

6. Zusammenfassung Kapitel I: Relativistische QM.

rel. Energie-Dispersion $E^2 = c^2 p^2 + m_0 c^4$

→ 2 Möglichkeiten einer relativistischen Wellengleichung

Klein-Gordon-F.

$$\partial_\mu \partial^\mu \psi = \xi_c^{-2} \psi$$

Wellenf. mit Masse

- Spin 0 Teilchen m. Ladung und positiver Energie (ψ Skalar)

- Quantenzahlen: $\vec{p}, L = \pm |E|$

- keine Rel. Kontinuität

→ keine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (A.W.)

Dirac-F.

$$i \gamma^\mu \partial_\mu \vec{\psi} = \xi_c^{-1} \vec{\psi}$$

- Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen mit Ladung und positiver und negativer Energie (Spinor!)

- Quantenzahlen

$\vec{p}, L, m_s = \pm \frac{1}{2}$

- klassische Kontinuität

→ A.W. möglich (Teilchenbild)

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{p}} A(\vec{p}) e^{i(\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar})}$$

Vektor $\vec{\psi} = \dots$

Ladungsdichte:

$$S_L(\vec{r}, t) = e \frac{Et}{m_0 c^2} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*)$$

$e > 0$

Spinoperator

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_i & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_i \end{pmatrix}$$

Pauli-Matrizen

Anwendung:

Bosonen, die Wd vermitteln
 über $\hbar_c$ eine Masse erhalten
 $m_0 \rightarrow 0 \Rightarrow$ Photon

Anwendung:

Elektron, Atomtheorie
 insbesondere
 relativistische Korrekturen
 (3 wichtige)

Wasserstoffatom: $E = E_{nj}$

$$\vec{J} \equiv \text{Gesamt Drehimpuls}$$

$$\vec{J} = \vec{S} + \hbar \vec{L}$$

Problem:

Teilchen- / Antiteilchen, aber
eine klass. Kontinuität

Dirac-Gl.

$\rightarrow$ Dirac-See

Beide Gl. enthalten in aller niedrigster Ordnung
 die Schrödinger-Gl. $\alpha = \frac{1}{137} \rightarrow 0$

Wichtig ist Pauli-Gl. mit allen wichtigen relativist.
 Korrekturen

$$\text{ist } \begin{pmatrix} \dot{\psi}_\uparrow \\ \dot{\psi}_\downarrow \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} H_0 & 0 \\ 0 & H_0 \end{pmatrix}}_{\text{Zweikomponentige Energie}} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} H^{rel} & 0 \\ 0 & H^{rel} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

$$H^{rel} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0 c^2} - \frac{q \Phi_{ext}}{e_0} \quad \begin{matrix} \text{Dispersion} & \text{Darwin-Term} \end{matrix}$$

$$+ \sum_i \frac{q \Phi_A(\vec{r})}{2m_0 c^2 r} \hat{\sigma}_i L_i \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

Spin-Bahn
Kopplung

$$- \begin{pmatrix} q \vec{r} \cdot \vec{E}_{ext} & 0 \\ 0 & q \vec{r} \cdot \vec{E}_{ext} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

$$- \begin{pmatrix} \mu_B \sum_i \vec{B}_i L_i & 0 \\ 0 & \mu_B \sum_i \vec{B}_i L_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}$$

$$- \begin{pmatrix} \mu_B \hbar B_z & 0 \\ 0 & -\mu_B \hbar B_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}$$

II: Quantisierung freier Wellenfelder

1. Motivation: Teilchen-Wellen-Dualismus

- (a) überwinden (formal)
 - einheitliche Formulierung
 - ≡ 2. Quantisierung
- (b) bisher noch kein Feld quantisiert
(z.B. Elektron-Photon-Wechselwirkung)
 - neue Quanteneffekte
 - Spontane Emission, Laserschrift
- (c) nichtklassische Felder
bzw. nichtklassisches Licht
- (d) konsistenter Einbau relativistischer
Effekte (Festkörperphysik) [später]

Maxwellfelder $\vec{A}, \phi$; Potentiafeld $\vec{u}$; Schrödingerfeld ψ
werden überführt in den einheitlichen
Formalismus der 2. Quantisierung

⇒ Teilchen und Felder werden als
klassische unterschiedliche Objekte
nun zu quantenmechanische
Elementaranregung

⇒ damit ist analog eine Vielteilchentheorie
gegeben, weil man viele angeregte Moden und
viele Quanten haben kann

2) Allgemeines Vorgehen zur Quantisierung von Wellenfeldern (zunächst nur für freie Felder)

Kurzübersicht:

- (a) Lagrangeformalismus f. klassische Felder nehmen $\varphi(\vec{r}, t)$
- (b) Definition des Impulses: $\Pi_{\varphi}(\vec{r}, t)$
- (c) Übergang zu Operatoren: $\underline{\varphi}(\vec{r}, t), \underline{\Pi}_{\varphi}(\vec{r}, t)$
- (d) Einführung der Vertauschungsrelationen $[\underline{\varphi}_i(\vec{r}, t), \underline{\Pi}_j(\vec{r}', t)] = \dots$
- (e) Hamiltonoperator herleiten: $\underline{H} = \dots$
- (f) Bewegungsgl. herleiten für Felder und Impulse
- (g) Entwicklung nach Feldmoden $\underline{\varphi} = \sum_i f_i(\vec{r}) \underline{a}_i(t)$
- (h) Lösung des Eigenwertproblems, dynamische Gleichung $\rightarrow$ Erwartungswerte

Teilchen QM-Analogon: $\vec{r}, \vec{p} \rightarrow \underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}$ mit $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$

$$\langle \underline{0} | \hat{O} | \underline{0} \rangle \leftarrow \frac{i\hbar}{\hbar} [\underline{\dot{O}}, \underline{0}] = \underline{\dot{O}}(\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}) \leftarrow \underline{H} = \underline{H}(\underline{\vec{r}}, \underline{\vec{p}}) \leftarrow$$

gesucht, denn
das wird gemessen

Da fehlt klassische Felder wie das Vektorpotential $\vec{A}$ aber auch das Schrödingerfeld $\varphi(\vec{r}, t)$ einer zusätzlichen QTh, spricht man von zweiter Quantisierung.

Illustriert am Schrödingerfeld:

(a) $\mathcal{L}(\psi, \dot{\psi}, t)$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{,\mu}} = 0 \quad [x^{\mu} = (t, x_1, x_2, x_3)]$$

↑
"fügt sich raus"

$$\text{taten wir } \mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^3 \psi_{,l}^* \psi_{,l} - U(\vec{r}, t) \psi^* \psi$$

→ Schrödingergl. Bsp. $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} = \frac{i\hbar}{2} \dot{\psi} - U\psi$

$$i\hbar \dot{\psi}(\vec{r}, t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\sum_{l=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_l^2}}_{=\Delta} \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

(b) Impuls $\pi_{\psi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}$

Dies ist nötig, um analog zur Quantenmechanik das zu quantisierende Paar kanonischer Variablen $(\vec{x}, \vec{p})$ zu bilden und einzuführen

Beispiel: $\pi_{\psi} = \frac{i\hbar}{2} \psi^* \quad \pi_{\psi^*} = -\frac{i\hbar}{2} \psi$

(c) Übergang zu Feldoperatoren

$$\psi \rightarrow \underline{\psi} \quad , \quad \pi_{\psi} \rightarrow \underline{\pi}_{\psi} \quad , \quad \psi^* \rightarrow \underline{\psi}^{\dagger}$$

(bedeutet nicht beliebige Nichtvertauschbarkeit)

Beispiel $\underline{\pi}_{\psi} = i\hbar \underline{\psi}^{\dagger}(\vec{r}, t)$

$\underline{\psi}^{\dagger}, \underline{\psi}$ sind Heisenberg-Grenser und Vernichter

„Diese Operatoren erzeugen bzw. vernichten ein Elektron am Ort $\vec{r}$ und zum Zeitpunkt t “

$$\vec{r} \rightarrow \psi(\vec{r}, t) \xrightarrow[1. \text{ Quantisierung}]{2. \text{ Quant.}} \underline{\psi}(\vec{r}, t)$$

(d) Vertauschungsregeln

Man fordert für die zugehörigen Feld- und Impulsvariablen: $[\underline{\psi}_i(\vec{r}, t), \underline{\pi}_j(\vec{r}', t)]_+ = \hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

(analog zu $[x_i, p_j] = \hbar \delta_{ij}$) $[\underline{A}, \underline{B}]_{\pm} = \underline{A}\underline{B} \pm \underline{B}\underline{A}$

Es kann (+) und (-) Quantisierung auftreten:
Fermionen (+), Bosonen (-)

Beispiel: Schrödingerfeld $\underline{\psi}(\vec{r}, t), \underline{\psi}^\dagger(\vec{r}, t)$

$$[\underline{\psi}(\vec{r}, t), \underline{\psi}^\dagger(\vec{r}', t)]_{\pm} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$\begin{array}{c} \text{Fermion} \quad \text{Boson} \\ \text{(halbzahliger Spin)} \quad \text{(ganzzahliger Spin)} \\ \text{z.B. Elektron} \quad \text{bestimmte Atome} \end{array}$

(e) Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \sum_i \psi_i \pi_i - \mathcal{L} \rightarrow \underline{H} = \int d^3r \mathcal{H}$$

$$\mathcal{H} = \psi \frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \psi^* - \psi^* \frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2} (\nabla \psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \nabla \psi) + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{r}} \frac{\partial \psi^*}{\partial x_{\vec{r}}} \frac{\partial \psi}{\partial x_{\vec{r}}} + u(\vec{r}, t) |\psi|^2$$

$$\begin{aligned} \underline{H} &= \int d^3r \mathcal{H}(\psi^*, \psi, t) = \\ &= \int d^3r \underline{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + u(\vec{r}, t) \right]}_{H_0(\vec{r}, \vec{p})} \underline{\psi}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Regel Zweitquantisierung

$$H_0^{(1)} = H_0(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \underline{H}_0^{(2)} = \int d^3r \underline{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) H_0^{(1)}(\vec{r}, t) \underline{\psi}(\vec{r}, t)$$

(f) Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \psi] + \left(\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \right)_{\text{ext}}$$

in Analogie zum Hamiltonformalismus der klass. Mechanik $\frac{d}{dt} A = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$

$$\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

$\frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, t) = \dots$ Übungsaufgabe

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Ort und Zeit werden analog zur Schrödingergl. auf.

$$\psi^+ = \sum_{\vec{k}, m_s} \underbrace{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}_{\text{Entwicklungs-}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{V}}}_{\text{Koeffizienten}} \underbrace{\chi_{m_s}(\vec{r})}_{\text{vollständiges Funktionensystem}} \underbrace{a_{m_s}^+(\vec{k})}_{\text{Operator}}$$

(g) Entwicklung nach Feldmoden

Feldoperatoren werden nach vollständigen Systemen $\{\mu\}$ entwickelt. Die Elemente des vollständigen Systems heißen Moden μ ,

$$\text{z.B. } e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi_{m_s} = \mu \quad \mu = \{\vec{k}, m_s\}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\mu} a_{\mu}(t) \mu(\vec{r}), \quad \psi^+(\vec{r}, t) = \sum_{\mu} a_{\mu}^+(t) \mu^*(\vec{r})$$

$$[\psi_i(\vec{r}, t), \psi_j^\dagger(\vec{r}', t)]_{\pm} = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{ij} \quad , \text{ jetzt einsetzen}$$

$$\sum_{\mu, \mu'} \underbrace{[a_{i\mu}(t), a_{j\mu'}^\dagger(t)]_{\pm}}_{\delta_{ij} \delta_{\mu\mu'}} a_{i\mu}(\vec{r}) a_{j\mu'}^*(\vec{r}') = \delta_{ij} \underbrace{\sum_{\mu} a_{i\mu}(\vec{r}) a_{j\mu}^*(\vec{r}')}_{\delta(\vec{r} - \vec{r}')} \\ [a_{i\mu}(t), a_{j\mu'}^\dagger(t)] = \delta_{ij} \delta_{\mu\mu'}$$

$$H_0^{(1)} a_{i\mu}(\vec{r}) = \epsilon_{\mu} a_{i\mu}(\vec{r})$$

$$\underline{H}^{(2)} = \sum_{i\mu} \epsilon_{i\mu} a_{i\mu}^\dagger a_{i\mu}(t)$$

Beispiel: freies, statisches Schrödingerfeld

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}(t) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}} \quad (\text{normiert})$$

$$H_0^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

$$\underline{H}^{(2)} = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{mit Eigenfunktionen } u_{\vec{k}} = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}}$$

$$\text{und Eigenwerte } \epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\underline{H}^{(2)} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}(t)$$

freies Schrödinger-Quasipartikel

$$\underline{H}_0^{(2)} = \sum_{\substack{\mu=\vec{k}, m_s \\ \mu'=\vec{k}', m_s'}} \int d^3r u_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \underbrace{\vec{\epsilon}_{m_s} \cdot \hat{H}_0^{(1)} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \cdot \vec{\epsilon}_{m_s'}}_{\substack{\vec{\epsilon}_{m_s} \cdot \vec{\epsilon}_{m_s'} u_{\vec{k}'}(\vec{r}) \epsilon_{\vec{k}'} \\ \delta_{m_s, m_s'}}} a_{\vec{k}, m_s}^\dagger a_{\vec{k}', m_s'} \\ = \sum_{\vec{k}, m_s} \epsilon_{\vec{k}, m_s} a_{\vec{k}, m_s}^\dagger a_{\vec{k}, m_s}$$

→ Übung : Operator - Bewegungsgl. aufstellen
 $i\hbar \dot{\underline{a}} = [\underline{H}, \underline{a}]$