren	12
5.7	Lorentz-Transf. des Wahrscheinlichkeitsstroms	13
5.8	Paritätstransformation und Fermionen-Bilineare	13
5.9	Drehungen und Boosts von Spinoren	13
5.10	Ebene-Wellen-Lösungen der Dirac-Gleichung	14
5.11	Der Dirac-See	14
5.12	u- und v-Spinoren	14
6	Feldquantisierung	15
6.1	Quantisierung des elektromagnetischen Feldes	15
6.2	Wechselwirkung des EM-Feldes mit Ladungen	16
6.3	Strahlungsübergänge im Atom	16
6.4	Strahlungsübergänge im Atom – Spezialfälle	17

1 Symmetrien und Drehimpuls

1.1 Translation

DEFINITION:

Der Translationsoperator $\mathcal{T}_{\vec{a}}$ ist definiert durch

$$\mathcal{T}_{\vec{a}}|\vec{r}\rangle = |\vec{r} + \vec{a}\rangle.$$

EIGENSCHAFTEN:

\mathcal{T} ist unitär (wie alle Transformationsoperatoren):

$$\langle \vec{r}_1 | \mathcal{T}_{\vec{a}}^\dagger \mathcal{T}_{\vec{a}} | \vec{r}_2 \rangle = \langle \vec{r}_1 + \vec{a} | \vec{r}_2 + \vec{a} \rangle = \delta(\vec{r}_1 + \vec{a} - \vec{r}_2 - \vec{a}) = \langle \vec{r}_1 | \vec{r}_2 \rangle.$$

Es gilt außerdem $\mathcal{T}_{\vec{a}}\mathcal{T}_{\vec{b}} = \mathcal{T}_{\vec{a}+\vec{b}} = \mathcal{T}_{\vec{b}}\mathcal{T}_{\vec{a}}$ und $\mathcal{T}_{-\vec{a}} = \mathcal{T}_{\vec{a}}^{-1} = \mathcal{T}_{\vec{a}}^\dagger$ (wg.

unitär) und $\mathcal{T}_{\vec{a}} \xrightarrow{\vec{a} \rightarrow 0} \mathcal{T}_0 = \mathbb{I}$.

INFINITESIMALE TRANSLATION:

Für eine infinitesimale Translation $d\vec{x}$ kann man $\mathcal{T}_{d\vec{x}}$ entwickeln (das $-i$ ist hier kosmetisch, Op. \vec{k} muss noch gefunden werden):

$$\mathcal{T}_{d\vec{x}} \approx \mathbb{I} - i\vec{k}d\vec{x}$$

Es folgt (bis zur ersten Ordnung in $d\vec{x}$)

$$\mathcal{T}_{d\vec{x}}^\dagger \mathcal{T}_{d\vec{x}} \approx \mathbb{I} + i(\vec{k}^\dagger - \vec{k})d\vec{x} = \mathbb{I} \iff \vec{K}^\dagger = \vec{K}.$$

Der Kommutator ist

$$\begin{aligned} [x_i, \mathcal{T}_{d\vec{x}}]|\vec{r}\rangle &= x_i|\vec{r} + d\vec{x}\rangle - \mathcal{T}_{d\vec{x}}x_i|\vec{r}\rangle \\ &= (x_i + dx_i)|\vec{r} + d\vec{x}\rangle - x_i|\vec{r} + d\vec{x}\rangle = dx_i|\vec{r} + d\vec{x}\rangle \approx dx_i|\vec{r}\rangle. \end{aligned}$$

aber auch $[x_i, \mathcal{T}_{d\vec{x}}]|\vec{r}\rangle \approx [x_i, \mathbb{I} - i\vec{k}d\vec{x}]|\vec{r}\rangle = -id x_j [x_i, k_j]|\vec{r}\rangle$. Also:

$$[x_i, K_j] = i\delta_{ij}.$$

ENDLICHE AUS INFINITESIMALEN TRANSLATIONEN:

Eine Transl. um Δx entspricht N Transl. um $\Delta x/N$. In 1D:

$$\mathcal{T}_{\Delta x} = \mathcal{T}_{\Delta x/N}^N \approx \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{I} - ik_x \frac{\Delta x}{N} \right)^N = e^{-ik_x \Delta x}, \quad 3D: \mathcal{T}_{\vec{a}} \approx e^{-i\vec{k}\vec{a}}.$$

\vec{K} IN ORTSBASIS:

Infinitesimale Translation ϵ in 1D und Taylor-Entw. um x' :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_\epsilon|\psi\rangle &= \int dx \mathcal{T}_\epsilon|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dx |x + \epsilon\rangle\psi(x) \\ &= \int dx' |x'\rangle\psi(x' - \epsilon) \approx \int dx' |x'\rangle \left(\psi(x') - \epsilon \frac{d\psi(x')}{dx'} \right), \end{aligned}$$

wobei sich wieder schreiben lässt $\psi(x') = \langle x'|\psi\rangle$. Es ist auch:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_\epsilon|\psi\rangle &\approx (\mathbb{I} - ik_x\epsilon)|\psi\rangle = \int dx |x\rangle\langle x|\mathbb{I} - ik_x\epsilon|\psi\rangle \\ &= \int dx |x\rangle(\psi(x) - i\epsilon k_x\psi(x')). \end{aligned}$$

In 3D gilt offensichtlich

$$\vec{k} = -i\nabla = \frac{\vec{p}}{\hbar} \implies \mathcal{T}_{\vec{a}} = e^{-i\vec{p}\vec{a}/\hbar}$$

BEZIEHUNG ZUR TAYLORREIHE:

In 1D führt $\mathcal{T}_a\psi(x)$ auf die Taylorreihe von $\psi(x - a)$ um x :

$$\psi(x - a) = \mathcal{T}_a\psi(x) = e^{-a d/dx}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n}\psi(x).$$

1.2 Drehungen

DREHMATRIZEN UND GENERATOREN:

Drehmatrix $R_z(\varphi)$ für Drehung um den Winkel φ um die z -Achse hat einen Generator G_z :

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e^{-iG_z\varphi}.$$

Eine Taylor-Entwicklung für kleine φ ergibt

$$R_z(\varphi) \approx \begin{pmatrix} 1 - \varphi^2/2 & -\varphi & 0 \\ \varphi & 1 - \varphi^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \approx (1 - iG_z\varphi)$$

$$\implies G_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = i \frac{d}{d\varphi} R_z(\varphi) \Big|_{\varphi=0}.$$

Die Generatoren für Drehungen um die x - und y -Achsen sind:

$$G_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad G_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Es folgen die Relationen

$$[G_i, G_j] = i\epsilon_{ijk}G_k, \quad R(\vec{\alpha}) = e^{-i\vec{\alpha}\vec{G}}, \quad G_j = i \frac{d}{d\alpha_j} R(\vec{\alpha}) \Big|_{\vec{\alpha}=0}.$$

GRUPPE DER DREHMATRIZEN:

Die Drehmatrizen bilden eine Gruppe, genannt $SO(3)$:

$$SO(3) := \{R \in \mathbb{R}^{3 \times 3} | R^T R = R R^T = 1, \det R = 1\}$$

$SO(3)$ ist zudem eine Lie-Gruppe, denn $R(\vec{\alpha})$ ist analytisch in $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$.

DREHUNG EINES QUANTENMECHANISCHEN SYSTEMS:

Eine Drehung $R(\vec{\alpha})$ entspricht einem unitären Operator $\mathcal{D}(\vec{\alpha})$:

$$|\psi\rangle_{R(\vec{\alpha})} = \mathcal{D}(\vec{\alpha})|\psi\rangle,$$

$$|\psi\rangle_{R(\vec{\alpha}_1)R(\vec{\alpha}_2)=R(\vec{\alpha}_3)} = \mathcal{D}(\vec{\alpha}_1)\mathcal{D}(\vec{\alpha}_2)|\psi\rangle = \mathcal{D}(\vec{\alpha}_3)|\psi\rangle.$$

$\mathcal{D}(\vec{\alpha})$ bilden eine Darstellung der $SO(3)$ -Gruppe, darstellbar durch Generatoren J_i :

$$\mathcal{D}(\vec{\alpha}) = e^{-i\vec{\alpha}\vec{J}/\hbar} \implies [J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k.$$

\vec{J} ist also offensichtlich ein Drehimpulsoperator, zum Beispiel der Spin-1/2-Operator (mit den Pauli-Matrizen σ_i):

$$J_i \stackrel{\text{z.B.}}{=} s_i = \hbar/2 \sigma_i.$$

Es folgt daraus ($(\vec{\sigma}\vec{\alpha})^2 = \sigma_0\alpha^2, \vec{\alpha} = \alpha\hat{\alpha}$):

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{1/2}(\vec{\alpha}) &= e^{-i\vec{\alpha}\vec{s}/\hbar} = \sigma_0 \cos \alpha/2 - i\hat{\alpha}\vec{\sigma} \sin \alpha/2 \\ &= \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 - i\hat{\alpha}_z \sin \alpha/2 & (-i\hat{\alpha}_x + \hat{\alpha}_y) \sin \alpha/2 \\ -(i\hat{\alpha}_x + \hat{\alpha}_y) \sin \alpha/2 & \cos \alpha/2 + i\hat{\alpha}_z \sin \alpha/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Jede unitäre Matrix U mit $\det U = 1$ kann in der letzten Form mit den Cayley-Klein-Parametern a, b geschrieben werden. Diese Matrizen bilden die Gruppe

$$SU(2) := \{U \in \mathbb{C} | UU^\dagger = 1, \det U = 1\}.$$

WIGNER-D-MATRIZEN:

Aus $\mathcal{D}(\vec{\omega}) = e^{-i\vec{\omega}\vec{J}/\hbar} = e^{-i(\omega_z J_z + J_+(\omega_x - i\omega_y)/2 + J_-(\omega_x + i\omega_y)/2)}$ folgt

$$\langle j'm' | \mathcal{D}(\vec{\omega}) | jm \rangle = \delta_{j'j} \langle jm' | \mathcal{D}(\vec{\omega}) | jm \rangle = \delta_{j'j} D_{m'm}^{(j)}(\vec{\omega}),$$

d.h. \mathcal{D} ändert j nicht und $D_{m'm}^{(j)}(\vec{\omega})$ sind $(2j+1) \times (2j+1)$ -Matrizen, die sog. Wigner-D-Funktionen. Damit folgt:

$$\mathcal{D}(\vec{\omega}) | jm \rangle = \sum_{j'm'} |j'm'\rangle \langle j'm' | \mathcal{D}(\vec{\omega}) | jm \rangle = \sum_{m'} |j'm'\rangle D_{m'm}^{(j)}(\vec{\omega}).$$

Verbindung zu den Euler-Winkeln α, β, γ (Drehung um z, y', z''):

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) &= e^{-i\alpha J_z/\hbar} e^{-i\beta J_y/\hbar} e^{-i\gamma J_z/\hbar} \\ \implies D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j'm' | e^{-i\alpha J_z/\hbar} e^{-i\beta J_y/\hbar} e^{-i\gamma J_z/\hbar} | jm \rangle \\ &= e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} \langle j'm' | e^{-i\beta J_y/\hbar} | jm \rangle = e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} d_{m'm}^{(j)}(\beta). \end{aligned}$$

Hier wurde der α -Term nach vorne und der γ -Term nach hinten angewandt. $d_{m'm}^{(j)}$ sind die Wigner-d-Funktionen.

Eigenschaften:

1. J_y ist rein imaginäre Matrix $\implies iJ_y \in \mathbb{R} \implies d_{m'm}^{(j)} \in \mathbb{R}$.

2. Mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten gilt

$$d_{m'm}^{(j)} = \sum_{m_1, m_1', m_2, m_2'} d_{m_1' m_1}^{(j_1)} d_{m_2 m_2'}^{(j_2)} \langle jm | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j m' | j_1 j_2 m_1' m_2' \rangle.$$

1.3 Addition von Drehimpulsen

GEMEINSAME EIGENZUSTÄNDE:

Ein System aus zwei Drehimpulsen \vec{J}_1, \vec{J}_2 hat einen Gesamtdrehimpuls von $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ und die $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ Eigenzustände

$$|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle = |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

Diese sind Eigenzustände von $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$. Auch $\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2$ haben gemeinsame Eigenzustände:

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, \vec{J}_1^2] &= 2[J_{1i}J_{2i}, \vec{J}_1^2] = 2J_{1i}[J_{2i}, \vec{J}_1^2] + 2[J_{1i}, \vec{J}_1^2]J_{2i} = 0 \\ [\vec{J}^2, J_z] &= [J_{1z}, J_{1z} + J_{2z}] = 0 \end{aligned}$$

Diese vier Operatoren haben aber keine gemeinsamen Eigenzustände mit J_{1z} :

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_{1z}] &= 2[J_{1i}J_{2i}, J_{1z}] = 2[J_{1i}, J_{1z}]J_{2i} = 2i\hbar\epsilon_{i3j}J_{1j}J_{2i} \\ &= 2i\hbar(J_{1x}J_{2y} - J_{1y}J_{2x}) \neq 0. \end{aligned}$$

CLEBSCH-GORDAN-KOEFFIZIENTEN:

Gesucht ist nun der Eigenzustand $|j_1 j_2 j m\rangle$ von $\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2$ in Abhängigkeit des Eigenzustands $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ von $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$:

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \underbrace{\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-K.}}$$

Da sich j_1, j_2 in $|j_1 j_2 j m\rangle$ trivialerweise aus $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ ergeben, schreibt man verkürzt oft $|j_1 j_2 j m\rangle = |j m\rangle$. Es folgt

$$\begin{aligned} \hbar m |j m\rangle &= J_z |j m\rangle = (J_{1z} + J_{2z}) |j m\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2) \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2) |j m\rangle \Leftrightarrow m = m_1 + m_2. \end{aligned}$$

Offensichtlich gilt also $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = 0$ für $m \neq m_1 + m_2$. Außerdem gilt (hier ohne Beweis)

$$j = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2.$$

KONSTRUKTION DER NEUEN EIGENZUSTÄNDE:

Für den Zustand mit dem höchsten Gewicht gilt $m_i = j_i \Rightarrow m = j_1 + j_2 = j$ und der Clebsch-Gordan-Koeffizient ist 1, da es nur einen Zustand gibt:

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_2 j_1 j_2\rangle.$$

Durch Anwendung des J_- -Operators folgen weitere

Koeffizienten mit $J_- = J_{1-} + J_{2-}$:

$$\begin{aligned} J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= \hbar\sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \\ J_- |j_1 j_2 j_1 j_2\rangle &= \hbar\sqrt{2j_1} |j_1 j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \hbar\sqrt{2j_2} |j_1 j_2 j_1, j_2 - 1\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_2 j_1, j_2 - 1\rangle$$

Aus der Orthogonalität

$$\langle j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle = 0$$

folgt mit der Condon-Shortley-Konvention:

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_2, j_1 - 1, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_2 j_1, j_2 - 1\rangle$$

REKURSIONSFORMEL:

Mit $J_{\pm} = J_{1\pm} + J_{2\pm} = J_{\mp}^{\dagger}$ folgt

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J_{\pm} | j m \rangle / \hbar \\ &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1 j_2, m_1 \mp 1, m_2 | j m \rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1 j_2, m_1, m_2 \mp 1 | j m \rangle \end{aligned}$$

EIGENSCHAFTEN DER CLEBSCH-GORDAN-KOEFFIZIENTEN:

1. Wegen der Condon-Shortley-Konvention sind die CGK reell,

$$\text{d.h. } \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle = \langle j m | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$$

2. Orthogonalität (mit 1. kann man zeigen):

$$\begin{aligned} \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | j' m' \rangle &= \langle j m | j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \\ \sum_{jm} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle \langle j_1 j_2 m_1' m_2' | j m \rangle &= \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \end{aligned}$$

3. Symmetrie:

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - j} \langle j_1 j_2, -m_1, -m_2 | j, -m \rangle$$

1.4 Vektor- und Tensoroperatoren

VEKTOROPERATOREN:

Der Ortsoperator \vec{r} , Impulsoperator \vec{p} , Drehimpulsoperator \vec{J} oder auch das EM-Vektorpotential \vec{A} sind Vektoroperatoren. Sei \vec{v} im Folgenden ein allgemeiner Vektoroperator.

Klassisch transformiert ein Vektoroperator und Drehungen so:

$$v_i \rightarrow R_{ij} v_j, \quad R \in SO(3).$$

Ein quantenmechanischer Zustand transformiert über einen Drehoperator $\mathcal{D}(R)$, sodass $|\psi\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|\psi\rangle$ und

$$\langle \psi | v_i | \psi \rangle \rightarrow \langle \psi | \mathcal{D}^{\dagger}(R) v_i \mathcal{D}(R) | \psi \rangle \stackrel{!}{=} R_{ij} \langle \psi | v_j | \psi \rangle.$$

Letztere Gleichung sollte natürlicherweise gelten. Also kann man definieren: Eine Menge von drei Operatoren $\{v_1, v_2, v_3\}$ bilden einen Vektoroperator $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$, wenn gilt

$$\mathcal{D}^{\dagger}(R) v_i \mathcal{D}(R) = R_{ij} v_j \quad (*)$$

Es genügt, den Kommutator mit dem Drehimpuls zu betrachten, der ja der Generator der Drehung ist (hier Bsp. \vec{r}):

$$[L_i, r_j] = \epsilon_{ikm} [r_k p_m, r_j] = \epsilon_{ikm} r_k [p_m, r_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} r_k.$$

Allgemein gilt: Äquivalent zu (*) ist \vec{v} ein Vektoroperator, wenn

$$[J_i, v_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} v_k.$$

UMSCHREIBEN IN jm -NOTATION:

Für das Symbol $v_m^{(j)}$ definiert man mit $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$:

$$v_0^{(1)} := v_3, \quad v_{\pm 1}^{(1)} := \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (v_1 \pm i v_2).$$

Die Kommutatoren mit J_z, J_{\pm} ergeben (mit $[J_i, v_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} v_k$):

$$\begin{aligned} [J_z, v_{\pm 1}^{(1)}] &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} ([J_z, v_1] \pm i [J_z, v_2]) = \mp \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (i v_2 \pm v_1) \\ &= \pm \hbar v_{\pm 1}^{(1)} \Rightarrow [J_z, v_m^{(1)}] = \hbar m v_m^{(1)}. \end{aligned}$$

$$[J_{\pm}, v_0^{(1)}] = [J_x \pm i J_y, v_3] = -i\hbar v_2 \pm i\hbar v_1 = \sqrt{2}\hbar v_{\pm 1}^{(1)}.$$

Vergleicht man nun $v_m^{(j)}$ mit $|j m\rangle$, so zeigt sich:

$$\begin{aligned} [J_z, v_m^{(1)}] &= \hbar m v_m^{(1)} \Leftrightarrow J_z |1 m\rangle = \hbar m |1 m\rangle \\ [J_{\pm}, v_0^{(1)}] &= \sqrt{2}\hbar v_{\pm 1}^{(1)} \Leftrightarrow J_{\pm} |1 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1 \pm 1\rangle \\ \Rightarrow [J_i, v_m^{(1)}] &\Leftrightarrow J_i |j m\rangle \end{aligned}$$

TENSOROPERATOREN:

Ein irreduzibler sphärischer Tensoroperator vom Rang j ist ein

Satz von $2j + 1$ Operatoren $T_m^{(j)}$ mit

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

Äquivalent für endliche Drehungen:

$$D^{\dagger}(R) T_m^{(j)} D(R) = \sum_{m'} T_m^{(j)} D_{m'm}^{(j)}(R).$$

BEISPIEL KUGELFLÄCHENFUNKTIONEN:

Sei $T_m^{(l)} = Y_{lm}$ (Operation = Multiplikation mit Y_{lm}). Es gilt allgemein $[\nabla_k, Y_{lm}]|\psi\rangle = (\nabla_k Y_{lm})|\psi\rangle + Y_{lm} \nabla_k |\psi\rangle - Y_{lm} \nabla_k |\psi\rangle$, wobei die Klammer $(\nabla_k Y_{lm})$ symbolisiert, dass ∇_k nur auf Y_{lm} angewendet wird. Damit erfüllen Y_{lm} die obigen Gleichungen:

$$\begin{aligned} [L_i, Y_{lm}] &= \epsilon_{ijk} r_j [p_k, Y_{lm}] = \epsilon_{ijk} r_j (p_k Y_{lm}) = (L_i Y_{lm}) \\ \Rightarrow [L_z, Y_{lm}] &= (L_z Y_{lm}) = \hbar m Y_{lm} \\ \Rightarrow [L_{\pm}, Y_{lm}] &= (L_{\pm} Y_{lm}) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{lm} \end{aligned}$$

1.5 Wigner-Eckert-Theorem

MATRIXELEMENTE VON TENSOROPERATOREN:

Betrachte mit $[J_z, T_{m_1}^{(j_1)}] = \hbar m_1 T_{m_1}^{(j_1)}$ und $J_z = J_z^\dagger$ (α, β stehe für irgendwelche Quantenzahlen) und wende J_z nach hinten und vorne an:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \alpha j m | [J_z, T_{m_1}^{(j_1)}] - \hbar m_1 T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle \\ &= \langle \alpha j m | \hbar(m - m_2) T_{m_1}^{(j_1)} - \hbar m_1 T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle \\ &= \hbar(m - m_2 - m_1) \langle \alpha j m | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle. \end{aligned}$$

Also muss gelten

$$\langle \alpha j m | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle = 0 \quad \text{für} \quad m \neq m_1 + m_2.$$

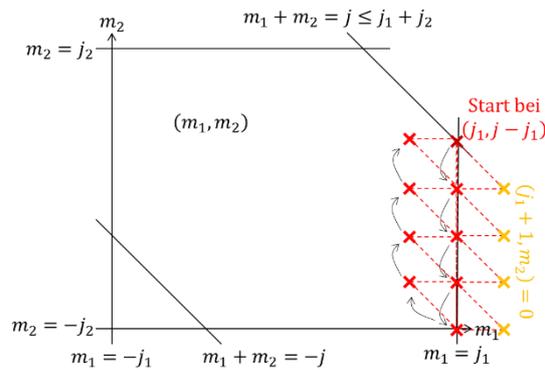
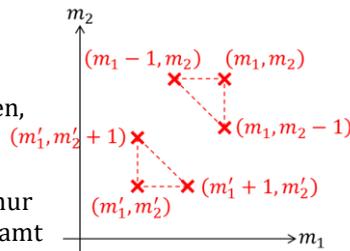
Analog nutze $[J_\pm, T_{m_1}^{(j_1)}] = \hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} T_{m_1 \pm 1}^{(j_1)}$ und $J_\pm^\dagger = J_\mp$ und wende J_\pm nach vorne bzw. hinten an:

$$\begin{aligned} &\hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} \langle \alpha j m | T_{m_1 \pm 1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle \\ &= \langle \alpha j m | [J_\pm, T_{m_1}^{(j_1)}] | \beta j_2 m_2 \rangle \\ &= \hbar \sqrt{j(j + 1) - m(m \mp 1)} \langle \alpha j, m \mp 1 | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle \\ &\quad - \hbar \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} \langle \alpha j m | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2, m_2 \pm 1 \rangle \end{aligned}$$

Diese Rekursionsformel gab es so sehr ähnlich (mit denselben Vorfaktoren) schon bei den Clebsch-Gordan-Koeffizienten in 1.3. Über diese Rekursionsgleichungen können immer drei (m_1, m_2) -Tupel miteinander verbunden werden:

$$\begin{aligned} &(m \mp 1, m_1, m_2) \\ &= (m, m_1 \pm 1, m_2) \\ &\quad + (m, m_1, m_2 \pm 1) \end{aligned}$$

Man kann so alle Tupel bestimmen, wenn man ausnutzt, dass die Tupel/CGK außerhalb der Fläche unten null sind (gelb), da die m_i nur zwischen $-j_i$ und j_i leben. Insgesamt kann man so viele Abhängigkeiten herstellen, dass sich eine eindeutige Lösung ergibt.



Somit entsprechen die Gleichungen gerade einem linearen Gleichungssystem $A\vec{x} = 0$ bzw. $A\vec{y} = 0$ mit

$$\begin{aligned} x_i &= \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle, \\ y_i &= \langle \alpha j m | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle, \end{aligned}$$

wobei jedes i für ein Tupel (m_1, m_2) steht. Die Matrix A besteht aus den Vorfaktoren, also den Wurzeln, die für die Rekursionsrelationen der CGK und der Tensoroperatoren identisch sind. Da die Lösung eindeutig ist, ist der Eigenwert $\lambda = 0$ von A nicht entartet. Sei $\vec{z} \neq 0$ Eigenvektor zur $\lambda = 0$. Es folgt:

$$\vec{x} = c_1 \vec{z}, \quad \vec{y} = c_2 \vec{z} \quad \Rightarrow \quad \vec{y} = c_2/c_1 \vec{x}.$$

Da c_2/c_1 nicht mehr von m_i abhängt, wird folgende Notation verwendet:

$$\frac{c_2}{c_1} = \frac{\langle \alpha j | | T_{m_1}^{(j_1)} | | \beta j_2 \rangle}{\sqrt{2j_2 + 1}}.$$

Damit ergibt sich das Wigner-Eckert-Theorem zu:

$$\langle \alpha j m | T_{m_1}^{(j_1)} | \beta j_2 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle \frac{\langle \alpha j | | T_{m_1}^{(j_1)} | | \beta j_2 \rangle}{\sqrt{2j_2 + 1}}.$$

2 Zeitabhängige Störungstheorie

2.1 Zeitabhängige Systeme und Wechselwirkungsbild

WECHSELWIRKUNGSBILD:

Betrachte einen zeitunabhängigen Hamilton H_0 mit bekannten Lösungen $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ und eine zeitabhängige Störung $\mathcal{V}(t)$. Es sei $|\alpha, t\rangle_S$ Eigenzustand zu $H_0 + \mathcal{V}$. Mit $|n, t\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar}|n\rangle$ lässt sich $|\alpha, t\rangle_S$ wie folgt in $|n\rangle$ entwickeln:

$$|\alpha, 0\rangle_S = \sum_n c_n(0) |n\rangle, \quad |\alpha, t\rangle_S = e^{-iH_0 t/\hbar} \sum_n c_n(t) |n\rangle.$$

Zustände im Wechselwirkungsbild (I für „interaction“) sind definiert als (S für „Schrödinger“):

$$|\alpha, t\rangle_I := e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t\rangle_S.$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t\rangle_S \\ &= -H_0 |\alpha, t\rangle_I + e^{iH_0 t/\hbar} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_S \\ &= -H_0 |\alpha, t\rangle_I + e^{iH_0 t/\hbar} (H_0 + \mathcal{V}) |\alpha, t\rangle_S = e^{iH_0 t/\hbar} \mathcal{V} |\alpha, t\rangle_S \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} \mathcal{V} e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t\rangle_I = \mathcal{V}_I |\alpha, t\rangle_I, \quad \mathcal{V}_I \text{ auch zeitabhängig.} \end{aligned}$$

Analog gilt auch die Heisenbergsche Bewegungsgleichung im Wechselwirkungsbild für einen Operator A_I :

$$i\hbar \frac{dA_I}{dt} = [A_I, H_0] + \frac{\partial A_I}{\partial t}.$$

VERGLEICH DER ZEITABHÄNGIGKEIT IN DEN BILDERN:

	Heisenberg	Wechselw.	Schrödinger
Zustände:	konstant	ZE mit \mathcal{V}_I	ZE mit H
Operatoren:	ZE mit H	ZE mit H	konstant

(ZE = Zeitentwicklung)

DIFFERENTIALGLEICHUNG FÜR DIE $c_n(t)$:

Mit $|\alpha, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t\rangle_S = \sum_n c_n(t) |n\rangle$ von oben folgt durch Projektion von $\langle n|$ an die Wechselwirkungsbildgl. von oben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n|\alpha, t\rangle_I = \langle n|\mathcal{V}_I|\alpha, t\rangle_I = \sum_m \langle n|\mathcal{V}_I|m\rangle \langle m|\alpha, t\rangle_I.$$

Mit $\langle n|\alpha, t\rangle_I = c_n(t)$ und

$$\langle n|\mathcal{V}_I|m\rangle = \langle n|e^{iH_0 t/\hbar} \mathcal{V} e^{-iH_0 t/\hbar}|m\rangle = e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \mathcal{V}_{nm},$$

wobei $\mathcal{V}_{nm} := \langle n|\mathcal{V}|m\rangle$, folgt mit $\omega_{nm} := (E_n - E_m)/\hbar$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = \sum_m \mathcal{V}_{nm} e^{i\omega_{nm} t} c_m(t).$$

2.2 Zeitabhängige Störungstheorie

DYSON-REIHE:

Schrödinger-Gleichung im Wechselwirkungsbild:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I = \mathcal{V}_I |\alpha, t\rangle_I.$$

Der Zeitentwicklungsoperator U_I ist eine unitäre Beziehung zwischen $|\alpha, t\rangle_I$ und $|\alpha, t_0\rangle_I$:

$$|\alpha, t\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I.$$

Durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung folgt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = \mathcal{V}_I(t) U_I(t, t_0),$$

da $|\alpha, t_0\rangle_I$ offensichtlich nicht von t abhängt. Integration der Differentialgleichung mit Anfangsbedingung $U_I(t_0, t_0) = 1$ liefert

$$i\hbar \int_{t_0}^t dt' \frac{\partial}{\partial t'} U_I(t', t_0) = i\hbar (U(t, t_0) - 1) \stackrel{!}{=} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_I(t') U_I(t', t_0)$$

$$\Leftrightarrow U_I(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_I(t') U_I(t', t_0).$$

Ein einmaliger rekursiver Iterationsschritt liefert

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_I(t') \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathcal{V}_I(t'') U_I(t'', t_0) \right) \\ &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_I(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' \mathcal{V}_I(t'') U_I(t'', t_0), \end{aligned}$$

Iteriert man unendlich oft, folgt daraus

$$U_I(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n)}} dt^{(n)} \mathcal{V}_I(t') \mathcal{V}_I(t'') \dots \mathcal{V}_I(t^{(n)}).$$

Offensichtlich muss $t \geq t' \geq t'' \geq \dots \geq t^{(n)}$ sein. Nach Ausführung aller Integrale wurde aber letztendlich dennoch jeder Zeitparameter $t', t'', \dots, t^{(n)}$ von t_0 bis t integriert. Man kann also auch gleich alle Integrale von t_0 bis t laufen lassen. Da $\mathcal{V}(t'), \mathcal{V}(t'')$ im Allgemeinen nicht kommutieren, ist die Zeitordnung dennoch wichtig; dies wird durch den Zeitordnungsoperator \mathcal{T} gekennzeichnet.

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (i\hbar)^n} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \int_{t_0}^{t^{(n)}} dt^{(n)} \mathcal{T} \mathcal{V}_I(t') \mathcal{V}_I(t'') \dots \mathcal{V}_I(t^{(n)}). \end{aligned}$$

Da es aber $n!$ Möglichkeiten gibt, diese n Zeiten zu ordnen, muss noch der Faktor $1/n!$ ergänzt werden. Damit folgt dann weiter:

$$U_I(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (i\hbar)^n} \mathcal{T} \left(\int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_I(t') \right)^n = \mathcal{T} e^{\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_I(t')}.$$

ÜBERGANGSAMPLITUDEN:

Ein Zustand sei zur Zeit t_0 im Eigenzustand $|i\rangle$ von H_0 . Zur Zeit t gilt dann

$$\sum_n c_n(t) |n\rangle = |i, t\rangle_I = U_I(t, t_0) |i, t_0\rangle_I = U_I(t, t_0) |i\rangle.$$

Damit folgt mit der iterativen Formel für $U_I(t, t_0)$ (mit $\langle n|\mathcal{V}_I|i\rangle = e^{i\omega_{in} t} \mathcal{V}_{ni}$ von 2.1):

$$\begin{aligned} c_n(t) &= \langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle \\ &= \delta_{ni} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n|\mathcal{V}_I(t')|i\rangle \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle n|\mathcal{V}_I(t') \mathcal{V}_I(t'')|i\rangle + \dots \\ &= \delta_{ni} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{V}_{ni}(t') e^{i\omega_{ni} t'} \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \sum_m \mathcal{V}_{nm}(t') \mathcal{V}_{mi}(t'') e^{i\omega_{nm} t'} e^{i\omega_{mi} t''} + \dots \\ &= c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots \end{aligned}$$

2.3 Fermis Goldene Regel für konstante Störung

KONSTANTE STÖRUNG:

Betrachte die Störung:

$$\mathcal{V}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ V, & t \geq 0 \end{cases}$$

Für $t_0 = 0$ und $n \neq i$ folgt ($\omega_{ni} = (E_n - E_i)/\hbar$):

$$\begin{aligned} c_n^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \mathcal{V}_{ni} e^{i\omega_{ni}t'} = \frac{V_{ni}}{i\hbar} \frac{e^{i\omega_{ni}t} - 1}{i\omega_{ni}} \\ &= -\frac{2iV_{ni}}{\hbar\omega_{ni}} e^{i\omega_{ni}t/2} \sin \omega_{ni}t/2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |c_n^{(1)}|^2 = \frac{|V_{ni}|^2 \sin^2 \omega_{ni}t/2}{\hbar^2 (\omega_{ni}t/2)^2} t^2 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} C \delta(\omega_{ni})$$

Für $t \rightarrow \infty$ geht dies gegen die δ -Funktion. Somit ist die Übergangswahrscheinlichkeit von $|i\rangle$ nach $|n\rangle$ vor allem für $E_n \approx E_i$ groß. Die Konstante C ergibt sich durch Integration der Gleichung (Substitution: $x := \omega_{ni}t/2$):

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_{ni} \frac{\sin^2 \omega_{ni}t/2}{(\omega_{ni}t/2)^2} t^2 = 2t \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = 2\pi t.$$

FERMIS GOLDENE REGEL IN ERSTER ORDNUNG:

Um die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand $|i\rangle$ zu einem Zustand mit Energie E_n zu berechnen, muss über alle entarteten Zustände mit dieser Energie summiert werden – Zustände mit $E_n \approx E_i$ werden ohnehin kaum angenommen:

$$\sum_{\substack{n \neq i \\ E_n \approx E_i}} |c_n^{(1)}(t)|^2 = \int dE_n |c_n^{(1)}(t)|^2 \rho(E_n).$$

Dabei ist $\rho(E_n)$ die Zustandsdichte. Für große t lässt sich wie oben gezeigt die δ -Funktion verwenden ($\delta(E_{ni}/\hbar) = \hbar \delta(E_{ni})$):

$$\begin{aligned} \int dE_n \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} 2\pi t \delta(\omega_{ni}) \rho(E_n) &\approx \int dE_n \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 t \delta(E_{ni}) \rho(E_n) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 t \rho(E_n)|_{E_n \approx E_i}. \end{aligned}$$

Die Übergangsrate (also Wahrscheinlichkeit pro Zeit) ist dann

$$w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_n)|_{E_n \approx E_i},$$

wobei das $i \rightarrow [n]$ für einen Übergang in einen beliebigen Zustand mit Energie E_n steht.

FERMIS GOLDENE REGEL IN ZWEITER ORDNUNG:

Für $t_0 = 0$ und $i \neq n$ gilt bis zur zweiten Ordnung

$$\begin{aligned} c_n^{(2)}(t) &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_m \mathcal{V}_{nm}(t') \mathcal{V}_{mi}(t'') e^{i\omega_{nm}t'} e^{i\omega_{mi}t''} \\ &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_m V_{nm} V_{mi} \int_0^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} \frac{e^{i\omega_{mi}t'} - 1}{i\omega_{mi}} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \int_0^t dt' (e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nm}t'}), \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt $\omega_{nm} + \omega_{mi} = \omega_{ni}$ verwendet wurde.

Wegen der Summe über m mittelt sich der Faktor $e^{i\omega_{nm}t'}$ weg:

$$c_n^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ni}t'} = \frac{1}{i\hbar} \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \frac{e^{i\omega_{ni}t} - 1}{i\omega_{ni}}.$$

Dies entspricht gerade $c_n^{(1)}$ mit $V_{ni} \rightarrow \sum_m V_{nm} V_{mi} / (E_i - E_m)$.

Damit folgt offensichtlich für Fermis Goldene Regel bis zur zweiten Ordnung:

$$w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{ni} + \sum_{E_m \neq E_i} \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \right|^2 \rho(E_n)|_{E_n \approx E_i}.$$

2.4 Fermis Goldene Regel für harmonische Störung

HARMONISCHE STÖRUNG:

Eine harmonische Störung kann geschrieben werden als

$$\mathcal{V}(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t},$$

sodass $\mathcal{V} = \mathcal{V}^\dagger$. Da sich jede Funktion $f(\omega)$ in eine Summe $e^{i\omega t}$ Fourier-zerlegen lässt, ist das ein wichtiges Beispiel.

Damit folgt für $t_0 = 0$ und $i \neq n$:

$$\begin{aligned} c_n^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \mathcal{V}_{ni} e^{i\omega_{ni}t'} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(V_{ni} \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ni} + \omega)t} + V_{ni}^\dagger \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ni} - \omega)t} \right). \end{aligned}$$

Der erste Term ist groß für $\omega_{ni} + \omega \approx 0$, der zweite für $\omega_{ni} - \omega \approx 0$. Man kann also eine Fallunterscheidung machen und je einen Term streichen. $c_n^{(1)}$ hat da die gleiche Form wie bei der konstanten Störung mit $\omega_{ni} \rightarrow \omega_{ni} \pm \omega$. Also ergibt sich für Fermis Goldene Regel (diesmal ohne Summe über die Zustände $[n]$):

$$w_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \begin{cases} |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i + \hbar\omega) & \text{Emission} \\ |V_{ni}^\dagger|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) & \text{Absorption} \end{cases}$$

2.5 Wechselwirkung mit klassischem E-Feld

Hamilton für elektronmagnetisches Feld (Elektron: $q = -e$,

Coloumb-Eichung: $[\vec{p}, \vec{A}] = 0$):

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} + \mathcal{O}(\vec{A}^2).$$

Für eine ebene Welle mit Amplitude $2A_0$ und Polarisation $\hat{\epsilon}$:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = 2A_0 \hat{\epsilon} \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) = A_0 \hat{\epsilon} (e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-i\omega t} + e^{-i\vec{k}\vec{r}} e^{i\omega t}).$$

Mit $H_0 = \vec{p}^2/2m$ ist der Störterm damit:

$$\mathcal{V}(t) = \frac{eA_0}{m} \underbrace{\hat{\epsilon} \vec{p} e^{-i\vec{k}\vec{r}}}_{\equiv \hat{V}} e^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t}.$$

Damit ist Fermis Goldene Regel für die Absorption (V^\dagger -Term):

$$w_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi e^2 A_0^2}{\hbar m^2} \left| \langle n | e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{\epsilon} \vec{p} | i \rangle \right|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega).$$

Der Wirkungsquerschnitt für die Absorption ist

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\text{Übergangsw./Zeit}}{\text{Photonenfluss}} = \frac{\text{Energie}}{\text{Zeit}} \text{ in } i \rightarrow n \text{ Strahlungsenergiefluss}.$$

Der Energiefluss der Strahlung/Photonen ist

$$\begin{aligned} \text{Energiefluss} &= \frac{\text{Energie}}{\text{Fläche} \cdot \text{Zeit}} = \text{Energiedichte} \cdot c \\ &= c \left(\frac{1}{2} (\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2) \right) = c \epsilon_0 \langle \vec{E}^2 \rangle. \end{aligned}$$

Mit $\vec{E} = -\partial \vec{A} / \partial t = -2A_0 \hat{\epsilon} \omega \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$ folgt

$$c \epsilon_0 \langle \vec{E}^2 \rangle = 4c \epsilon_0 A_0^2 \omega^2 \langle \sin^2(\vec{k}\vec{r} - \omega t) \rangle = 2c \epsilon_0 A_0^2 \omega^2.$$

Damit folgt für den Wirkungsquerschnitt ($\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$):

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\hbar\omega w_{i \rightarrow n}}{2c \epsilon_0 A_0^2 \omega^2} = \frac{4\pi^2 \hbar}{m^2 \omega} \alpha \left| \langle n | e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{\epsilon} \vec{p} | i \rangle \right|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega).$$

Für Licht mit $\lambda \gg$ Atomradius gilt $\vec{k}\vec{r} \ll 1$, also $e^{-i\vec{k}\vec{r}} \approx 1$. Für einen Hamilton $H_0 = \vec{p}^2/2m + V_c(r)$ gilt $[r_i, V_c] = 0$ und

$$[r_i, H_0] = \frac{1}{2m} [r_i, p_j p_j] = \frac{1}{m} p_j [r_i, p_j] = \frac{i\hbar}{m} p_i$$

$$\Rightarrow \langle n | e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{\epsilon} \vec{p} | i \rangle \approx \hat{\epsilon} \langle n | \vec{p} | i \rangle = \frac{\hat{\epsilon} m}{i\hbar} \langle n | [r, H_0] | i \rangle$$

$$= \frac{\hat{\epsilon} m}{i\hbar} (E_i - E_n) \langle n | r | i \rangle = i \hat{\epsilon} m \omega_{ni} \langle n | r | i \rangle$$

Damit folgt für den Wirkungsquerschnitt ($\delta(\alpha x) = \delta(x)/\alpha$):

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{abs}} &= \frac{\hbar\omega w_{i \rightarrow n}}{2c \epsilon_0 A_0^2 \omega^2} = \frac{4\pi^2 \hbar}{\omega} \alpha |\omega_{ni} \langle n | r | i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_{ni} - \hbar\omega) \\ &= 4\pi^2 \alpha \omega_{ni} |\langle n | r | i \rangle|^2 \delta(\omega_{ni} - \omega). \end{aligned}$$

2.6 Photoelektrischer Effekt

Beim Photoeffekt schlägt ein Photon der Energie $\hbar\omega$ ein Elektron aus seinem gebundenen Zustand $|i\rangle$ (z. B. Grundzustand des Wasserstoffatoms). Dabei soll die Energie $\hbar\omega$ viel größer als die Bindungsenergie sein, sodass das Elektron nach dem Herausschlagen (finaler Zustand) als Ebene Welle

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = L^{-3/2} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

angenommen werden kann, wobei $L^{-3/2}$ ein Normierungsfaktor darstellt (Würfel mit Kantenlänge L). Periodische

Randbedingungen $\langle \vec{r} + \vec{e}_i L | \vec{k} \rangle = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle$ sind erfüllt für $\vec{k} =$

$2\pi/L (n_x, n_y, n_z)^T$, wobei $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$. Für große L ist \vec{k} praktisch kontinuierlich. Mit der Zustandsdichte $(L/2\pi)^3$ folgt für den Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \int d^3k \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sigma_{\text{abs}} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int dk k^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sigma_{\text{abs}}$$

Dabei entspricht das Integral und die Zustandsdichte einer Summation über die Endzustände. Transformiert man das Integral in ein Integral über die Energie, nutzt man $E = (\hbar k)^2/2m$, woraus

$$dk k^2 = \frac{mk}{\hbar^2} dE = dE \frac{1}{\hbar^3} \sqrt{2m^3 E} = dE \rho(E)$$

und damit mit dem σ_{abs} aus 2.5, wobei E_n hier die finale Energie $E_f = E_i + \hbar\omega$ ist:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \int dE \frac{1}{\hbar^3} \sqrt{2m^3 E} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sigma_{\text{abs}} \\ &= \int dE \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi^2 \hbar}{m^2 \omega} \alpha \left| \langle \vec{k} | e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{\epsilon} \vec{p} | i \rangle \right|^2 \frac{\rho(E)}{=mk/\hbar^2} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \\ &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi^2 \alpha}{\hbar m \omega} k_f \left| \langle \vec{k}_f | e^{i\vec{k}_f \vec{r}} \hat{\epsilon} \vec{p} | i \rangle \right|^2, \end{aligned}$$

wobei \vec{k} der Wellenvektor des Photons ist.

Sei nun der initiale Zustand der Grundzustand eines wasserstoffähnlichen Atoms (Coulombpotential, aber Kernladung Z), also

$$\langle \vec{r} | i \rangle = \psi_i(\vec{r}) = Y_{00}(\theta, \varphi) R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}.$$

Dann lässt sich das Matrixelement berechnen, wobei für das einfallende Photon $\vec{k} = \omega/c \hat{n}$ und \hat{n} der Normalenvektor in \vec{k} -Richtung ist.

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_f | e^{i\omega \hat{n} \vec{r}/c} \hat{\epsilon} \vec{p} | i \rangle &= \hat{\epsilon} \int d^3r \frac{e^{-i\vec{k}_f \vec{r}}}{L^{3/2}} e^{\frac{i\omega \hat{n} \vec{r}}{c}} (-i\hbar \nabla) \psi_i(\vec{r}) \\ &= -\frac{i\hbar \hat{\epsilon}}{L^{3/2}} \int d^3r e^{-i\vec{q} \vec{r}} \nabla \psi_i(\vec{r}) = \frac{\hbar \hat{\epsilon} \vec{q}}{L^{3/2}} \int d^3r e^{-i\vec{q} \vec{r}} \psi_i(\vec{r}) \\ &= \frac{\hbar \hat{\epsilon} \vec{k}_f}{L^{3/2}} \int d^3r e^{-i\vec{q} \vec{r}} \psi_i(\vec{r}) = \frac{\hbar \hat{\epsilon} \vec{k}_f}{L^{3/2}} \phi_i(\vec{q}) \end{aligned}$$

Dabei wurde $\vec{q} := \vec{k}_f - \omega \hat{n}/c$ definitiert und im dritten Schritt partiell integriert, um die e -Funktion anstelle von ψ_i abzuleiten.

Da für den Polarisationsvektor $\hat{\epsilon} \perp \hat{n}$ gilt, folgte $\hat{\epsilon} \vec{q} = \hat{\epsilon} \vec{k}_f$.

$$\phi_i(\vec{q}) = 8\sqrt{\pi} (Z/a_0)^{5/2} (q^2 + Z^2/a_0^2)^{-2}$$

ist die Fouriertransformierte von $\psi_i(\vec{r})$. Damit folgt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\hbar \alpha}{2\pi m \omega} k_f |\hat{\epsilon} \vec{k}_f|^2 |\phi_i(\vec{q})|^2.$$

2.7 Energieverschiebung und Zerfallsbreite

Für eine konstante Störung (2.3) galt in 2. Ordnung

$$c_n^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \int_0^t dt' (e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nm}t'}).$$

Für $E_m \neq E_i \approx E_n$ oszilliert $e^{i\omega_{nm}t'}$ unter dem Integral schnell und fliegt weg. Doch was wenn $E_m = E_i$?

ADIABATISCHES EINSCHALTEN LIEFERT GLEICHES

ERGEBNIS:

Man betrachte $V(t) = e^{\eta t} V, \eta > 0$ (adiabatisches Einschalten) und setzt später $\eta \rightarrow 0$. Für $t_0 \rightarrow -\infty$ gilt $|n\rangle \rightarrow |i\rangle$:

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} = 0,$$

$$c_n^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} V_{ni} \int_{-\infty}^t dt' e^{\eta t'} e^{i\omega_{ni}t'} = \frac{V_{ni} e^{\eta t} e^{i\omega_{ni}t}}{i\hbar \eta + i\omega_{ni}}.$$

Damit ist die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit:

$$w_{n \rightarrow i} = \frac{d}{dt} |c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{2|V_{ni}|^2}{\hbar^2} e^{2\eta t} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i)$$

$\xrightarrow{\rightarrow \pi \delta(\omega_{ni}), \eta \rightarrow 0}$

Das ist gerade Fermis Goldene Regel, das adiabatische Einschalten funktioniert also.

ANWENDUNGSBEISPIEL: ZUSTAND UNVERÄNDERT

Für den Übergang, der den Zustand unverändert lässt, gilt:

$$c_i^{(0)}(t) = \delta_{ii} = 1$$

$$c_i^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{ii} e^{i\omega_{ii}t'} e^{\eta t'} = \frac{V_{ii} e^{\eta t}}{i\hbar \eta}$$

$$\begin{aligned} c_i^{(2)}(t) &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_m \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' V_{im} V_{mi} e^{i(\omega_{im} - i\eta)t'} e^{i(\omega_{mi} - i\eta)t''} \\ &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_m |V_{im}|^2 \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\omega_{im} - i\eta)t'} \frac{e^{i(\omega_{mi} - i\eta)t'}}{i(\omega_{mi} - i\eta)} \\ &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_m \frac{|V_{im}|^2}{\eta + i\omega_{mi}} \int_{-\infty}^t dt' e^{2\eta t'} = \frac{1}{i\hbar} \sum_m \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \frac{e^{2\eta t}}{2\eta} \\ &= \frac{|V_{ii}|^2 e^{2\eta t}}{(i\hbar)^2 2\eta^2} + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \frac{e^{2\eta t}}{2\eta}. \end{aligned}$$

Damit gilt für die Ableitung von c_i bis zur zweiten Ordnung:

$$\begin{aligned} \dot{c}_i(t) &= \frac{V_{ii} e^{\eta t}}{i\hbar} + \frac{|V_{ii}|^2 e^{2\eta t}}{(i\hbar)^2 2\eta} + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} e^{2\eta t} + \mathcal{O}(V^3) \\ &= \left(1 + \frac{V_{ii} e^{\eta t}}{i\hbar \eta}\right) \frac{V_{ii} e^{\eta t}}{i\hbar} + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} e^{2\eta t} + \mathcal{O}(V^3) \\ &= (c_i^{(0)} + c_i^{(1)} + \mathcal{O}(V^2)) \frac{V_{ii} e^{\eta t}}{i\hbar} + (c_i^{(0)} + \mathcal{O}(V)) \frac{1}{i\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} e^{2\eta t} \\ &= c_i(t) \left(\frac{V_{ii} e^{\eta t}}{i\hbar} + \frac{1}{i\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} e^{2\eta t} + \mathcal{O}(V^3) \right) \\ &\approx \frac{c_i(t)}{i\hbar} \left(V_{ii} + \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \right) = \frac{c_i(t)}{i\hbar} \Delta_i. \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde für kleine η und V genähert und schließlich Δ_i als dieser Klammerausdruck definiert. Die Lösung dieser Differentialgleichung ist offensichtlich $c_i(t) =$

$c_i(0) e^{-i\Delta_i t/\hbar}$ oder, im Schrödinger-Bild:

$$c_i(t) = c_i(0) e^{-i(E_i + \Delta_i)t/\hbar}.$$

Allgemein gilt in der Analysis mit dem Cauchy-Hauptwert CH:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\epsilon} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{x}{x^2 + \epsilon^2} - i \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \right) = \text{CH} \frac{1}{x} - i\pi \delta(x). \\ \Rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Delta_i^{(2)} &= \text{CH} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{im}|^2}{E_i - E_m} - i\pi \sum_{m \neq i} |V_{im}|^2 \delta(E_i - E_m). \end{aligned}$$

Ein Vergleich mit Fermis Goldener Regel zeigt

$$\frac{1}{2} \Gamma_i := \pi \sum_{m \neq i} |V_{im}|^2 \delta(E_i - E_m) = \frac{\hbar}{2} \sum_{m \neq i} w_{i \rightarrow m}$$

und damit folgt für $\eta \rightarrow 0$ (Wechselwirkungsbild):

$$c_i(t) = c_i(0) e^{-i\Delta_i t/\hbar} = c_i(0) e^{-i\text{Re}(\Delta_i)t/\hbar} e^{-\Gamma_i t/2\hbar}.$$

Eine Fouriertransformation von c_i im Schrödingerbild liefert

$$|\tilde{c}_i(E)|^2 \sim \frac{1}{(E - (E_i + \text{Re}\Delta_i))^2 + \Gamma_i^2/4},$$

also steht Γ_i für die Zerfallsbreite.

3 Identische Teilchen

3.1 Permutationen bei Vielteilchensystemen

PERMUTATIONSOPERATOR:

Zwei identische Teilchen können durch einen Produktzustand $|K'\rangle|K''\rangle$ beschrieben werden, wobei $K' \neq K''$ kollektiv für die Eigenwerte stehe. Es gibt dann eine „Austauschentartung“, weil $|K''\rangle|K'\rangle$ die gleiche Situation beschreibt. Der Permutationsoperator P_{ij} vertauscht in einem n -Teilchenzustand $|K'\rangle|K''\rangle \dots |K^{(n)}\rangle$ die Zustände an i -ter und j -ter Stelle. Alle möglichen Permutationen (auch Mehrfache $P_{ij}P_{kl}$) bilden die *symmetrische Gruppe* $S_n = \{P_\pi = \prod_{\{ij\}} P_{ij}\}$, wobei $\{ij\}$ einen Satz von Teilchenpaaren symbolisiert. Es gibt $n!$ Möglichkeiten n Teilchen anzuordnen, also hat S_n $n!$ Elemente (d.h. redundante wie z.B. $P_{ij}P_{kl} = P_{kl}P_{ij}$ für kommen nur einmal vor). Eigenschaften sind

$$P_{ij}^2 = 1, \quad P_{ij}P_{jk} \neq P_{jk}P_{ij},$$

d.h. zwei Operatoren, die u. A. die gleiche Position vertauschen kommutieren nicht.

PERMUTATION VON OBSERVABLEN:

Zwei observable Operatoren A_1, A_2 der auf das erste Teilchen bzw. das zweite Teilchen wirkt, also $A_1|a'\rangle|a''\rangle = a'|a'\rangle|a''\rangle$ und $A_2|a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle$, vertauscht unter dem

Permutationsoperator ($P_{12}^{-1} = P_{12}$):

$$P_{12}A_1P_{12}^{-1}|a'\rangle|a''\rangle = P_{12}A_1|a''\rangle|a'\rangle = P_{12}a''|a''\rangle|a'\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle = A_2|a'\rangle|a''\rangle \Rightarrow P_{12}A_1P_{12}^{-1} = A_2.$$

HAMILTONOPERATOR UND ZEITENTWICKLUNG FÜR $n = 2$:

Für einen Hamiltonoperator der Art

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}_1) + V_{\text{ext}}(\vec{r}_2) + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

gilt offensichtlich $[H, P_{12}] = 0$, H und P_{12} haben also gemeinsame Eigenzustände. Wegen $P_{12}^2 = 1$ sind die Eigenwerte von P gerade ± 1 , die Eigenfunktionen können also geschrieben werden als

$$|K'K''\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K'\rangle|K''\rangle \pm |K''\rangle|K'\rangle).$$

Da $|K'K''\rangle_{\pm}$ Eigenzustände von H sind, mischen sie nicht unter Zeitentwicklung.

HAMILTONOPERATOR UND ZEITENTWICKLUNG FÜR $n > 2$:

Für $n > 2$ gilt immer noch $[H, P_{ij}] = 0$, aber z. B. $[P_{12}, P_{23}] \neq 0$.

Man klassifiziert also die Zustände nach irreduziblen

Darstellungen der S_n . Jede Gruppe S_n hat zwei eindimensionale irreduzible Darstellungen:

Symmetrische Darstellung $\pi \rightarrow 1$

Symmetrischer Zustand (N ist Normierung):

$$|K' \dots K^{(n)}\rangle_+ := N \sum_{\pi \in S_n} P_\pi |K'\rangle \dots |K^{(n)}\rangle$$

Antisymmetrische Darstellung

$$\pi \rightarrow \delta_\pi = \begin{cases} +1, & P_\pi = \text{gerade Anzahl von } P_{ij} \\ -1, & P_\pi = \text{ungerade Anzahl von } P_{ij} \end{cases}$$

Antisymmetrischer Zustand:

$$|K' \dots K^{(n)}\rangle_- := N \sum_{\pi \in S_n} \delta_\pi P_\pi |K'\rangle \dots |K^{(n)}\rangle, \quad \text{hier: } N = \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

Für den antisymmetrischen Zustand gilt

$$\begin{aligned} P_{ij}|K' \dots K^{(n)}\rangle_- &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\pi \in S_n} \delta_\pi \underbrace{P_{ij}P_\pi}_{=P_{\pi'}} |K'\rangle \dots |K^{(n)}\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\pi' \in S_n} \delta_{\pi'} P_{\pi'} |K'\rangle \dots |K^{(n)}\rangle = -|K' \dots K^{(n)}\rangle_-. \end{aligned}$$

Experimenteller Befund: Alle Teilchen sind entweder Bosonen (symmetrisch) oder Fermionen (antisymmetrisch).

3.2 Vielteilchensysteme in Atomen

AUSTAUSCHDICHTE:

Man betrachte den Hamilton für zwei identische Fermionen

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + V(\vec{x}_1) + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(\vec{x}_2),$$

wobei

$$\left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + v(\vec{x}_i) \right) \psi_{A,B}(\vec{x}_i) = E_{A,B} \psi_{A,B}(\vec{x}_i)$$

für zwei verschiedene Eigenfunktionen ϕ_A und ϕ_B gilt. Die Wellenfunktion ist dann

$$\psi_A(\vec{x}_1)\psi_B(\vec{x}_2)\chi,$$

wobei χ den Spinanteil der Wellenfunktion symbolisiert. Wegen der Fermi-Dirac-Statistik muss diese allerdings noch antisymmetrisiert werden:

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_A(\vec{x}_1)\psi_B(\vec{x}_2) \pm \psi_A(\vec{x}_2)\psi_B(\vec{x}_1)),$$

wobei das $+$ für einen Singlet-Zustand (d. h. antisymmetrischer Spinanteil) und das $-$ für einen Triplet-Zustand gilt (d. h. symmetrischer Spinanteil).

Die Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen 1 im Volumen dx_1^3 bei \vec{x}_1 und dass Teilchen 2 im Volumen dx_2^3 bei \vec{x}_2 ist, beträgt dann

$$\begin{aligned} |\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|^2 dx_1^3 dx_2^3 &= \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\Psi^*(\vec{x}_1, \vec{x}_2) dx_1^3 dx_2^3 \\ &= \left(\frac{1}{2} (|\psi_A(\vec{x}_1)|^2 |\psi_B(\vec{x}_2)|^2 + |\psi_A(\vec{x}_2)|^2 |\psi_B(\vec{x}_1)|^2) \right. \\ &\quad \left. \pm \text{Re}(\psi_A(\vec{x}_1)\psi_B(\vec{x}_2)\psi_A^*(\vec{x}_2)\psi_B^*(\vec{x}_1)) \right) dx_1^3 dx_2^3. \quad (*) \end{aligned}$$

Der Realteil-Term ist die sogenannte Austauschdichte, denn er ist null, wenn die Wellenfunktionen sich nicht überlappen.

BEISPIEL HELIUMATOM:

Hamilton-Operator des Heliumatoms:

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}.$$

Dabei wird er letzte Term als Störung V zum Rest H_0 betrachtet. Man betrachte den H_0 -Eigenzustand

$$|K'\rangle|K''\rangle = |100\rangle|nlm\rangle \chi_{m_s1 m_s2},$$

das heißt ein Elektron sei im Grundzustand. Dann ist

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{nlm}(\vec{x}_2) \pm \psi_{100}(\vec{x}_2)\psi_{nlm}(\vec{x}_1))$$

und die Eigenwerte von H_0 sind

$$E^{(0)} = E_{100} + E_{nlm}, \quad E_{nlm} = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0 n^2}.$$

Der Energie-Shift durch den V -Term in erster Ordnung zeitunabhängiger Störungstheorie beträgt

$$\Delta = \left\langle \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \right\rangle = I \pm J$$

mit (die ersten beiden Terme in Gl. (*) sind integriert identisch)

$$I = \int dx_1^3 dx_2^3 |\psi_{100}(\vec{x}_1)|^2 |\psi_{nlm}(\vec{x}_2)|^2 V,$$

$$J = \int dx_1^3 dx_2^3 \psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{nlm}(\vec{x}_2)V\psi_{100}^*(\vec{x}_2)\psi_{nlm}^*(\vec{x}_1) \in \mathbb{R}.$$

Es ergibt sich also eine Energieaufspaltung, da die Singlet-Zustände (Parahelium) andere Energieshifts haben als die Triplet-Zustände (Orthohelium). H ist nicht explizit spinabhängig, dennoch induziert der Austauschterm einen spinabhängigen Wechselwirkungsterm. Es gilt

$$\frac{2}{\hbar^2} \vec{s}_1 \vec{s}_2 = \frac{2}{\hbar^2} (\vec{s}^2 - \vec{s}_1^2 - \vec{s}_2^2) = s(s+1) - \frac{3}{2} = \begin{cases} -3/2 & s = 0 \\ 1/2 & s = 1 \end{cases}$$

und damit lässt sich die Spinabhängigkeit hinschreiben:

$$\Delta = I \pm J = I - \frac{1}{2} J - J \begin{cases} -3/2 & s = 0 \\ 1/2 & s = 1 \end{cases} = I - \frac{1}{2} J - \frac{J}{\hbar^2} \vec{s}_1 \vec{s}_2.$$

4 Pfadintegrale

4.1 Pfadintegraldarstellung für Propagation

Ziel ist es, den Propagator (q_j ist eine Ortvariable)

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \langle q_f | e^{-i\hat{H}(t_f - t_i)/\hbar} | q_i \rangle$$

zu berechnen. Man unterteilt nun das Zeitintervall (t_i, t_f) in $n + 1$ Teilintervalle $t_i < t_1 < \dots < t_j < \dots < t_n < t_f$. Ein Intervall hat dann die Dauer

$$\tau := \frac{t_f - t_i}{n + 1} = t_{j+1} - t_j.$$

Nun fügt man für jede Zeit $\mathbb{I} = \int dq_j |q_j t_j\rangle \langle q_j t_j|$ ein:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \dots \int dq_1 \dots dq_n \langle q_f t_f | q_n t_n \rangle \langle q_n t_n | q_{n-1} t_{n-1} \rangle \dots \langle q_1 t_1 | q_i t_i \rangle.$$

Jedes der Matrixelemente lässt sich wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle &= \langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}(t_{j+1} - t_j)/\hbar} | q_j \rangle = \langle q_{j+1} | e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} | q_j \rangle \\ &\approx \langle q_{j+1} | q_j \rangle - \frac{i\tau}{\hbar} \langle q_{j+1} | \hat{H} | q_j \rangle. \end{aligned}$$

Der erste Term lässt sich in der Fourier-transformierten δ -Funktion schreiben,

$$\langle q_{j+1} | q_j \rangle = \delta(q_{j+1} - q_j) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip}{\hbar}(q_{j+1} - q_j)},$$

der zweite Term ergibt unter der Annahme $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | q_j \rangle &+ \langle q_{j+1} | V(\hat{q}) | q_j \rangle \\ &= \iint dp dp' \frac{\langle q_{j+1} | p' \rangle}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'q_{j+1}/\hbar} \frac{\langle p' | \frac{\hat{p}^2}{2m} | p \rangle}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\langle p | q_j \rangle}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipq_j/\hbar} \\ &+ V(q_j) \delta(q_{j+1} - q_j) \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q_{j+1} - q_j)/\hbar} \frac{p^2}{2m} + V(q_j) \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q_{j+1} - q_j)/\hbar}. \end{aligned}$$

Eingesetzt ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \langle q_{j+1} t_{j+1} | q_j t_j \rangle &\approx \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip}{\hbar}(q_{j+1} - q_j)} \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} + V(q_j) \right) \right) \\ &\approx \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip}{\hbar}(q_{j+1} - q_j)} e^{-\frac{i\tau H}{\hbar}(p, q_j)}, \end{aligned}$$

wobei $H(p, q_j)$ jetzt die klassische Hamiltonfunktion ist, also kein Operator mehr. Damit ergibt sich:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \dots \int Dq Dp \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n (p_j (q_{j+1} - q_j) - \tau H(p_j, q_j)) \right),$$

$$\text{mit } Dq := \prod_{j=1}^n dq_j, \quad Dp := \prod_{j=0}^n \frac{dp_j}{2\pi\hbar}.$$

Für $H(p, q) = p^2/2m + V(q)$ lässt sich das Argument der Exponentialfunktion quadratisch ergänzen:

$$\begin{aligned} \frac{p_j}{\hbar} (q_{j+1} - q_j) - \frac{\tau p_j^2}{2m\hbar} - \frac{\tau}{\hbar} V(q_j) \\ = - \left(\sqrt{\frac{\tau}{2m\hbar}} p_j - \frac{q_{j+1} - q_j}{\sqrt{2\tau\hbar/m}} \right)^2 + \frac{m(q_{j+1} - q_j)^2}{2\tau\hbar} - \frac{\tau}{\hbar} V(q_j) \end{aligned}$$

und damit folgt unter Verwendung von $\int_{-\infty}^{\infty} dp_j e^{-\alpha p_j^2} = \sqrt{\pi/\alpha}$:

$$\begin{aligned} \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \dots \int Dq \exp \left(\frac{i\tau}{\hbar} \sum_{j=0}^n \left(\frac{m(q_{j+1} - q_j)^2}{2\tau^2} - V(q_j) \right) \right) \\ &= \int \dots \int Dq \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt L(q, \dot{q}) \right) = \int \dots \int Dq e^{\frac{i}{\hbar} S[q, \dot{q}]}, \end{aligned}$$

$$\text{mit } Dq := Dq \left(\frac{2\pi m\hbar}{(2\pi\hbar)^2 i\tau} \right)^{\frac{n+1}{2}} = Dq \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\tau} \right)^{\frac{n+1}{2}}.$$

5 Relativistische QM

5.1 Vierervektoren

GRUNDBEGRIFFE UND EIGENSCHAFTEN:

\vec{r}, t kombiniert man zu Vierervektoren

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \vec{r})$$

wobei das Quadrat invariant ist:

$$x \cdot x = x^\mu x_\mu = (ct)^2 - \vec{r}^2 = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu.$$

$g_{\mu\nu}$ ist der Metrische Tensor, der die kovariante

Vierervektordarstellung definiert:

$$x_\mu := g_{\mu\nu} x^\nu = (ct, -\vec{r}).$$

Die Positionen (oben/unten) von Indizes, über die summiert wird, lassen sich immer vertauschen:

$$x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu = g^{\mu\nu} g_{\nu\alpha} x^\alpha \Rightarrow g^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu}.$$

In Matrixschreibweise ist $g^{\mu\nu}$ also die Einheitsmatrix und daher

$$g^{\mu\nu} = g^{\mu\eta} g_{\eta\nu} \Leftrightarrow \mathbb{I} = g^{-1} g \Rightarrow g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}^{-1}.$$

Eine Lorentz-Transformation

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$$

sollte die Länge invariant lassen, also muss gelten:

$$\begin{aligned} x' \cdot x' &= x'^\mu g_{\mu\nu} x'^\nu = x^\eta \Lambda^\mu_\eta g_{\mu\nu} \Lambda^\nu_\epsilon x^\epsilon \stackrel{!}{=} x^\eta g_{\eta\epsilon} x^\epsilon \\ \Rightarrow g_{\eta\epsilon} &= \Lambda^\mu_\eta g_{\mu\nu} \Lambda^\nu_\epsilon = \Lambda^\mu_\eta \Lambda_{\mu\epsilon} \Leftrightarrow g^\eta_\epsilon = \Lambda_\mu^\eta \Lambda^\mu_\epsilon \end{aligned}$$

Also gilt $\Lambda^T \Lambda = \mathbb{I} \Leftrightarrow \Lambda^T = \Lambda^{-1}$.

LISTE VON PHYSIKALISCHEN VIERERVEKTOREN:

Ortsvierervektor:	$x^\mu = (ct, \vec{r})$
Viererimpuls:	$p^\mu = (E/c, \vec{p})$
Viererpotential:	$A^\mu = (\phi/c, \vec{A})$
Viererstrom:	$j^\mu = (c\rho, \vec{j})$
Viererableitung:	$\partial^\mu = \partial/\partial x_\mu = (c^{-1}\partial/\partial t, -\vec{\nabla})$

5.2 Klein-Gordon-Gleichung

HERLEITUNG DER GLEICHUNG:

Unter den Ersetzungsregeln $E \rightarrow i\hbar \partial/\partial t$ und $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$ folgt

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right) = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla}\right) = i\hbar \partial^\mu.$$

Klassisch erhält man die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen durch Anwendung der Ersetzungsregeln für

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi.$$

Entsprechend folgt aus der relativistischen Energiegleichung:

$$\begin{aligned} \frac{E^2}{c^2} &= \vec{p}^2 + (mc)^2 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\hbar^2 \nabla^2 \psi + (mc)^2 \psi \\ \Leftrightarrow 0 &= \hbar^2 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right) \psi + (mc)^2 \psi = \hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu \psi + (mc)^2 \psi \\ &\Leftrightarrow \left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi = 0. \end{aligned}$$

Das ist die Klein-Gordon-Gleichung. Löst man diese mit einem Ebene-Wellen-Ansatz

$$\psi_p(x) \sim e^{-ipx/\hbar} = e^{-iEt/\hbar} e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$$

folgt

$$\begin{aligned} \left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi_p &= \left(\left(-\frac{i}{\hbar} p_\mu\right)\left(-\frac{i}{\hbar} p^\mu\right) + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi_p \\ &= \left(\frac{p^2}{\hbar^2} + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi_p = 0 \\ \Leftrightarrow (mc)^2 &= p^2 = \left(\frac{E}{c}, \vec{p}\right)^2 = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 \\ \Leftrightarrow E &= \pm \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}. \end{aligned}$$

Es gibt also auch negative Energie und das Energiespektrum ist nach unten unbeschränkt.

WAHRSCHEINLICHKEITSSTROM:

Gesucht ist nun eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation für ψ_p über die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ und den -strom \vec{j} . Also sollte die Kontinuitätsgleichung

$$0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = \frac{1}{c} \frac{\partial (c\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = \partial_\mu j^\mu$$

folgen. Mit der Klein-Gordon-Gleichung folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^* \left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi - \psi \left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) \psi^* \\ &= \underbrace{\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi}_{=0} - \underbrace{\psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^*}_{=0} = \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*). \end{aligned}$$

Nimmt man also an, dass $j^\mu \sim \psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*$, sodass $\partial_\mu j^\mu = 0$ erfüllt ist. Außerdem ist die Raumkomponente j^μ so

proportional zum nicht-relativistischen Wahrscheinlichkeitsstrom (siehe QM I, 1.8):

$$j^\mu \sim \left(\psi^* \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi^*, -\frac{(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)}{=2im/\hbar \vec{j}}\right).$$

Man definiert man also

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*).$$

Für einen stationären Zustand $\psi_E(x) = e^{-iEt/\hbar} \psi_E(\vec{x})$ folgt

$$\rho = \frac{j^0}{c} = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^*\right) = \frac{E}{mc^2} |\psi_E(\vec{x})|^2.$$

Da aber die Energie E auch negativ sein kann, kann ρ offensichtlich nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. Eine Lösung ist es, j^μ nicht als Wahrscheinlichkeitsstrom, sondern als elektromagnetischen Strom zu interpretieren und ρ als Ladungsdichte. Für $\rho \gtrless 0$ würden dann etwa π^\pm (Pionen) dominieren.

5.3 Dirac-Gleichung

HERLEITUNG DER GLEICHUNG:

Die Klein-Gordon-Gleichung ergibt sich aus der relativistischen Energiegleichung

$$E^2/c^2 - \vec{p}^2 - (mc)^2 = p_\mu p^\mu - (mc)^2 = 0,$$

doch dies ergab problematische negative Energien, was letztlich daran lag, dass E quadratisch vorkommt. Dirac versucht nun, diese Gleichung zu faktorisieren, um eine Gleichung linear in E zu bekommen. Gesucht sind daher Koeffizienten γ_μ , sodass

$$\begin{aligned} 0 &= p_\mu p^\mu - (mc)^2 = (\gamma_\mu p^\mu + mc)(\gamma_\nu p^\nu - mc) \\ &= \gamma_\mu \gamma_\nu p^\mu p^\nu - (\gamma_\mu p^\mu - \gamma_\nu p^\nu)mc - (mc)^2 \\ &= \gamma_\mu \gamma_\nu p^\mu p^\nu - (mc)^2. \end{aligned}$$

Offensichtlich muss also gelten, dass

$$\begin{aligned} p_\mu p^\mu &= p_0^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2 = \gamma_\mu \gamma_\nu p^\mu p^\nu \\ &= \gamma_0^2 p_0^2 + \gamma_1^2 p_1^2 + \gamma_2^2 p_2^2 + \gamma_3^2 p_3^2 + \sum_{\mu < \nu} (\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu) p^\mu p^\nu. \end{aligned}$$

Offensichtlich müssen die γ_μ Matrizen sein und sie müssen

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}$$

erfüllen, wobei $g_{00} = 1$, $g_{ii} = -1$ und $g_{\mu\nu} = 0$, $\mu \neq \nu$ ist. Das geht mit 4×4 -Matrizen, zum Beispiel

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}.$$

Um nun $p_\mu p^\mu - (mc)^2$ zu erfüllen, genügt es auch, $(\gamma_\mu p^\mu - mc) = 0$ zu erfüllen. Mit $p_\mu \rightarrow i\hbar \partial_\mu$ folgt dann die Dirac-Gleichung:

$$(i\hbar \gamma_\mu \partial^\mu - mc)\psi = 0.$$

ψ ist nun ein Vektor mit vier Komponenten, genannt *Bi-Spinor*.

WAHRSCHEINLICHKEITSSTROM:

Gesucht ist nun wieder ein Strom $j^\mu = (\rho c, \vec{j})$ mit $\partial_\mu j^\mu = 0$ und $\rho \geq 0$. Multipliziert man an die obige Dirac-Gleichung und an die komplex-konjugierte Form γ_0 und ψ bzw. ψ^\dagger und addiert diese beiden Ausdrücke erhält man mit $\gamma_0^2 = 1 = \sigma_0$:

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^\dagger \gamma_0 (i\hbar \gamma_\mu \partial^\mu - mc)\psi + \psi \gamma_0 (i\hbar \gamma_\mu \partial^\mu + mc)\psi^\dagger \\ &= i\hbar (\psi^\dagger \gamma_0 \gamma_\mu \partial^\mu \psi + \psi \gamma_0 \gamma_\mu \partial^\mu \psi^\dagger) \\ &= i\hbar \left(\psi^\dagger \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi^\dagger \gamma_0 \gamma_i \nabla^i \psi + \psi \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger - \psi \gamma_0 \gamma_i \nabla^i \psi^\dagger \right) \\ &= i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \psi - \nabla^i \psi^\dagger \gamma_0 \gamma_i \psi \right) \end{aligned}$$

Mit $\rho = \psi^\dagger \psi = \sum_{i=1}^4 |\psi_i|^2 > 0$ und $j_i = c\psi^\dagger \gamma_0 \gamma_i \psi$ folgt damit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \vec{j} = 0.$$

Der erhaltene Strom ist also

$$\begin{aligned} j^\mu &= (c\rho, \vec{j}) = (c\psi^\dagger \psi, c\psi^\dagger \gamma_0 \vec{\gamma} \psi) = (c\psi^\dagger \gamma_0 \gamma^0 \psi, c\psi^\dagger \gamma_0 \vec{\gamma} \psi) \\ &= c\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi = c\psi \gamma^\mu \psi, \end{aligned}$$

wobei der Pauli-adjungierte Spinor $\bar{\psi} := \psi^\dagger \gamma^0$ definiert wurde.

LÖSUNGEN MIT NEGATIVER ENERGIE:

Für eine ebene Welle $\psi(x) = w(p)e^{-ip_\mu x^\mu/\hbar}$ folgt

$$0 = (i\hbar \gamma_\mu \partial^\mu - mc)\psi = (\gamma_\mu p^\mu - mc)w.$$

Sei $\vec{p} = 0$, sodass $\gamma_\mu p^\mu = \gamma_0 E/c$. Damit folgt

$$\begin{pmatrix} (E/c - mc)\sigma_0 & 0 \\ 0 & -(E/c + mc)\sigma_0 \end{pmatrix} w(p) = 0.$$

Dieses Eigenwertproblem zwei Eigenwerte mit je zwei Eigenvektoren,

$$\begin{aligned} E &= mc^2, & w_1 &= (1, 0, 0, 0)^T, & w_2 &= (0, 1, 0, 0)^T, \\ E &= -mc^2, & w_2 &= (0, 0, 1, 0)^T, & w_3 &= (0, 0, 0, 1)^T. \end{aligned}$$

5.4 Kopplung an das EM-Feld: Pauli-Gleichung

Ein externes EM-Feld wird beschrieben durch das Potential

$$A^\mu = (\phi/c, \vec{A}), \quad \text{wobei } \vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \quad \vec{E} = -\nabla \phi - \partial \vec{A} / \partial t.$$

Das Prinzip der Minimalen Kopplung besagt, dass im Hamiltonformalismus das EM-Feld durch $p^\mu \rightarrow p^\mu - qA^\mu$ einbezogen wird. In der Quantenmechanik folgt damit

$$p^\mu = i\hbar \partial^\mu - qA^\mu = i\hbar \left(\partial^\mu + \frac{iq}{\hbar} A^\mu \right) = i\hbar D^\mu,$$

wobei hiermit die kovariante Ableitung D^μ definiert wurde. Die Dirac-Gleichung wird damit zu

$$(i\hbar \gamma_\mu D^\mu - mc)\psi = 0.$$

Man betrachte nun den nicht-relativistischen Grenzfall, für den die Energie $E = mc^2 + E_S$ ist, wobei $E_S \ll mc^2$ die Energie aus der Schrödinger-Gleichung ist. Es gilt $\psi \sim e^{-iEt/\hbar}$ und man wähle den Ansatz

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}, t) \\ \chi(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = e^{-imc^2 t/\hbar} e^{-iE_S t/\hbar} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}) \\ \chi(\vec{x}) \end{pmatrix},$$

wobei φ, χ Vektoren mit zwei Komponenten seien. Definiert man die Abkürzung $\pi^i := -i\hbar \nabla^i - qA^i$ lässt sich die Dirac-Gleichung in Komponenten schreiben als (multipliziert mit c)

$$\begin{aligned} 0 &= c \left(i\hbar \gamma_0 \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{iq}{\hbar} \phi \right) - \vec{\gamma} \vec{\pi} - mc \right) \psi \\ &= i\hbar \gamma_0 \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\chi} \end{pmatrix} + mc^2 \gamma_0 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - \gamma_0 q \phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - c \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \vec{\pi} \\ -\vec{\sigma} \vec{\pi} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \\ &\quad - mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \\ &= i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ -\dot{\chi} \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} - q\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} - c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \vec{\pi} \chi \\ -\vec{\sigma} \vec{\pi} \varphi \end{pmatrix} - mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die obere und untere Gleichung liefert nun ($V := q\phi$)

$$i\hbar \dot{\varphi} = q\phi \varphi + c\vec{\sigma} \vec{\pi} \chi,$$

$$i\hbar \dot{\chi} - q\phi \chi = (E_S - V)\chi = c\vec{\sigma} \vec{\pi} \varphi - 2mc^2 \chi.$$

Dabei wurde $\dot{\chi} = -iE_S/\hbar \chi$ verwendet.

Man kann nun nach χ umstellen

$$\chi = \frac{c\vec{\sigma} \vec{\pi}}{2mc^2 + E_S - V} \varphi \approx \frac{\vec{\sigma} \vec{\pi}}{2mc} \varphi$$

und dies in nicht-relativistischer Näherung $E_S, V \ll mc^2$ die erste Gleichung einsetzen:

$$i\hbar \dot{\varphi} \approx q\phi \varphi + \frac{(\vec{\sigma} \vec{\pi})^2}{2m} \varphi.$$

Unter Verwendung von $\epsilon_{ijk} \{\pi_i, \pi_j\} = 0$ (ϵ ist antisymmetrisch, der Antikommutator symmetrisch) sowie $[\pi_i, \pi_j] = -q[p_i, A_j] - q[A_i, p_j] = i\hbar q \left((\nabla_i A_j) - (\nabla_j A_i) \right)$ (siehe auch QM I, 1.5) folgt

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \vec{\pi})^2 &= \sigma_i \sigma_j \pi_i \pi_j = \left(\frac{1}{2} [\sigma_i, \sigma_j] + \frac{1}{2} \{\sigma_i, \sigma_j\} \right) \pi_i \pi_j \\ &= (i\epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij}) \pi_i \pi_j = i\epsilon_{ijk} \sigma_k \pi_i \pi_j + \vec{\pi}^2 \\ &= i\epsilon_{ijk} \sigma_k \left(\frac{1}{2} [\pi_i, \pi_j] + \frac{1}{2} \{\pi_i, \pi_j\} \right) + \vec{\pi}^2 \\ &= \vec{\pi}^2 - \frac{q\hbar}{2} \sigma_k \left(\epsilon_{ijk} (\nabla_i A_j) - \underbrace{\epsilon_{ijk} (\nabla_j A_i)}_{=-\epsilon_{ijk} (\nabla_i A_j)} \right) \\ &= (\vec{p} - q\vec{A})^2 - q\hbar \vec{\sigma} \vec{B}. \end{aligned}$$

Damit folgt die sogenannte Pauli-Gleichung ($\vec{s} = \hbar/2 \vec{\sigma}$):

$$i\hbar \dot{\varphi} \approx \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} \varphi - \frac{q}{2m} 2\vec{s} \vec{B} \varphi + q\phi \varphi.$$

Für ein schwaches homogenes Magnetfeld $\vec{A} = \vec{B} \times \vec{r}/2 \Rightarrow \nabla \times \vec{A} = \vec{B}$ folgt

$$\begin{aligned} \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} &\approx \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} (\vec{p} \vec{A} + \vec{A} \vec{p}) \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{4m} (\vec{p} (\vec{B} \times \vec{r}) + (\vec{B} \times \vec{r}) \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} \vec{B} \underbrace{(\vec{r} \times \vec{p})}_{=\vec{L}} \end{aligned}$$

und damit

$$i\hbar \dot{\varphi} \approx \frac{\vec{p}^2}{2m} \varphi - \frac{q}{2m} (\vec{L} + 2\vec{s}) \vec{B} \varphi.$$

Der Landé-Faktor $g = 2$ für den Spin taucht hier ganz natürlich auf.

5.5 Relativistische Korrektur, Darwin-Term

Der Einfachheit halber sei nun $\vec{A} = 0$, also $\vec{\pi} = \vec{p}$ und $(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2 = \sigma_i\sigma_j\pi_i\pi_j = (\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k)\pi_i\pi_j = \pi_i\pi_i = \vec{p}^2$. In den Gleichungen aus 5.4 vernachlässigt man $E_S - V$ gegenüber mc^2 nun nicht, sondern nähert für $E_S - V \ll mc^2$:

$$\chi = \frac{1}{2mc} \frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{1 + (E_S - V)/2mc^2} \varphi \approx \frac{1}{2mc} \left(1 - \frac{E_S - V}{2mc^2}\right) \vec{\sigma}\vec{\pi}\varphi.$$

Wegen $\dot{\varphi} = -iE_S/\hbar \varphi$ (folgt aus der Definition von φ in 5.4) folgt aus der Gleichung $i\hbar\dot{\varphi} = q\phi\varphi + c\vec{\sigma}\vec{\pi}\chi$ (mit $V := q\phi$)

$$(E_S - V)\varphi \approx \frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{2m} \left(1 - \frac{E_S - V}{2mc^2}\right) \vec{\sigma}\vec{\pi}\varphi = \frac{(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2}{2m} \varphi - \frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{4m^2c^2} (E_S - V) \vec{\sigma}\vec{\pi}\varphi.$$

Nun gilt für den Term (da $\vec{\pi} = \vec{p}$)

$$(E_S - V) \vec{\sigma}\vec{\pi}\varphi = \vec{\sigma}\vec{p} \underbrace{(E_S - V)\varphi}_{=(\vec{\sigma}\vec{p})^2\varphi/2m+\dots} + \vec{\sigma} \underbrace{[E_S - V, \vec{p}]\varphi}_{=-i\hbar(\nabla V)\varphi}.$$

Dabei wurde für den $(E_S - V)\varphi$ -Term die obige Gleichung verwendet und Terme $\mathcal{O}(E_S - V)$ vernachlässigt. Einsetzen ergibt (man bedenke $(\vec{\sigma}\vec{p})^2 = \vec{p}^2$ von ganz oben)

$$(E_S - V)\varphi \approx \frac{(\vec{\sigma}\vec{p})^2}{2m} \varphi - \frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{4m^2c^2} \left(\frac{(\vec{\sigma}\vec{p})^3}{2m} - i\hbar\vec{\sigma}(\nabla V) \right) \varphi$$

$$\Leftrightarrow E_S\varphi = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V \right) \varphi - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} \varphi + \frac{i\hbar}{4m^2c^2} \underbrace{\sigma_i\sigma_j}_{i\epsilon_{ijk}\sigma_k+\delta_{ij}} p_i(\nabla V)_j \varphi$$

$$= \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} + V \right) \varphi + \frac{\hbar(\nabla V \times \vec{p})\vec{\sigma}}{4m^2c^2} \varphi + \frac{i\hbar}{4m^2c^2} \vec{p}(\nabla V)\varphi$$

Der \vec{p}^4 -Term ist die relativistische Korrektur. Für ein Zentralpotential folgt $\nabla V = dV/dr \vec{r}/r$ und man erhält den Term für die Spin-Bahn-Kopplung:

$$\frac{\hbar(\nabla V \times \vec{p})\vec{\sigma}}{4m^2c^2} = \frac{\vec{L}\vec{S}}{2m^2c^2r} \frac{dV}{dr}.$$

DARWIN-TERM:

Der letzte Term ist problematisch, da nach Produktregel

$$i\hbar\vec{p}(\nabla V) = \hbar^2((\nabla^2 V) + (\nabla V)\nabla)$$

folgt. $\nabla^2 V$ und ∇V sind Faktoren, keine Operatoren, aber ∇ ist ein Operator und er ist nicht hermitesch! Daher ist die Wahrscheinlichkeitsdichte nicht erhalten. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist mit $\chi \approx \vec{\sigma}\vec{\pi}\varphi/2mc$ aus 5.4

$$\psi^\dagger\psi = \varphi^\dagger\varphi + \chi^\dagger\chi \approx \varphi^\dagger\varphi + \varphi^\dagger \left(\frac{\vec{\sigma}\vec{\pi}}{2mc} \right)^2 \varphi \approx \left| \left(1 + \frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi \right|^2,$$

wobei die letzte Näherung gilt, wenn $\mathcal{O}(\vec{p}^4)$ vernachlässigt werden. Nun zeigt sich, dass die Wahrscheinlichkeitsinterpretation für $|\phi|^2$ okay ist, wobei

$$\phi = \Omega\varphi := \left(1 + \frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi.$$

Damit $\Omega\Omega^{-1} = 1 + \mathcal{O}(\vec{p}^4)$ ist, muss $\Omega^{-1} = 1 - \vec{p}^2/8m^2c^2$ sein.

Die Gleichung $E_S\varphi = H_\varphi\varphi$, wobei H_φ die ganzen Operatoren (kin- Energie, rel. Korrektur, Spin-Bahn-Koppl. usw.) zusammenfasst, soll nun ersetzt werden durch $E_S\phi = H\phi$. Was ist H ? Mit $\varphi = \Omega^{-1}\phi$ folgt für $E_S\varphi = H_\varphi\varphi$

$$E_S\phi = \Omega H_\varphi \Omega^{-1} \phi = H_\varphi\phi + \left[\frac{\vec{p}^2}{8m^2c^2}, H_\varphi \right] \phi$$

$$= H_\varphi\phi + \frac{1}{8m^2c^2} [\vec{p}^2, V]\phi,$$

wobei $H_\varphi \approx \vec{p}^2/2m + V + \mathcal{O}(1/(mc)^2)$ genähert wurde. Also ist mit der Produktregel für beide Ableitungen in $\nabla_i\nabla_i V$

$$\begin{aligned} H - H_\varphi &\approx -\frac{\hbar^2}{8m^2c^2} [\nabla^2, V] = -\frac{\hbar^2}{8m^2c^2} (\nabla_i\nabla_i V - V\nabla_i\nabla_i) \\ &= -\frac{\hbar^2}{8m^2c^2} ((\nabla_i\nabla_i V) + 2(\nabla_i V)\nabla_i) = -\frac{\hbar^2}{8m^2c^2} ((\nabla^2 V) + 2(\nabla V)\nabla) \end{aligned}$$

Also folgt für H ganz hinten der Darwin-Term

$$\begin{aligned} H\phi &= \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} + V \right) \phi + \frac{\hbar(\nabla V \times \vec{p})\vec{\sigma}}{4m^2c^2} \phi \\ &+ \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} ((\nabla^2 V) + (\nabla V)\nabla)\phi - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} ((\nabla^2 V) + 2(\nabla V)\nabla)\phi \\ &= \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3c^2} + V \right) \phi + \frac{\hbar(\nabla V \times \vec{p})\vec{\sigma}}{4m^2c^2} \phi + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} ((\nabla^2 V))\phi \end{aligned}$$

5.6 Allgemeine Lorentz-Transformation von Spinoren

DEFINITION DER LORENTZ-TRANSFORMATION:

Eine Lorentz-Transformation ist eine Transformation $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$, derart, dass die relativistische Länge erhalten bleibt:

$$x' \cdot x' = g_{\mu\nu} x'^\mu x'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\epsilon \Lambda^\nu_\sigma x^\epsilon x^\sigma \stackrel{!}{=} g_{\epsilon\sigma} x^\epsilon x^\sigma$$

$$\Rightarrow g_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\epsilon \Lambda^\nu_\sigma = \Lambda_{\nu\epsilon} \Lambda^\nu_\sigma \stackrel{!}{=} g_{\epsilon\sigma} \Leftrightarrow \Lambda_\nu^\epsilon \Lambda^\nu_\sigma \stackrel{!}{=} g^\epsilon_\sigma = \delta^\epsilon_\sigma.$$

Also gilt $(\Lambda^{-1})^\epsilon_\nu = \Lambda_\nu^\epsilon$ und $\det \Lambda = \pm 1$.

INFINITESIMALE LORENTZ-TRANSFORMATION:

Man betrachte eine infinitesimale Lorentz-Transformation

$$\Lambda^\epsilon_\mu = g^\epsilon_\mu + \omega^\epsilon_\mu,$$

sodass

$$\begin{aligned} g^\epsilon_\sigma = \Lambda_\nu^\epsilon \Lambda^\nu_\sigma &= (g_\nu^\epsilon + \omega_\nu^\epsilon)(g^\nu_\sigma + \omega^\nu_\sigma) \approx g^\epsilon_\sigma + \omega^\epsilon_\sigma + \omega_\sigma^\epsilon \\ &\Leftrightarrow \omega_{\epsilon\sigma} = -\omega_{\sigma\epsilon}. \end{aligned}$$

Also ist ω eine antisymmetrische 4×4 -Matrix, hat also 6 freie Parameter: Drei für Drehungen mit Generatoren \vec{J} und drei für Boosts mit Generatoren \vec{K} .

LORENTZ-TRANSFORMATION VON DIRAC-SPINOREN:

Die Dirac-Gleichung sollte in allen Inertialsystemen gelten, also

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(x) = 0, \quad \left(i\gamma'^\mu \partial'_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x') = 0.$$

Gesucht ist eine lineare Abbildung $S(\Lambda)$ mit

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x').$$

Automatisch sollte gelten, dass $S(\Lambda_1\Lambda_2) = S(\Lambda_1)S(\Lambda_2)$, für $\Lambda_1 = \mathbb{I}$ folgt daraus $S(\mathbb{I}) = \mathbb{I}$, für $\Lambda_2 = \Lambda_1^{-1}$ folgt $S(\Lambda^{-1}) = S^{-1}(\Lambda)$. Die $S(\Lambda)$ sollen nun konstruiert werden. Zunächst setzt man $\psi(x) = S(\Lambda^{-1})\psi'(x')$ in die Dirac-Gleichung:

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) S(\Lambda^{-1})\psi'(x') = 0$$

$$\Leftrightarrow 0 = S(\Lambda) \left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) S(\Lambda^{-1})\psi'(x')$$

$$= \left(iS(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda^{-1})\partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x').$$

Transformation der Ableitung $\partial_\mu = \partial x'^\nu / \partial x^\mu \partial'_\nu = \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu$:

$$0 = \left(iS(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda^{-1})\Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x').$$

Offensichtlich muss also $S(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda^{-1})\Lambda^\nu_\mu \stackrel{!}{=} \gamma^\nu$ sein, um die transformierte Dirac-Gleichung zu erhalten. Multipliziert man $S(\Lambda^{-1})$ von links und $S(\Lambda)$ von rechts, erhält man

$$\gamma^\mu \Lambda^\nu_\mu \stackrel{!}{=} S(\Lambda^{-1})\gamma^\nu S(\Lambda),$$

da Λ^ν_μ nur eine Matrix-Komponente ist und mit S kommutiert. Für eine infinitesimale Transformation $\Lambda^\nu_\mu = g^\nu_\mu + \omega^\nu_\mu$ macht man einen Ansatz

$$S(\Lambda) = \mathbb{I} - \frac{i}{4} \sigma_{\alpha\beta} \omega^{\alpha\beta},$$

wobei $-i\sigma_{\alpha\beta}/4$ der zu bestimmende Koeffizient ist. Damit $S(\Lambda)S(\Lambda^{-1}) = \mathbb{I} + \mathcal{O}(\omega^2)$ ist, muss $S(\Lambda^{-1}) = \mathbb{I} + i\sigma_{\alpha\beta}\omega^{\alpha\beta}/4$ sein.

Da ω antisymmetrisch ist, tragen nur antisymmetrische Anteile von σ bei. Setzt man all dies ein, erhält man

$$\gamma^\mu (g^\nu_\mu + \omega^\nu_\mu) \stackrel{!}{=} \left(\mathbb{I} + \frac{i}{4} \sigma_{\alpha\beta} \omega^{\alpha\beta} \right) \gamma^\nu \left(\mathbb{I} - \frac{i}{4} \sigma_{\alpha\beta} \omega^{\alpha\beta} \right)$$

$$\Leftrightarrow \gamma^\mu \omega^\nu_\mu = \frac{i}{4} \omega^{\alpha\beta} [\sigma_{\alpha\beta}, \gamma^\nu] + \mathcal{O}(\omega^2).$$

Zum Koeffizientenvergleich zwischen der linken und rechten Seite ist es sinnvoll, $\gamma^\mu \omega^\nu_\mu = \omega^{\alpha\beta} g^\nu_\alpha \gamma_\beta = \omega^{\alpha\beta} (g^\nu_\alpha \gamma_\beta - g^\nu_\beta \gamma_\alpha)/2$ zu schreiben. Dann folgt:

$$[\gamma^\nu, \sigma_{\alpha\beta}] = 2i(g^\nu_\alpha \gamma_\beta - g^\nu_\beta \gamma_\alpha).$$

Da $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}$, stehen rechts Produkte von drei γ -Matrizen, antisymm. in α, β . Man wähle daher den Ansatz $\sigma_{\alpha\beta} = N[\gamma_\alpha, \gamma_\beta]$:

$$\frac{1}{N} [\gamma^\nu, \sigma_{\alpha\beta}]$$

$$= \gamma^\nu (\gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha) - (\gamma_\alpha \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma_\alpha) \gamma^\nu$$

$$+ \underbrace{\gamma_\alpha \gamma^\nu \gamma_\beta - \gamma_\beta \gamma^\nu \gamma_\alpha - \gamma_\alpha \gamma^\nu \gamma_\beta + \gamma_\beta \gamma^\nu \gamma_\alpha}_{=0}$$

$$= 2g^\nu_\alpha \gamma_\beta - 2g^\nu_\beta \gamma_\alpha - 2\gamma_\alpha g^\nu_\beta + 2\gamma_\beta g^\nu_\alpha$$

$$= 4(g^\nu_\alpha \gamma_\beta - g^\nu_\beta \gamma_\alpha) \stackrel{!}{=} 2i(g^\nu_\alpha \gamma_\beta - g^\nu_\beta \gamma_\alpha)/N.$$

Also gilt $\sigma_{\alpha\beta} = i[\gamma_\alpha, \gamma_\beta]/2$. Es gilt damit für endliche Drehungen

$$S(\Lambda) = \exp(-i\omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}/4).$$

5.7 Lorentz-Transf. des Wahrscheinlichkeitsstroms

Mit $\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$ folgt

$$\sigma_{\alpha\beta}^\dagger = (i[\gamma_\alpha, \gamma_\beta]/2)^\dagger = (-i[\gamma_\beta^\dagger, \gamma_\alpha^\dagger]/2) = i[\gamma_\alpha^\dagger, \gamma_\beta^\dagger]/2 = i[\gamma^0 \gamma_\alpha \gamma^0, \gamma^0 \gamma_\beta \gamma^0]/2 = i\gamma^0 [\gamma_\alpha, \gamma_\beta] \gamma^0/2 = \gamma^0 \sigma_{\alpha\beta} \gamma^0$$

und für $\sigma_{\alpha\beta}^{\dagger n}$ aus der Exponentialreihe $\gamma^0 \sigma_{\alpha\beta}^n \gamma^0$ und mit 5.6 auch

$$S^\dagger(\Lambda) = \exp\left(\frac{i}{4} \omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}^\dagger\right) = \gamma^0 \exp\left(\frac{i}{4} \omega^{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}\right) \gamma^0 = \gamma^0 S(\Lambda^{-1}) \gamma^0.$$

Für $\bar{\psi}$, das in $j^\mu = c\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$ auftaucht, folgt daher

$$\begin{aligned} \bar{\psi}'(x') &= \psi'^{\dagger}(x')\gamma^0 = (S(\Lambda)\psi(x))^\dagger\gamma^0 = \psi^\dagger(x)S^\dagger(\Lambda)\gamma^0 \\ &= \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^0 S^\dagger(\Lambda)\gamma^0 = \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^0\gamma^0 S(\Lambda^{-1})\gamma^0\gamma^0 \\ &= \psi^\dagger(x)\gamma^0 S(\Lambda^{-1}) = \bar{\psi}(x)S(\Lambda^{-1}). \end{aligned}$$

Das Transformationsverhalten für $\bar{\psi}$ ist einfacher, als für ψ^\dagger , zusammengefasst gilt

$$\psi'(x') = S\psi(x) \quad \text{und} \quad \bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}.$$

Der Wahrscheinlichkeitsstrom transformiert sich also zu

$$\begin{aligned} j'^\mu(x') &= c\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = c\bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^\mu S\psi(x) \\ &= c\bar{\psi}(x)\Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu\psi(x) = \Lambda^\mu_\nu c\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x) = \Lambda^\mu_\nu j^\nu(x), \end{aligned}$$

wobei $S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu$ aus 5.6 sowie die Tatsache verwendet wurde, dass Λ^μ_ν als bloße Zahl (Komponente) mit $\bar{\psi}$ kommutiert. Dieser Wahrscheinlichkeitsstrom transformiert sich also wie ein 4-Vektor.

5.8 Paritätstransformation und Fermionen-Bilineare

PARITÄTSTRANSFORMATION:

Für eine Paritätstransformation

$$x'^\mu = (ct, -\vec{x}) = \Lambda(ct, \vec{x}) = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$$

muss gerade $\Lambda^\mu_\nu = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ sein (Numerisch ist das gleich $g^{\mu\nu}$, aber bei $g^{\mu\nu}$ sind beide Indizes oben! Man kann in Gleichungen also nicht Λ^μ_ν durch $g^{\mu\nu}$ ersetzen.). Zur Transf. von Spinoren ist eine Matrix P gesucht mit $\psi'(x') = P\psi(x)$ und $P^{-1}\gamma^\mu P = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu$. Einfache Lösung: $P = \gamma^0$, denn $P^{-1}\gamma^\mu P = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0$ ist gleich γ^μ für $\mu = 0$ und $-\gamma^\mu$ für $\mu = 1, 2, 3$.

BASIS FÜR EINEN FERMIONEN-BILINEARAUSDRUCK:

Definiert man $\xi(x) := \bar{\psi}(x)\mathbb{I}\psi(x)$ mit Einheitsmatrix \mathbb{I} so ist dies ein Skalar, also Lorentz-invariant, denn

$$\xi'(x) = \bar{\psi}'(x')\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}S\psi(x) = \xi(x).$$

Allgemein kann man Fermionen-Bilineare schreiben als $\bar{\psi}\Gamma\psi$, mit einer 4×4 -Matrix Γ . 4×4 -Matrizen hat 16 unabhängige Komponenten, also hat deren vollständige Basis 16 Elemente.

Eine gute Wahl ist für die Basis ist

$$\begin{aligned} 1 \text{ Skalar:} & \quad \Gamma^S = \mathbb{I} \\ 4 \text{ Vektoren:} & \quad \Gamma^\mu = \gamma_\mu \\ 6 \text{ Tensoren:} & \quad \Gamma^{\mu\nu} = \sigma_{\mu\nu} = i[\gamma_\mu, \gamma_\nu]/2 \\ 1 \text{ Pseudoskalar:} & \quad \Gamma^P = \gamma_5 := \gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \\ 4 \text{ Axialvektoren:} & \quad \Gamma^A_\mu = \gamma_\mu\gamma_5 \end{aligned}$$

Natürlich sind alle diese Γ^X Matrizen, aber einige transformieren sich wie Skalare, andere wie Vektoren usw. unter einer Lorentz-Transformation.

GAMMA-5:

Eigenschaften von $\gamma_5 := \gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$:

$$\gamma_5\gamma^\mu = -\gamma^\mu\gamma_5 \Leftrightarrow \{\gamma_5, \gamma_\mu\} = 0,$$

$$\begin{aligned} \gamma_5\sigma_{\mu\nu} &= \frac{i}{2}\gamma_5[\gamma_\mu, \gamma_\nu] = \sigma_{\mu\nu}\gamma_5 \Leftrightarrow [\gamma_5, \sigma_{\mu\nu}] = 0 \\ &\Rightarrow [\gamma_5, S] = [\gamma_5, \exp(-i\omega^{\alpha\beta}\sigma_{\alpha\beta}/4)] = 0. \end{aligned}$$

BEISPIELE:

Tensor $T^{\mu\nu} := \bar{\psi}\sigma^{\mu\nu}\psi$:

$$\Rightarrow T'^{\mu\nu} = \bar{\psi}'S^{-1}\sigma^{\mu\nu}S\psi = \frac{i}{2}\bar{\psi}[S^{-1}\gamma^\mu S, S^{-1}\gamma^\nu S]\psi = \Lambda^\mu_\epsilon\Lambda^\nu_\kappa T^{\epsilon\kappa}.$$

($S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu$ aus 5.6 und Λ^μ_ϵ ist bloß Zahl/Komponente)

Axialvektor $A^\mu := \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_5\psi$ (Lorentz-/Paritätstransf.):

$$\text{LT} \Rightarrow A'^\mu = \bar{\psi}'S^{-1}\gamma^\mu\gamma_5 S\psi = \bar{\psi}S^{-1}\gamma^\mu S\gamma_5\psi = \Lambda^\mu_\nu A^\nu$$

$$\text{PT} \Rightarrow A'^\mu = \bar{\psi}'P^{-1}\gamma^\mu\gamma_5 P\psi = \bar{\psi}\gamma^0\gamma^\mu\gamma_5\gamma^0\psi = -\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_5\psi = -A^\mu.$$

Wegen diesem Minus transformiert A^μ nicht wie ein Vektor, sondern wie ein sog. Axialvektor.

5.9 Drehungen und Boosts von Spinoren

DREHUNG UM DIE Z-ACHSE:

Eine Drehung um ω um die z-Achse $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$ lässt sich durch

$$\Lambda^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ 0 & \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\omega & 0 \\ 0 & \omega & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = g^\mu_\nu + \omega^\mu_\nu$$

bewerkstelligen, wobei zuletzt die Näherung für ein infinitesimales ω gemacht wurde (für oben/unten Indizes ist g^μ_ν die Einheitsmatrix). Es gilt $\omega^{12} = -\omega \Leftrightarrow \omega^{21} = \omega$ und daher

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{i}{4}\omega^{12}\sigma_{12} + \omega^{21}\sigma_{21}\right) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega\sigma_{12}\right),$$

wobei das S aus 5.6 verwendet, wie auch, dass $\omega^{\alpha\beta}$ und $\sigma_{\alpha\beta}$ antisymmetrisch sind. Drehungen können immer mit einem Generator S_z als $S = \exp(-i\omega S_z/\hbar)$ geschrieben werden, der in diesem Fall offensichtlich

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_{12} = \frac{i\hbar}{4}[\gamma_1, \gamma_2] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

ist (man verwendet dabei $[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3$). Die w_i sind Eigenzust. von S_z mit Eigenwerten $w_{1,3} \rightarrow \hbar/2, w_{2,4} \rightarrow -\hbar/2$.

BOOSTS:

Gesucht sind die $\omega^{\alpha\beta}$ einer infinitesimalen Lorentz-Transformation für einen Boost in ein Inertialsystem mit Geschwindigkeit \vec{v} . Ansatz mit Richtung $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ und Rapidität ω (I sei die Matrix ohne ω):

$$\omega^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & n_1 & n_2 & n_3 \\ -n_1 & 0 & 0 & 0 \\ -n_2 & 0 & 0 & 0 \\ -n_3 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \omega, \quad \vec{n}^2 = 1.$$

Daraus folgt, da $\sigma_{\alpha\beta}$ symmetrisch ist mit $\vec{\gamma} := (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$

$$\begin{aligned} S(\Lambda) &= \exp\left(-\frac{i}{4}\sigma_{\alpha\beta}\omega^{\alpha\beta}\right) = \exp\left(-\frac{i}{4}(\sigma_{0i}\omega^{0i} + \sigma_{i0}\omega^{i0})\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{2}\omega^{0i}\sigma_{0i}\right) = \exp\left(\frac{1}{4}\omega\vec{n}[\gamma_0, -\vec{\gamma}]\right) = \exp\left(-\frac{1}{2}\omega\vec{n}\vec{\alpha}\right), \end{aligned}$$

wobei $\vec{\alpha} := \gamma_0\vec{\gamma}$ und $[\gamma_0, -\vec{\gamma}] = -\gamma_0\vec{\gamma} + \vec{\gamma}\gamma_0 = -2\gamma_0\vec{\gamma}$ verwendet wurde.

RAPIDITÄT:

Für Λ folgt ($\hat{\omega}$ sei die Matrix $\omega^{\alpha\beta}$)

$$\Lambda^\mu_\nu = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(g + \frac{\hat{\omega}}{N}\right)^N = \exp\left(\begin{pmatrix} 0 & -n_1 & -n_2 & -n_3 \\ -n_1 & 0 & 0 & 0 \\ -n_2 & 0 & 0 & 0 \\ -n_3 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \omega\right) = e^{\omega I}.$$

Die Minuszeichen in der ersten Matrixzeile kommen daher, dass nun ein Index oben und einer unten ist. I stehe für diese Matrix. ω ist die Rapidität. Für den Fall $\vec{n} = (1, 0, 0)$ folgt

$$I = \begin{pmatrix} -\sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I^2 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow I^{2n} = I^2, \quad I^{2n+1} = I.$$

Also gilt

$$\Lambda = e^{\omega I} = \cosh\omega I + \sinh\omega I = \begin{pmatrix} \cosh\omega & -\sinh\omega & 0 \\ -\sinh\omega & \cosh\omega & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0 \end{pmatrix}.$$

Aus der bekannten Lorentz-Transformation folgt

$$\begin{aligned} x'^0 &= \gamma(x^0 - vx^1/c) \stackrel{!}{=} x^0 \cosh\omega - x^1 \sinh\omega \Rightarrow \cosh\omega = \gamma \\ x'^1 &= \gamma(x^1 - vx^0/c) \stackrel{!}{=} x^1 \cosh\omega - x^0 \sinh\omega \Rightarrow \tanh\omega = v/c. \end{aligned}$$

Für ein Teilchen mit $p^\mu = (E/c, \vec{p})$, $\vec{p}/|\vec{p}| = \vec{n}$ gilt

$$\frac{v}{c} = \tanh\omega = \frac{|\vec{p}|c}{E}, \quad \gamma = \cosh\omega = \frac{E}{mc^2},$$

was offensichtlich ist, wenn man $|\vec{p}| = \gamma m v$ und $E = \gamma m c^2$ einsetzt. Die Rapidität eines Teilchens ist dann

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{1}{2} \ln \frac{e^\omega}{e^{-\omega}} = \frac{1}{2} \ln \frac{\cosh\omega + \sinh\omega}{\cosh\omega - \sinh\omega} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \tanh\omega}{1 - \tanh\omega} \\ &= \frac{1}{2} \ln \frac{E + |\vec{p}|c}{E - |\vec{p}|c}. \end{aligned}$$

5.10 Ebene-Wellen-Lösungen der Dirac-Gleichung

TEILCHEN IN RUHE:

Die Dirac-Gleichung $(i\hbar\gamma_\mu\partial^\mu - mc)\psi(x) = 0$ hat Lösungen

$$\psi(x) = e^{-ip\cdot x/\hbar} w(\vec{p}),$$

wobei $w(\vec{p})$ Spinoren sind, die eigentlich von p (dem Viererimpuls) abhängen; wegen $E^2 = (mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2$ ist p aber unter Kenntnis von \vec{p} bereits eindeutig definiert. Für ein Teilchen in Ruhe ist $p^\mu = (E/c, 0) = (\pm mc, 0)$ und es folgt, dass für $E > 0$ die Spinoren $w_1(0) = (1, 0, 0, 0)$ und $w_2(0) = (0, 1, 0, 0)$ und für $E < 0$ die Spinoren $w_3(0) = (0, 0, 1, 0)$ und $w_4(0) = (0, 0, 0, 1)$ die Dirac-Gleichung lösen (siehe 5.3 unten).

Es ist nun praktischer, immer $E > 0$ zu wählen, sodass immer

$p^\mu = (+\sqrt{mc^2 + \vec{p}^2}, \vec{p})$ gilt und die vier Lösungen dafür zu

schreiben als

$$\psi(x) = e^{-ip\cdot x/\hbar} w_{1,2}(\vec{p}), \quad \psi(x) = e^{ip\cdot x/\hbar} w_{3,4}(\vec{p})$$

$$\Rightarrow (\gamma_\mu p^\mu - mc)w_{1,2}(\vec{p}) = 0, \quad (\gamma_\mu p^\mu + mc)w_{3,4}(\vec{p}) = 0.$$

EBENE-WELLEN-LÖSUNGEN:

Gesucht sind Ebene-Wellen-Lösungen mit dem Impuls $p^\mu = (E/c, \vec{p})$ und der Impulsrichtung $\hat{p} := \vec{p}/|\vec{p}|$. Sie können hergeleitet werden durch einen Boost in $-\hat{p}$ -Richtung eines Teilchen ins Ruhe mit $p_{\text{Ruhe}} = (mc, 0)$:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= S(\Lambda)\psi_{\text{Ruhe}}(x_{\text{Ruhe}}) \\ &= \exp(\pm i p_{\text{Ruhe}} x_{\text{Ruhe}}/\hbar) S(\Lambda)w_i(\vec{p}_{\text{Ruhe}}) \\ &= \exp(\pm i p x/\hbar) S(\Lambda)w_i(0), \end{aligned}$$

wobei eingesetzt wurde, dass das Skalarprodukt $p x$ Lorentz-invariant und $\vec{p}_{\text{Ruhe}} = 0$ ist. Das Produkt $\hat{p}\vec{\alpha}$ mit $\vec{\alpha} := \gamma_0\vec{\gamma}$ (aus 5.9) lässt sich schreiben als

$$\hat{p}\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}\vec{\sigma} \\ \hat{p}\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow (\hat{p}\vec{\alpha})^2 = \begin{pmatrix} (\hat{p}\vec{\sigma})^2 & 0 \\ 0 & (\hat{p}\vec{\sigma})^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix},$$

da $(\hat{p}\vec{\sigma})^2 = \hat{p}^2$ (In 5.4 wurde $(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2$ für $\vec{\pi} = \vec{p} - q\vec{A}$ berechnet.

Für $\vec{A} = 0$ folgt $(\vec{\sigma}\vec{\pi})^2 = \vec{\pi}^2 = \vec{p}^2$). $S(\Lambda)$ ist in diesem Fall, ausgehen von 5.9 mit $\vec{\alpha} = \gamma_0\vec{\gamma}$

$$S(\Lambda) = e^{-\omega\vec{\pi}\vec{\alpha}/2} = e^{\omega\hat{p}\vec{\alpha}/2} = \cosh \omega/2 + \hat{p}\vec{\alpha} \sinh \frac{\omega}{2}$$

$$= \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \frac{1}{\sqrt{E+mc^2}} \begin{pmatrix} E+mc^2 & 0 & p_z c & (p_x - ip_y)c \\ 0 & E+mc^2 & (p_x + ip_y)c & -p_z c \\ p_z c & (p_x - ip_y)c & E+mc^2 & 0 \\ (p_x + ip_y)c & -p_z c & 0 & E+mc^2 \end{pmatrix}.$$

Im letzten Schritt wurde verwendet, dass (mit 5.9, unten)

$$\cosh \omega/2 = \sqrt{\frac{1 + \cosh \omega}{2}} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}}$$

$$\sinh \omega/2 = \sqrt{\cosh^2 \omega/2 - 1} = \sqrt{\frac{E - mc^2}{2mc^2}} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}}$$

$$= \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \sqrt{\frac{E^2 - (mc^2)^2}{(E + mc^2)^2}} = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \frac{|\vec{p}|c}{E + mc^2}.$$

Da $\psi(x) = \exp(\pm i p x/\hbar) S(\Lambda)w_i(0)$ gilt, sind die $w_i(\vec{p})$ im geboosteten System offensichtlich $S(\Lambda)w_i(0)$. Da $w_i(0)$ die trivialen Einheitsvektoren (z. B. $w_2(0) = (0, 1, 0, 0)$) sind, sind die neuen $w_i(\vec{p})$ gerade die Spalten der obigen Matrix $S(\Lambda)$.

5.11 Der Dirac-See

Auch in der Dirac-Gleichung sind negative Energie $E = \pm\sqrt{(mc^2)^2 + (\vec{p}c)^2}$ erlaubt. $E(|\vec{p}|)$ bildet zwei Hyperbeln mit y-Schnittpunkten $\pm mc^2$. Grundsätzlich sind also nach wie vor Übergänge von Zuständen mit $E > 0$ zu Zuständen mit $E < 0$ möglich. Im Unterschied zur Klein-Gordon-Gleichung behandelt die Dirac-Gleichung aber nur Fermionen. Daher nimmt man an, dass im Grundzustand alle Zustände mit $E < 0$ besetzt sind. Diese Zustände bezeichnet man dann als gefüllten Dirac-See. Wegen des Pauli-Prinzips (das gab es bei Klein-Gordon nicht) sind Übergänge nach $E < 0$ nach verboten. Es ist aber möglich, dass ein Photon ein Elektron von $E < 0$ nach $E > 0$ anregt. Im Dirac-See fehlt dann eine negative Energie und eine negative Ladung. Das entspricht gerade einem Positron mit positiver Energie und Ladung.

5.12 u- und v-Spinoren

DEFINITION:

Man wähle als (räumliche) Spin-Quantisierungsachse $\vec{s}^\mu = (0, \vec{s})$ mit $\vec{s}^2 = 1$ im Ruhesystem $\vec{p}^\mu = (mc, \vec{0})$. Es gilt dann $\vec{s}^2 = \vec{s}_\mu \vec{s}^\mu = -1$. Nach einem Boost in ein System mit $p^\mu = (E/c, \vec{p})$ und $s^2 = s_\mu s^\mu = -1$ folgt für die Teilchen-Lösung

$$\psi(x) = e^{-ip\cdot x/\hbar} u(p, \pm s)$$

und für die Antiteilchen-Lösung

$$\psi(x) = e^{ip\cdot x/\hbar} v(p, \pm s).$$

Für $\vec{s} = \hat{z}$ (Quantisierung entlang z-Achse) mit $z := (0, \hat{z})$:

$$\begin{aligned} u(p, z) &= w_1(p) & v(p, z) &= w_4(p) \\ u(p, -z) &= w_2(p) & v(p, -z) &= w_3(p). \end{aligned}$$

NORMIERUNG:

Man verwende $\epsilon, \epsilon' \in \{\pm 1\}$ zur Beschreibung der Vorzeichen. Die folgenden Ausdrücke sind Skalarprodukte, also Lorentz-invariant. Daher kann man nach dem Gleichheitszeichen $\vec{p} = 0$ setzen. Für die $w_{1,2}$ -Spinoren mit $\vec{p} = 0$ wirkt γ^0 wie eine Einheitsmatrix, für $w_{3,4}$ wie eine negative Einheitsmatrix. Das folgt aus der Definition der w_i in 5.10. Daimt folgt:

$$\bar{u}(p, \epsilon s)u(p, \epsilon' s) = w_{i(\epsilon)}^\dagger(0)\gamma^0 w_{i(\epsilon')} = \delta_{i(\epsilon)i(\epsilon')} = \delta_{\epsilon\epsilon'},$$

$$\bar{u}(p, \epsilon s)v(p, \epsilon' s) = w_{1,2}^\dagger(0)\gamma^0 w_{3,4} = 0,$$

$$\bar{v}(p, \epsilon s)v(p, \epsilon' s) = w_{i'(\epsilon)}^\dagger(0)\gamma^0 w_{i'(\epsilon')} = -\delta_{i(\epsilon)i(\epsilon')} = -\delta_{\epsilon\epsilon'}.$$

NORMIERUNG DER WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTE:

Es gilt (ohne Beweis)

$$u^\dagger(p, \epsilon s)u(p, \epsilon' s) = v^\dagger(p, \epsilon s)v(p, \epsilon' s) = \delta_{\epsilon\epsilon'} \frac{E}{mc^2}.$$

VOLLSTÄNDIGKEITSRELATION:

Siehe auch 5.6 in Particle Physics. Analog zur Projektion $\sum_n |n\rangle\langle n|$ schreibe man den Projektor auf positive Energien, eine 4×4 -Matrix, als

$$(\Lambda_+(p))_{ij} := \sum_{\epsilon=\pm 1} u_i(p, \epsilon s) \bar{u}_j(p, \epsilon s) = \left(\frac{\gamma_\mu p^\mu + mc}{2mc} \right)_{ij}.$$

Auf negative Energien:

$$(-\Lambda_-(p))_{ij} := \sum_{\epsilon=\pm 1} v_i(p, \epsilon s) \bar{v}_j(p, \epsilon s) = \left(\frac{\gamma_\mu p^\mu - mc}{2mc} \right)_{ij}.$$

6 Feldquantisierung

6.1 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes POTENTIALE, EICHFREIHEIT, EBENE-WELLEN-LÖSUNGEN

Die Beschreibung von \vec{E} , \vec{B} erfolgt durch Potentiale,

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \partial\vec{A}/\partial t, \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A},$$

die bis auf eine Eichfreiheit

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi + \partial f / \partial t, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \nabla f$$

definiert sind. Diese erfüllen automatisch die homogenen Maxwell-Gleichungen und müssen die inhomogenen erfüllen:

$$\begin{aligned} \nabla \vec{E} &= -\nabla^2 \phi - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \vec{A} = \partial_\mu \partial^\mu \phi - \frac{\partial}{\partial t} \partial_\mu A^\mu = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla \times \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= \nabla(\nabla \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \phi + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) \\ &= \partial_\mu \partial^\mu \vec{A} + \nabla \partial_\mu A^\mu = \mu_0 \vec{j}. \end{aligned}$$

In der Coulomb-Eichung, $\nabla \vec{A} = 0$, ergibt sich daraus

$$-\nabla^2 \phi = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad \partial_\mu \partial^\mu \vec{A} = \mu_0 \vec{j} - \frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t}.$$

Man betrachte den einfachsten Fall, $\rho = \vec{j} = 0$, sodass mit der

Bedingung $\phi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$ auch $\phi = 0$ gilt. Gesucht sind also Lösungen von $\partial_\mu \partial^\mu \vec{A} = 0$ mit $\nabla \vec{A} = 0$. Ein Ebene-Wellen-Ansatz liefert

$$A(\vec{x}, t) = \vec{A}_0 e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \Rightarrow \left(\frac{i\omega}{c} \right)^2 - (i\vec{k})^2 = 0 \Leftrightarrow \omega = c|\vec{k}|$$

und mit der Eichbedingung $\nabla \vec{A} = 0$ folgt $\vec{k}\vec{A}_0 = 0$.

HAMILTONFUNKTION:

Das räumliche Integral über die klassische Energiedichte sollte die Hamiltonfunktion ergeben:

$$H_{\text{rad}} = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x (\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2).$$

Da dies für ebene Wellen divergiert, beschränkt man sich auf einen Würfel mit Kantenlänge L und periodischen

Randbedingungen, sodass \vec{k} diskret wird:

$$\vec{k} = 2\pi(n_1, n_2, n_3)/L, \quad n_i \in \mathbb{Z}.$$

Man schreibt nun \vec{A} als Fourier-Reihe mit zwei

Polarisationsvektoren $\vec{e}_1(\vec{k}), \vec{e}_2(\vec{k})$, die mit $\hat{k} := \vec{k}/|\vec{k}|$ ein rechtshändiges Orthonormalsystem bilden:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{r, \vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 V \omega_k}} \vec{e}_r \left(a_r e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_k t)} + a_r^* e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega_k t)} \right).$$

Der Vorfaktor sorgt dafür, dass $a_r(\vec{k})$ dimensionslos ist. Man definiert nun

$$\vec{f}_{r, \vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{e}_r(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad a_r(\vec{k}, t) = a_r(\vec{k}) e^{-i\omega_k t},$$

wobei man leicht zeigt, dass $\int_V d^3x \vec{f}_{r, \vec{k}}^* \vec{f}_{r', \vec{k}'} = \delta_{rr'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$ gilt.

Zudem gilt $\vec{f}_{r, \vec{k}}^* = s_r \vec{f}_{r, -\vec{k}}$, wobei $s_r = \pm 1$ so gewählt werden muss, dass das Orthonormalsystem $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \hat{k}$ rechtshändig bleibt. Damit folgt

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{x}, t) &= \sum_{r, \vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k}} \left(a_r(\vec{k}, t) \vec{f}_{r, \vec{k}} + a_r^*(\vec{k}, t) s_r \vec{f}_{r, -\vec{k}} \right) \\ &= \sum_{r, \vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k}} \left(a_r(\vec{k}, t) + a_r^*(-\vec{k}, t) s_r \right) \vec{f}_{r, \vec{k}}. \end{aligned}$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass die Summe über $-\vec{k}$ dieselbe ist, wie die über \vec{k} . Damit lässt sich das elektrische und magnetische Feld wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \sum_{r, \vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k}} \frac{(a_r(\vec{k}, t) - a_r^*(-\vec{k}, t) s_r) i \omega_k \vec{f}_{r, \vec{k}}}{= (a_r(-\vec{k}, t) s_r - a_r^*(\vec{k}, t)) i \omega_k \vec{f}_{r, \vec{k}}^* \text{ da } \vec{E}^* = -\vec{E}} \\ \vec{B} &= \nabla \times \vec{A} = \sum_{r, \vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k}} \frac{(a_r(\vec{k}, t) + a_r^*(-\vec{k}, t) s_r) i \vec{k} \times \vec{f}_{r, \vec{k}}}{= -(a_r(-\vec{k}, t) s_r + a_r^*(\vec{k}, t)) i \vec{k} \times \vec{f}_{r, \vec{k}}^* \text{ da } \vec{B}^* = \vec{B}} \end{aligned}$$

Diese Felder sollen nun in das Integral von H_{rad} eingesetzt werden. Dort wird das folgende Integral auftauchen:

$$\begin{aligned} \int_V d^3x \left(\vec{k} \times \vec{f}_{r, \vec{k}}(\vec{x}) \right) \left(\vec{k}' \times \vec{f}_{r', \vec{k}'}(\vec{x}) \right) \\ = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left(\vec{k} \times \vec{e}_r(\vec{k}) \right) \left(\vec{k}' \times \vec{e}_{r'}(\vec{k}') \right) = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left(\vec{k}^2 \vec{e}_r \vec{e}_{r'} - \vec{k} \vec{e}_{r'} \vec{e}_r \vec{k} \right) \\ = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{rr'} \vec{k}^2, \end{aligned}$$

wobei $(\vec{a} \times \vec{b})(\vec{c} \times \vec{d}) = (\vec{a}\vec{c})(\vec{b}\vec{d}) - (\vec{b}\vec{c})(\vec{a}\vec{d})$ und $\vec{k}\vec{e}_{r'} = 0$

verwendet wurde. Im Integral kommen $\vec{E}^2 = \vec{E}\vec{E}$ vor, wobei im Folgenden für die beiden \vec{E} s die beiden Versionen von oben verwendet werden ($c^2 \vec{k}^2 = \omega_k^2$):

$$\begin{aligned} H_{\text{rad}} &= \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{r, r', \vec{k}, \vec{k}'} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k} \int d^3x \left(-a_r(\vec{k}, t) - a_r^*(-\vec{k}, t) s_r \right) \left(a_{r'}(-\vec{k}', t) s_{r'} \right. \\ &\quad \left. - a_{r'}^*(\vec{k}', t) \right) \omega_k \omega_{k'} \vec{f}_{r, \vec{k}} \vec{f}_{r', \vec{k}'}^* \\ &\quad + c^2 \left(a_r(\vec{k}, t) + a_r^*(-\vec{k}, t) s_r \right) \left(a_{r'}(-\vec{k}', t) s_{r'} \right. \\ &\quad \left. + a_{r'}^*(\vec{k}', t) \right) \left(\vec{k} \times \vec{f}_{r, \vec{k}} \right) \left(\vec{k}' \times \vec{f}_{r', \vec{k}'}^* \right) \\ &= \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{r, \vec{k}} \frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k} \left(-a_r(\vec{k}, t) - a_r^*(-\vec{k}, t) s_r \right) \left(a_r(-\vec{k}, t) s_r - a_r^*(\vec{k}, t) \right) \omega_k^2 \\ &\quad + c^2 \left(a_r(\vec{k}, t) + a_r^*(-\vec{k}, t) s_r \right) \left(a_r(-\vec{k}, t) s_r + a_r^*(\vec{k}, t) \right) \vec{k}^2 \\ &= \sum_{r, \vec{k}} \frac{\hbar \omega_k}{2} \left(a_r^*(-\vec{k}, t) a_r(-\vec{k}, t) + a_r(\vec{k}, t) a_r^*(\vec{k}, t) \right) \\ &= \sum_{r, \vec{k}} \frac{\hbar \omega_k}{2} \left(a_r^*(\vec{k}, t) a_r(\vec{k}, t) + a_r(\vec{k}, t) a_r^*(\vec{k}, t) \right). \end{aligned}$$

Im vorletzten Schritt wurde einfach ausmultipliziert, $s_r^2 = 1$, und im letzten wurde ausgenutzt, dass die Summe über $-\vec{k}$ dieselbe ist, wie die über \vec{k} . Ein Vergleich mit dem harmonischen Oszillator ($[a, a^\dagger] = 1$),

$$H = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar \omega}{2} (a^\dagger a + a a^\dagger),$$

zeigt große Ähnlichkeit. Man interpretiert $a_r(\vec{k}), a_r^*(\vec{k})$ daher als Ab-/Aufsteigeoperatoren mit

$$\begin{aligned} [a_r(\vec{k}), a_{r'}^\dagger(\vec{k}')] &= \delta_{rr'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, \\ [a_r^\dagger(\vec{k}), a_{r'}^\dagger(\vec{k}')] &= [a_r(\vec{k}), a_{r'}(\vec{k}')] = 0 \end{aligned}$$

und dem Hamiltonoperator

$$H_{\text{rad}} = \sum_{r, \vec{k}} \hbar \omega_k \left(a_r^\dagger(\vec{k}) a_r(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right) = \sum_{r, \vec{k}} \hbar \omega_k \left(N_r(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right).$$

Die Nullpunktsenergie spielt in der Regel keine Rolle, da nur Energiedifferenzen gemessen werden können. Daher folgt für H_{rad} und für andere Größen, wie etwa den Impuls äquivalent:

$$H_{\text{rad}} = \sum_{r, \vec{k}} \hbar \omega_k N_r(\vec{k}), \quad \vec{p} = \sum_{r, \vec{k}} \hbar \vec{k} N_r(\vec{k}).$$

GRENZFALL $L \rightarrow \infty$:

Bisher wurde die Wellenzahl durch das gewählte Volumen L^3 gemäß $\vec{k} = 2\pi(n_1, n_2, n_3)/L$ quantisiert. Jeder dieser Vektoren nimmt ein Volumen $(2\pi/L)^3$ ein. Im Grenzfall gilt dann $(2\pi/L)^3 \rightarrow d^3k$. Damit lassen sich die Summen in Integrale umschreiben:

$$1 = \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \rightarrow \int d^3k \delta(\vec{k} - \vec{k}').$$

Offenbar gilt also $(L/2\pi)^3 \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \rightarrow \delta(\vec{k} - \vec{k}')$. Gesucht ist nun eine Kommutatorrelation derart $[b_r(\vec{k}), b_r^\dagger(\vec{k}')] = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$ die sich genau dann ergibt, wenn man

$$b_r^{(\dagger)}(\vec{k}) := \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{(L/2\pi)^3} a_r^{(\dagger)}(\vec{k})$$

wählt. Für das Vektorpotential gilt dann (cc. = kompl. conj.), wenn man eine 1 in Form der Wurzelterme einfügt:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \sum_{r, \vec{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k}} \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3} \left(\sqrt{\left(\frac{L}{2\pi} \right)^3} a_r \vec{e}_r e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_k t)} + \text{cc.} \right) \\ &\rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0}} \sum_r \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\omega_k (2\pi)^3}} \left(b_r \vec{e}_r e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_k t)} + \text{cc.} \right). \end{aligned}$$

Analog folgt für den Strahlung-Hamiltonoperator:

$$H_{\text{rad}} = \sum_{r, \vec{k}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \hbar \omega_k \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 a_r^\dagger a_r \rightarrow \sum_r \int d^3k \hbar \omega_k b_r^\dagger(\vec{k}) b_r(\vec{k}).$$

6.2 Wechselwirkung des EM-Feldes mit Ladungen

Betrachtete Materie bestehe aus N Teilchen mit Massen m_i und Ladungen q_i . Der Materie-Hamiltonoperator ist dann

$$\tilde{H}_m = \sum_i \frac{m_i}{2} \left(\frac{d\vec{r}_i}{dt}\right)^2 + H_C, \quad H_C = \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}.$$

Man betrachte das Strahlungsfeld, wie in 6.1, in Coulomb-Eichung $\nabla \vec{A} = 0$, aber diesmal mit $\rho \neq 0$, sodass

$$\nabla \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_i q_i \delta(\vec{x} - \vec{r}_i(t)).$$

Separiert man $\vec{E} = \vec{E}_L + \vec{E}_T = -\nabla\phi - \partial\vec{A}/\partial t$ in einen longitudinalen Anteil mit $\nabla \times \vec{E}_L = 0$ und einen transversalen Anteil mit $\nabla \vec{E}_T = 0$, so gilt wegen der Coulomb-Eichung offensichtlich

$$\vec{E}_L = -\nabla\phi, \quad \vec{E}_T = -\partial\vec{A}/\partial t.$$

Die Energie des Feldes lässt sich dann schreiben als

$$H_{\text{em}} = H_{\text{rad}} + H_C = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x (\vec{E}_T^2 + c^2 \vec{B}^2 + \vec{E}_L^2).$$

Der $\vec{E}_L \vec{E}_T$ -Term aus \vec{E}^2 verschwindet denn mit $\nabla \vec{A} = 0$ folgt, dass $\vec{E}_L \vec{E}_T = \nabla\phi \cdot \partial\vec{A}/\partial t = \nabla(\phi \partial\vec{A}/\partial t)$ gilt, was sich nach dem Gaußschen Satz in ein Oberflächenintegral umschreiben lässt und man davon ausgeht, dass die Felder im unendlichen verschwinden. Wie sich zudem zeigt, ist der \vec{E}_L^2 -Term genau H_C :

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x \vec{E}_L^2 &= \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x (\nabla\phi)(\nabla\phi) \stackrel{\text{PI}}{=} \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x \phi (-\nabla^2\phi) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x \phi \rho(\vec{x}) = \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \frac{\rho(\vec{x})\rho(\vec{x}')}{4\pi\epsilon_0 |\vec{x} - \vec{x}'|} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + E_S. \end{aligned}$$

Das E_S ist die Unendlichkeit durch den $i = j$ -Term, der im Integral auftaucht, in der Summe aber nicht mehr. Da stets nur Energiedifferenzen vernachlässigt werden, kann E_S vernachlässigt werden. Für den kanonischen Impuls gilt $\vec{p}_i = m_i \dot{\vec{v}}_i + q_i \vec{A}_i$, wobei $\vec{A}_i := \vec{A}(\vec{r}_i)$. Setzt man dieses $\dot{\vec{v}}_i$ in \tilde{H}_m oben ein, folgt

$$\begin{aligned} \tilde{H}_m &= \sum_i \frac{(\vec{p}_i - q_i \vec{A}_i)^2}{2m_i} + H_C \\ &= \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + H_C + \sum_i \frac{1}{2m_i} (-q_i \vec{p}_i \vec{A}_i - q_i \vec{A}_i \vec{p}_i + q_i^2 \vec{A}_i^2) \\ &= \underbrace{\sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i}}_{=H_m} + H_C + \underbrace{\sum_i \left(-\frac{q_i}{m_i} \vec{A}_i \vec{p}_i + \frac{q_i^2}{2m_i} \vec{A}_i^2\right)}_{=H_I}. \end{aligned}$$

Es wurde verwendet, dass wegen $\nabla \vec{A} = 0$ gilt, dass $\vec{p}_i \vec{A}_i \psi = \vec{A}_i \vec{p}_i \psi$ ist. Zuletzt wurde ein Materie- und Interaction-Hamiltonoperator definiert. Die Quantisierung von H_{rad} (freie Strahlung) erfolgt wie in 6.1:

$$H_{\text{rad}} = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x (\vec{E}_T^2 + c^2 \vec{B}^2) = \sum_r \int d^3k \hbar \omega_k b_r^\dagger(\vec{k}) b_r(\vec{k}).$$

Das Gesamtsystem lässt sich dann schreiben als

$$H = H_m + H_{\text{rad}} + H_I = H_0 + H_I.$$

$H_0 = H_m + H_{\text{rad}}$ lässt sich für einfache Probleme exakt lösen, H_I störungstheoretisch behandeln. Man kann einen i -ten Zustand schreiben als

$$|\psi\rangle = |A\rangle |\dots, n_r(\vec{k}), \dots\rangle,$$

wobei $|A\rangle$ der H_m -Eigenzustand ist und $n_r(\vec{k})$ die Anzahl an Teilchen mit Polarisation r und Wellenvektor \vec{k} . In niedrigster Ordnung Störungstheorie treten dann Terme $\langle \psi_1 | \vec{A}_i \vec{p}_i | \psi_2 \rangle$ und $\langle \psi_1 | \vec{A}_i^2 | \psi_2 \rangle$ auf. Erstere beschreiben Emissionen/Absorptionen eines Photons, da in \vec{A}_i Aufsteige-/Absteigeoperator einzelne vorkommen. In \vec{A}_i^2 kommen dann Kombinationen, z. B.

$b_r^\dagger(\vec{k}) b_{r'}(\vec{k}')$, vor. Dadurch kann ein Photon mit \vec{k}' vernichtet und eines mit \vec{k} erzeugt werden: ein Streuprozess.

6.3 Strahlungsübergänge im Atom

Man betrachte einen Übergang $|A\rangle \rightarrow |B\rangle$ mit Energien E_A und E_B . Die Übergangswahrscheinlichkeit ist durch Fermis Goldene Regel (2.4) gegeben:

$$w_{r, \vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle B, n_r(\vec{k}) + 1 | H_I | A, n_r(\vec{k}) \rangle|^2 \delta(E_A - E_B - \hbar \omega_k).$$

Das Matrixelement beschreibt einen Übergang der atomaren Zustände $|A\rangle \rightarrow |B\rangle$ sowie die Erzeugung (Emission) eines Photons mit r, \vec{k} , sodass sich deren Anzahl um eins erhöht. Für ein beliebiges \vec{k} folgt

$$w_r = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{\vec{k}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 w_{r, \vec{k}} \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k w_{r, \vec{k}}.$$

Für das Matrixelement folgt (wegen den Zuständen $n_r(\vec{k}) + 1$ und $n_r(\vec{k})$ verschwinden alle Terme aus a_r^\dagger):

$$\begin{aligned} &\langle B, n_r(\vec{k}) + 1 | H_I | A, n_r(\vec{k}) \rangle \\ &= - \sum_i \frac{q_i}{m_i} \langle B, n_r(\vec{k}) + 1 | \vec{A}_i \vec{p}_i | A, n_r(\vec{k}) \rangle \\ &= - \sum_i \frac{q_i}{m_i} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 V \omega_k}} \langle n_r(\vec{k}) + 1 | a_r^\dagger | n_r(\vec{k}) \rangle \langle B | e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} \vec{\epsilon}_r \vec{p}_i | A \rangle \\ &= - \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0}} \sqrt{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k (2\pi)^3}} \sqrt{n_r(\vec{k}) + 1} \sum_i \frac{q_i}{m_i} \langle B | e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} \vec{\epsilon}_r \vec{p}_i | A \rangle \end{aligned}$$

Der $e^{i\omega_k t}$ -Term aus \vec{A} wurde bereits bei Fermis Goldener Regel berücksichtigt und führte zur dortigen Delta-Funktion. Die Summe über \vec{k}, r , die in \vec{A} enthalten ist, liefert nur für das \vec{k} aus $n_r(\vec{k})$ einen Beitrag, da $a_r^\dagger(\vec{k}') | n_r(\vec{k}) \rangle$ null ist für $\vec{k} \neq \vec{k}'$. Zudem ist $\vec{A}_i := \vec{A}(\vec{x} = \vec{r}_i)$, sodass hier der Faktor $e^{-i\vec{k}\vec{r}_i}$ mit \vec{r}_i statt \vec{x} auftaucht.

Im Übergang nach $L \rightarrow \infty$ folgt damit:

$$\begin{aligned} w_r &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k w_{r, \vec{k}} \\ &= \frac{\hbar}{\epsilon_0} \frac{2\pi}{\hbar} \int d^3k \frac{n_r(\vec{k}) + 1}{2\omega_k (2\pi)^3} \frac{e^2}{m^2} \left| \sum_i \frac{q_i}{m_i} \langle B | e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} \vec{\epsilon}_r \vec{p}_i | A \rangle \right|^2 \delta(E_A - E_B - \hbar \omega_k) \\ &= \frac{\hbar}{\epsilon_0} \frac{2\pi}{\hbar} \int d\Omega \frac{\omega^2}{\hbar c^3} \frac{n_r(\vec{k}) + 1}{2\omega (2\pi)^3} \frac{e^2}{m^2} \left| \sum_i \frac{q_i}{m_i} \langle B | e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} \vec{\epsilon}_r \vec{p}_i | A \rangle \right|^2 \\ &= \alpha \frac{\omega}{2\pi m^2 c^2} \int d\Omega (n_r(\vec{k}) + 1) \left| \sum_i \frac{q_i}{m_i} \langle B | e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} \vec{\epsilon}_r \vec{p}_i | A \rangle \right|^2. \end{aligned}$$

Dabei wurde ein Faktor $(e^2/m^2)(m/e)^2$ mit Elektronenmasse m und Elementarladung e hinzugefügt wurde. Mit der Dispersionsrelation $\omega_k = ck$ folgt $d^3k = d\Omega k^2 dk = d\Omega \hbar^{-1} c^{-3} \omega_k^2 d(\hbar \omega_k)$, sodass die Delta-Funktion ausgewertet werden kann, wobei $\omega := (E_A - E_B)/\hbar$ gilt. Im letzten Schritt wurden die Konstanten u.a. zu $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0 \hbar c$ zusammengefasst. Für ein großes n_r wird w_r groß (Laser), für $n_r = 0$ ist aber auch $w_r \neq 0$ (spontane Emission).

6.4 Strahlungsübergänge im Atom – Spezialfälle

GROSSE WELLENLÄNGEN:

Für große Wellenlängen, $k\vec{r}_i \ll 1$, folgt $e^{-ik\vec{r}_i} \approx 1$. Wie in 2.5 gezeigt, gilt $\vec{p}_i = [\vec{x}_i, H_m]m_i/\hbar$. Damit ergibt sich aus der letzten Gleichung in 6.3:

$$\begin{aligned} w_r &= \alpha \frac{\omega}{2\pi m^2 c^2} \int d\Omega (n_r(\vec{k}) + 1) \left| \frac{m}{e} \sum_i \frac{q_i}{m_i} \langle B | e^{-ik\vec{r}_i} \vec{\epsilon}_r \vec{p}_i | A \rangle \right|^2 \\ &= \alpha \frac{\omega}{2\pi m^2 c^2} \int d\Omega (n_r(\vec{k}) + 1) \left| \frac{m}{i\hbar e} \vec{\epsilon}_r \langle B | [\sum_i q_i \vec{x}_i, H_m] | A \rangle \right|^2 \\ &= \alpha \frac{\omega}{2\pi m^2 c^2} \int d\Omega (n_r(\vec{k}) + 1) \left| \frac{m(E_A - E_B)}{i\hbar e} \vec{\epsilon}_r \langle B | \sum_i q_i \vec{x}_i | A \rangle \right|^2 \\ &= \alpha \frac{\omega^3}{2\pi c^2} \int d\Omega (n_r(\vec{k}) + 1) |\vec{\epsilon}_r \vec{x}_{BA}|^2, \end{aligned}$$

wobei $\vec{x}_{BA} := \langle B | \sum_i q_i \vec{x}_i | A \rangle / e$ definiert wurde.

SPONTANE EMISSION:

Nimmt man außerdem $n_r(\vec{k}) = 0$ an (also spontane Emission) und summiert über alle möglichen Polarisierungen taucht folgende Summe auf (beachte, dass $\vec{\epsilon}_r$ reell ist, also $\vec{\epsilon}_r^* = \vec{\epsilon}_r$ gilt):

$$\begin{aligned} \sum_r |\vec{\epsilon}_r \vec{x}_{BA}|^2 &= \sum_r (\vec{x}_{BA}^* \vec{\epsilon}_r) (\vec{\epsilon}_r \vec{x}_{BA}) \\ &= \vec{x}_{BA}^* (\vec{\epsilon}_1 (\vec{\epsilon}_1 \vec{x}_{BA}) + \vec{\epsilon}_2 (\vec{\epsilon}_2 \vec{x}_{BA}) + \hat{k} (\hat{k} \vec{x}_{BA}) - \hat{k} (\hat{k} \vec{x}_{BA})) \\ &= \vec{x}_{BA}^* (\vec{x}_{BA} - \hat{k} (\hat{k} \vec{x}_{BA})) = |\vec{x}_{BA}|^2 - |\hat{k} \vec{x}_{BA}|^2 \\ &= |\vec{x}_{BA}|^2 - (|\vec{x}_{BA}| \cos \theta)^2 = |\vec{x}_{BA}|^2 (1 - \cos^2 \theta). \end{aligned}$$

Dabei wurde verwendet, dass $\vec{\epsilon}_1, \vec{\epsilon}_2$ und \hat{k} eine orthonormale Basis bilden ($\sum_i \vec{\epsilon}_i (\vec{\epsilon}_i \vec{x}) = \vec{x}$) Damit folgt:

$$\begin{aligned} w &= \sum_r w_r = \frac{\alpha \omega^3}{2\pi c^2} \int d\Omega \sum_r |\vec{\epsilon}_r \vec{x}_{BA}|^2 \\ &= \frac{\alpha \omega^3}{2\pi c^2} |\vec{x}_{BA}|^2 \int d\Omega (1 - \cos^2 \theta) = \frac{4\alpha \omega^3}{3c^2} |\vec{x}_{BA}|^2. \end{aligned}$$

WASSERSTOFFATOM, $2p \rightarrow 1s$:

Für einen Übergang $2p \rightarrow 1s$ des Wasserstoffatoms folgt

$$|A\rangle \hat{=} R_{21}(r) Y_{1m}(\theta, \varphi), \quad |B\rangle \hat{=} R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi).$$

Da das Wasserstoffatom nur ein Elektron besitzt, vereinfacht sich zu dem $\vec{x}_{BA} := \langle B | \sum_i q_i \vec{x}_i | A \rangle / e = \langle B | \vec{x} | A \rangle$. Wie in 1.4 gezeigt wurde, ist \vec{x} ein Vektoroperator (d.h. Tensoroperator vom Rang $l = 1$). Mit dem Wigner-Eckert-Theorem kann man zeigen, dass $|\langle B | \vec{x} | A \rangle|^2 = |\langle 100 | \vec{x} | 21m \rangle|^2$ unabhängig von m ist. Man wähle $m = 0$, woraus

$$\langle B | \vec{x} | A \rangle = \frac{2^8 a_0}{\sqrt{23^5}} \hat{z}$$

folgt. Mit $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ folgt daraus

$$w = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \frac{\alpha^4 c}{a_0}.$$