

Prüfungsprotokolle - Shnirman - Zusammenfassung

Theo D & E

- Basics: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$, wobei $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$

Ψ ist die Wellenfunktion des Systems, welche im Hilbertraum L^2 der quadratintegrierbaren Funktionen liegt

Ein HR ist ein Banachraum, dessen Norm vollständig durch ein Skalarprodukt induziert ist, z.B. $\mathbb{R}^n, \mathbb{C}^n, \mathbb{K}^{m \times n}, L^2$, Spinraum, Harm. Oszillator, ... Dimension 2314

$\hat{H}$ ist linear und hermitesch, es gilt also $\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = \langle \hat{H}^\dagger \psi | \psi \rangle = \langle \hat{H} \psi | \psi \rangle$ (linear, strukturerhaltende Abb. zw. V.Ren. $\hat{H}(\alpha\psi, \varphi) = \alpha \hat{H}\psi, \hat{H}\varphi$)

$\hat{p}$ ist hermitesch: $\langle \psi | \hat{p} \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \partial_x \psi = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \partial_x \psi \psi^* = \langle \hat{p} \psi | \psi \rangle$ | $\langle \hat{u} | A \hat{v} \rangle = \hat{u}^\dagger A \hat{v} = (A^\dagger \hat{u})^\dagger \hat{v} = (A \hat{u})^\dagger \hat{v} = \langle A \hat{u} | \hat{v} \rangle$

Stationäre SG: $\hat{H} \neq \hat{H}(t) \rightarrow \Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \varphi(t) \rightarrow i\hbar \psi \dot{\varphi} = \hat{H} \psi \varphi \rightarrow i\hbar \frac{\dot{\varphi}}{\varphi} = \frac{\hat{H} \psi}{\psi} = E \rightarrow \hat{H} \psi = E \psi \rightarrow E \text{ Eigen. in } \psi$

- Die EWe eines hermiteschen Operators sind reell: $a_n = \langle n | \hat{A} | n \rangle = \langle \hat{A} n | n \rangle = a_n^* \rightarrow a_n \in \mathbb{R}$
- Eigen mit unterschiedlichen EWe sind orthogonal: $\langle n | \hat{A} | m \rangle = a_m \langle n | m \rangle = a_n \langle n | m \rangle \rightarrow \langle n | m \rangle = 0$
- Für jeden hermiteschen Operator $\hat{A}$ $\exists$ vollständige ONB von EWe: $\hat{A} | n \rangle = a_n | n \rangle, \langle n | m \rangle = \delta_{nm}, \sum_n | n \rangle \langle n | = \mathbb{1}$

Allgemeine Lösung: $|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ $U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$
 $|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle = \sum_n U(t, 0) |n\rangle \langle n | \psi(0) \rangle = \sum_n c_n e^{-i E_n t / \hbar} |n\rangle$

Statistische Interpretation: $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$; $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n$

Postulate der QM:

- 1) Zustände $|\psi(t)\rangle \in L^2 \rightarrow \rho = \psi^* \psi$
- 2) $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \in \mathbb{R}$ für Observablen $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$
- 3) Zeitentwicklung durch $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$
- 4) Messungs-Axiom: Kollaps der Wellenfunktion

Allgemein, wenn $\hat{H} = \hat{H}(t)$: $|\psi, t\rangle = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle \rightarrow i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) U(t, t_0)$ (wenn $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$: $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$)

$$\rightarrow U(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) U(\tau, t_0) d\tau \rightarrow \text{Iteration} \rightarrow U(t, t_0) = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau) d\tau} \quad e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

Unitäre Transformationen: Normerhaltung $\rightarrow \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$

- Matrizendarstellung von Operatoren (vgl. Sakurai)

$$\hat{X} = \sum_{a, a'} |a'\rangle \langle a' | \hat{X} | a\rangle \langle a | \rightarrow \hat{X} = \begin{pmatrix} \langle a^m | \hat{X} | a^m \rangle & \langle a^m | \hat{X} | a^{m+1} \rangle & \dots \\ \langle a^{m+1} | \hat{X} | a^m \rangle & \langle a^{m+1} | \hat{X} | a^{m+1} \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Wenn $\hat{X} = \hat{X}^\dagger$, dann ist auch die Matrizendarstellung von $\hat{X}$ hermitesch: $\langle a' | \hat{X} | a \rangle = \langle a | \hat{X} | a' \rangle^*$

$|\alpha\rangle = \hat{X} | \alpha \rangle = \sum_{a, a'} |a'\rangle \langle a' | \hat{X} | \alpha \rangle \langle a | \alpha \rangle$, wobei $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^m | \alpha \rangle \\ \langle a^{m+1} | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$ und $\langle \alpha | = (\langle \alpha | a^m \rangle, \langle \alpha | a^{m+1} \rangle, \dots)$

$\langle a' | \alpha \rangle = \sum_{a, a'} \langle a' | \hat{X} | a \rangle \langle a | \alpha \rangle \hat{=}$ Matrix-Vektor-Multiplikation

- Wellenpakete: Freies Teilchen: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = E \psi \rightarrow \psi(x) = e^{ikx}$ nicht normierbar $\nabla k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

→ Allgemeine Wellenfunktion: LK $\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$; $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

Masseloses relativistisches Teilchen: $\omega = ck$

→ $v_{ph} = v_{gr} = c$ und keine Dispersion, da $\omega'' = 0$

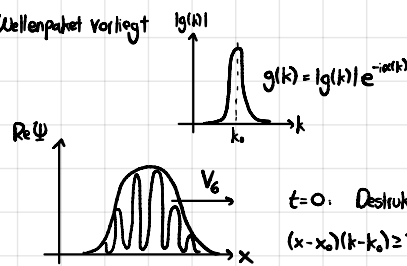
Mit Masse: $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \rightarrow \omega(k) = \frac{E}{\hbar}$

→ Gewichtsfunktion $g(k) = \int \Psi(x,0) \psi^*(k) dx$ habe Peak um k_0 , damit ein Wellenpaket vorliegt

↳ Ändert sich nicht wegen Impulserhaltung und ist qib

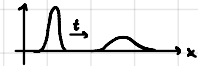
→ $\varphi(k) = kx - \omega(k)t - \alpha(k) \approx \varphi(k_0) + \varphi'(k_0)(k-k_0) + \frac{1}{2} \varphi''(k_0)(k-k_0)^2$

→ $\Psi(x,t) = e^{i\varphi(k_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} |g(k)| e^{i\varphi'(k_0)(k-k_0)} e^{\frac{i}{2} \varphi''(k_0)(k-k_0)^2}$



$t=0$: Destruktive Interferenz für $(x-x_0)(k-k_0) \geq 2\pi \rightarrow \Delta x \Delta k \geq 2\pi$

→ Prinzip der stationären Phase: $\varphi'(k_0) = x - \omega'(k_0)t - \alpha'(k_0) \stackrel{!}{=} 0 \rightarrow x = x_0 + v_g t$; $v_g = \omega'(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m}$



→ Dispersion: $\varphi''(k_0) = -\omega''(k_0)t - \alpha''(k_0)$ wirkt Prinzip der stationären Phase entgegen $\Delta k \sim \frac{1}{\sqrt{t}} \rightarrow \Delta x \sim \sqrt{t} \rightarrow$ Wellenpaket fließt im Ortsraum auseinander

↳ Physikalische Begründung: $v_{gr} = 2v_{ph}$ (vgl. Wasserwellen mit $v_{gr} = \frac{3}{2}v_{ph}$)

Impulsraum: $|\Psi(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p|\Psi(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ipx/\hbar} \Phi(p) \rightarrow \Phi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \Psi(x)$

Wellenpaket auf Potentialbarriere: Reflexion, Transmission, Tunneleffekt $\rightarrow$ Wellenpaket als LK ebener Wellen

- Erhaltungsgrößen $|\Psi\rangle_n = e^{iHt/\hbar} |\Psi\rangle_s$; $\hat{O}_n = e^{iHt/\hbar} \hat{O}_s e^{-iHt/\hbar}$

i.A. ist ${}_s \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle_s = {}_n \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle_n$

Ehrenfest: $\frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle [\hat{O}, \hat{H}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \rangle$

Heisenberg:

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{1}{\hbar} [\hat{O}_n, \hat{H}_n] + \left(\frac{\partial \hat{O}_n}{\partial t} \right)_n$$

$\hat{O}$ bzw. $\hat{O}_n$ ist Erhaltungsgröße, wenn $[\hat{O}, \hat{H}] = 0$ und $\frac{\partial \hat{O}}{\partial t} = 0$

Beweise: $i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \hat{H} \Psi \rangle - \langle \hat{H} \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle + i\hbar \langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \rangle$

$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O}_n = i\hbar \hat{U}^\dagger \hat{O}_s \hat{U} = -\hat{H}_n \hat{O}_n + \hat{O}_n \hat{H}_n + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{O}_n}{\partial t} \right)_n$

Klassisch: $\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}$, wobei $\{F, G\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right)$

Noether: Zeittranslations-, Translations- und Rotationsinvarianz, ...

Seien $|\Psi\rangle$ und $|\Phi\rangle$ EZe von $\hat{H}$ und $[\hat{A}, \hat{H}] = 0 \rightarrow \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle = \frac{1}{i\hbar} (-\langle \Psi | \hat{H} | \hat{A} | \Phi \rangle + \langle \Psi | \hat{A} | \hat{H} | \Phi \rangle) = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \Phi \rangle = 0$

- CSCO/VSKO: Vollständiger Satz kommutierender Observablen $\rightarrow \exists$ Gemeinsame Eigenbasis (vgl. Heisenberg: $\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$)

Eindeutige Angabe des Zustandes durch Quantenzahlen $\rightarrow$ Aufhebung der Zustandsentartung

Keine Entartung des Spektrums $\rightarrow$ EZe sind direkt gemeinsame Eigenbasis (z.B. $\hat{H}$ und $\hat{P}$ beim 1D-Oszillator)

Beispiele: • Spinelles Teilchen im Zentralpotential: $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z \rightarrow |l, m\rangle$

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$, $[\hat{H}, \hat{L}_i] = 0$, da $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = \epsilon_{ijk} [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \hat{p}_k \sim \epsilon_{ijk} \hat{p}_i \hat{p}_j \hat{p}_k = 0$ und $[\hat{V}(r), \hat{L}_i] = \epsilon_{ijk} \hat{r}_j [\hat{V}(r), \hat{r}_k] \sim \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{r}_k = 0$

• Addition von Drehimpulsen: $\hat{H} \sim \hat{L}^2 \rightarrow [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0, [\hat{S}_z, \hat{H}] = 0 \rightarrow \hat{H}, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}_z \rightarrow |l, s, m_j\rangle$

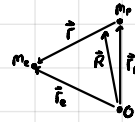
Beweis: • Ohne Entartung, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \rightarrow \hat{A} \hat{B} |\psi_n\rangle = \hat{B} \hat{A} |\psi_n\rangle = a_n \hat{B} |\psi_n\rangle = b_n \hat{B} |\psi_n\rangle \sim |\psi_n\rangle$

Matrixdarstellung von $\hat{B}$

• M -fache Entartung: $\hat{A} \hat{B} |\psi_{n,m}\rangle = a_n \hat{B} |\psi_{n,m}\rangle = b_n \hat{B} |\psi_{n,m}\rangle = \sum_k C_{mk} |\psi_{n,k}\rangle \rightarrow C_{mk} = \langle \psi_{n,k} | \hat{B} | \psi_{n,m} \rangle = C_{km}^* \rightarrow C$ ist diagonalisierbar

• Wasserstoffatom

$$\left. \begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_p^2}{2m_p} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_e - \vec{r}_p|} \\ \hat{R} &= \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}, \quad \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p, \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \rightarrow \text{Zentralfeldpotential} \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) = \hat{p}_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \end{aligned}$$



Erhaltungsgrößen: $E, \vec{L}, L^2$, Runge-Lenz

CSCO: $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ mit EZen $|l, m\rangle \rightarrow \hat{H}$ alleine würde nicht ausreichen wg. Entartung

Entartung: $E_n = -\frac{Z^2 R_y}{n^2}$ mit $g(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2$ bzw. $g(n) = Zn^2$ (Spin)

$\rightarrow$ Aufhebung durch (Hyper-)Feinstruktur, äußere Felder ($\vec{B}$: Zeeman, $\vec{E}$: Stark), ...

Separationsansatz: $|l, m\rangle \sim e^{im\phi} \xrightarrow{\text{2}\pi\text{-Periodizität}} m \in \mathbb{Z} \rightarrow l \in \mathbb{N}$, da $|m| \leq l$ und $\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \sim \hat{L}_z |l, m \pm 1\rangle \sim \psi(r, \theta, \phi) = R_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$

$\hookrightarrow$ Laguerre-DGL $\rightarrow$ nur Lösung für $l \in \mathbb{N}$

Drehimpulsalgebra: $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad \hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{L}_\pm &:= \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y; \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = [\hat{L}_x, \hat{L}_\pm] \pm i[\hat{L}_y, \hat{L}_\pm] = i\hbar \hat{L}_y \pm \hbar \hat{L}_x = \pm \hbar \hat{L}_\pm \\ \hat{L}_z \hat{L}_\pm |l, m\rangle &= \hat{L}_\pm \hat{L}_z |l, m\rangle \pm \hbar \hat{L}_\pm |l, m\rangle = (m \pm 1) \hbar \hat{L}_\pm |l, m\rangle \rightarrow \hat{L}_\pm |l, m\rangle \sim |l, m \pm 1\rangle, \text{ da } [\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0 \end{aligned}$$

$$\langle \hat{L}_z \hat{L}_\pm |l, m\rangle = \langle l, m | \hat{L}_\pm \hat{L}_z |l, m\rangle = \langle l, m | \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \hat{L}_z |l, m\rangle = \langle l, m | \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_\pm |l, m\rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m(m \pm 1)] \geq 0 \rightarrow |m| \leq l$$

• Zeeman-Effekt (Nicht-entartete Störungstheorie 1. Ordnung)

Pauli-Hamiltonian: $H = \frac{(\hat{p} + e\vec{A})^2}{2m} - e\phi + \frac{Ze^2}{r} \hat{S} \cdot \vec{B}, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$

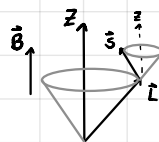
$\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B} \rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \rightarrow [\hat{p}, \vec{A}] = 0 \rightarrow (\hat{p} + e\vec{A})^2 = \hat{p}^2 + 2e\vec{A} \cdot \hat{p} + e^2 \vec{A}^2$

$\rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e\hbar}{m} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad \frac{\Delta E_z}{\Delta E_0} = \frac{e\hbar B}{m \hbar^2} = \frac{B}{B_0} \quad \begin{matrix} \text{param. Teil} & \text{diam. Teil} \end{matrix}$

Paschen-Back-Effekt: Starkes B-Feld

Störung $\gg$ FS $\rightarrow$ Bleibe in Basis $|l, m, m_s\rangle$

$\rightarrow \Delta E = \mu_B B (m + 2m_s) \rightarrow$ Entartung wird z.T. aufgehoben

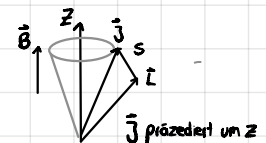


Anomaler Zeeman-Effekt:

Störung $\ll$ FS $\rightarrow |j, m_j\rangle$

$\rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e\hbar B}{m} (\hat{J}_z + \hat{S}_z)$

$\rightarrow \Delta E = \mu_B B (1 \pm \frac{1}{2l+1})$



Projektionstheorem: $\langle n' j m' | V_B | n j m \rangle = \frac{\langle n' j m' | \hat{J} \cdot \hat{S} | n j m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j m' | \hat{J}_z | j m \rangle$

$\langle j m' | \hat{S}_z | j m \rangle = \frac{m \hbar}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j m' | \hat{J} \cdot \hat{S} | j m \rangle$

$\hat{J} \cdot \hat{S} = \hat{L} \cdot \hat{S} + \hat{S}^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 + \hat{S}^2)$

(...)

• Feinstruktur 1) relativistische Energie: $E = \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} \approx mc^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{\vec{p}^4}{m^3 c^2}$

$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \rightarrow$ Einsetzen und $\langle \frac{1}{r} \rangle = \dots \rightarrow \Delta E_n = -E_n \left(\frac{Z\alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+1/2} \right) \right)$

$[\hat{L}^2, \hat{H}_{fs}] = 0$: Betrachte festes l

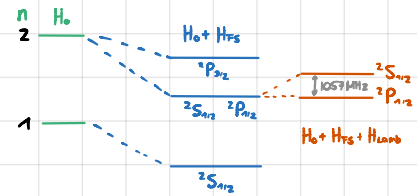
2) $\vec{L} \cdot \vec{S}$ -Kopplung: Dirac $\rightarrow H_{fs} = \frac{1}{2m^2 c^2} \left[\vec{p} \frac{dV}{dr} \right] \vec{L} \cdot \vec{S} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}; \quad \vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \rightarrow$ Entartete Störungstheorie in alter Basis $\rightarrow |j, m_j\rangle$

$\begin{aligned} \vec{L} \cdot \vec{S} |l, \frac{1}{2}, m_j\rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left[l(l+1) \left(\frac{1}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] |l, \frac{1}{2}, m_j\rangle = \frac{\hbar^2}{2} |l, \frac{1}{2}, m_j\rangle \quad \text{Für } l=0 \text{ keine Aufspaltung} \\ \vec{L} \cdot \vec{S} |l, \frac{3}{2}, m_j\rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left[l(l+1) \left(\frac{3}{2} \right) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] |l, \frac{3}{2}, m_j\rangle = -\frac{\hbar^2}{2} |l, \frac{3}{2}, m_j\rangle \end{aligned}$



3) Darwin-Term: Zitterbewegung → FS insgesamt: $\Delta E_{FS} = -E_n \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2} \right) < 0$

4) Lamb-Shift: QED → Aufhebung der $2S_{1/2}, 2P_{1/2}$ Energieentartung



• Zeitunabhängige Störungstheorie

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}, |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots \quad \lambda^{(0)}: \hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots \quad \lambda^{(1)}: \hat{H}_0 |n^{(1)}\rangle + \hat{V} |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle$$

Wähle $\langle n^{(1)} | n^{(0)} \rangle = 0 \rightarrow$ Ohne Entartung: $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle$; $|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$

$| \tilde{n}^{(1)} \rangle = | n^{(1)} \rangle - \alpha | n^{(0)} \rangle$ ist auch Lsg. $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | \tilde{n}^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} < 0$ im GZ

Mit Entartung: Diagonalisiere $\hat{V}$ im entarteten Unterraum $\rightarrow E_{n,\alpha}^{(1)} = \langle \tilde{n}_\alpha^{(0)} | \hat{V} | \tilde{n}_\alpha^{(0)} \rangle = v_\alpha$ hebt die Entartung (z.T.) auf

• Zeitabhängige Störungsrechnung / Dyson-Reihe

Bei einer zeitlich begrenzten Störung findet ein Übergang statt, wenn sich das System vor und nach der Störung in verschiedenen EZen von H_0 befindet.

1) Schrödingerbild: $i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle$ Übergangswahrscheinlichkeit: $W_{fi} = |\langle f | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle f | U(t, t_0) | i \rangle|^2$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t / \hbar} |n\rangle \rightarrow i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) e^{-iE_n t / \hbar} |n\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t / \hbar} \hat{V}(t) |n\rangle$$

$$\rightarrow a_m(t) = a_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt a_n(t) e^{-i(E_f - E_n)t} \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle \quad \hat{V}(t) = \lambda \hat{V}(t); a_n(t) = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \dots$$

$$\rightarrow 0. \text{ Ordnung: } a_f^{(0)}(t) = a_f(t_0) = \delta_{fi}$$

$$\rightarrow 1. \text{ Ordnung: } a_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt e^{i\omega_f \tau} \langle f | \hat{V}(\tau) | i \rangle$$

$$a_f(t) = \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt e^{i\omega_f \tau} \langle f | \hat{V}(\tau) | i \rangle \quad \text{mit } \omega_f = \frac{E_f - E_i}{\hbar}; W_f = |a_f(t)|^2$$

$$\rightarrow 2. \text{ Ordnung: } a_f^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^t dt e^{i\omega_f \tau} a_n^{(1)}(\tau) \langle f | \hat{V}(\tau) | n \rangle; \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

Sudden-Approximation: $V(t) = V \cdot \Theta(t - t_0) \rightarrow$ Zum Zeitpunkt t_0 bleibt die Wellenfunktion zunächst gleich
 $\rightarrow$ (Zeit-)Entwicklung in den neuen EZen des Systems

Beispiel: Stark-Effekt, System im Zustand $|210\rangle$, E-Feld wird spontan angeschaltet $\rightarrow$ Oszillationen zw. $|200\rangle$ und $|210\rangle$ (s.unten)

2) WW-Bild: $H = H_0 + V \rightarrow |\psi, t\rangle_S = e^{iH_0 t / \hbar} |\psi, t\rangle_I; V_I = e^{iH_0 t / \hbar} V e^{-iH_0 t / \hbar}$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi, t\rangle_I}{\partial t} = -H_0 e^{iH_0 t / \hbar} |\psi, t\rangle_S + i\hbar e^{iH_0 t / \hbar} \frac{\partial |\psi, t\rangle_S}{\partial t} = e^{iH_0 t / \hbar} V |\psi, t\rangle_S = V_I(t) |\psi, t\rangle_I$$

$$\Rightarrow |\psi, t\rangle_I = |\psi, t_0\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') |\psi, t'\rangle_I dt' \Rightarrow |\psi, t\rangle_I = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt'} |\psi, t_0\rangle_I$$

Bemerkung: Vorsicht bei $t_0 = 0$!

Dyson-Reihe: $|\psi, t\rangle_I = |\psi, t_0\rangle_I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') |\psi, t'\rangle_I dt' + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') \int_{t_0}^{t''} V_I(t''') |\psi, t'''\rangle_I dt''' + \dots$

$$\Rightarrow a_f(t) = \langle f | \psi, t \rangle_I = \langle f | \psi, t_0 \rangle_I = \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle f | V_I(t') | i \rangle + \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle f | V_I(t'') V_I(t') | i \rangle$$

$$\Rightarrow a_i^{(0)} = \delta_{fi}, \quad a_i^{(n)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle f | V_I(t') | i \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} \langle f | V(t') | i \rangle \quad \left| \psi(t) \right\rangle_S = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle_S \quad \text{und} \quad | \psi, t \rangle_S = \sum_n a_n(t) |n\rangle$$

$$a_i^{(n)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \sum_n \langle f | V_I(t') | n \rangle \langle n | V_I(t'') | i \rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} a_n^{(n)}(t') \langle f | V_I(t') | n \rangle$$

Es ist auch möglich die Dyson-Reihe direkt mit dem Zeitentwicklungoperator U zu entwickeln:

$$| \psi, t \rangle_S = U_I(t, t_0) | \psi, t_0 \rangle_S \quad U_I(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') U_I(t', t_0)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0) \quad U_I(t, t_0) = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt'} \quad (\text{vgl. mit } U(t, t_0) = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'} \text{ im Schrödingerbild})$$

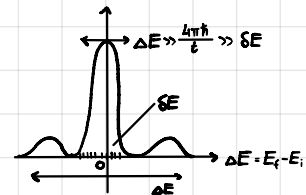
Fermis Goldene Regel

Übergangsrate ($|f\rangle \leftarrow |i\rangle$) in ein kontinuierliches System, Sudden-Approximation: $V(t) = V_0(t) \rightarrow$ „schnelle Störung“

$$W_{if} = \frac{1}{\hbar} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} \langle f | V_I(t') | i \rangle \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{1}{i\omega_{fi}} (e^{i\omega_{fi}t} - 1) \right|^2 |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\sin(\frac{\omega_{fi}t}{2})}{\omega_{fi}/2} \right|^2 |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2, \quad \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

$$W_{if} = \frac{t}{\hbar} \frac{\sin^2(\frac{\omega_{fi}t}{2})}{(\omega_{fi}/2)^2} |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} W_{if} = \frac{\pi t}{\hbar} \delta(\frac{\omega_{fi}}{2}) |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2 = \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2$$

$$\text{Übergangsrate: } \Gamma_{if} = \frac{W_{if}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2 \quad \delta_E(x) = \frac{\sin^2 \frac{\omega x}{2}}{\pi \omega^2} \rightarrow \delta(x) \quad (t \rightarrow \infty)$$



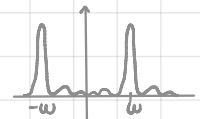
$$\text{Übergänge zw. Gruppen: } \Gamma_{i \rightarrow f} = \sum_f \Gamma_{if} = \int dE \Gamma_{if} \rightarrow \Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_f) |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2 \quad \text{Fermis Goldene Regel}$$

Fermis Goldene Regel ist nur für Übergänge in ein kontinuierliches Spektrum physikalisch sinnvoll (s. δ -Peak).

→ Innerhalb des δ -Peaks müssen innerhalb des Peaks mehrere Energiezustände liegen. → Bei diskreten Übergängen (z.B. Stark) nicht anwendbar
Eigentlich ist der Grenzwert $t \rightarrow \infty$ schon nicht physikalisch (irgendwann ist $\frac{4\pi\hbar}{t} < SE$) → Argumentation: Übergang ist prop. zu t und findet schon vor $t \rightarrow \infty$ statt

$$\text{Periodische Störung } V(t) = \Theta(t) (V e^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t}) \rightarrow \Gamma_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} [\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) |\langle f | V_I(t) | i \rangle|^2 + \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) |\langle f | V_I^\dagger(t) | i \rangle|^2]$$

Annulline: Keine Interferenz der δ -Fkt für $t \rightarrow \infty$ ($\omega \neq 0$)



Landau-Niveaus Geladene Teilchen nehmen in einem konstanten $\vec{B}$ -Feld quantisierte Energien an

$$H = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} \quad \vec{B}_0 = \mu_0 B \vec{e}_z, \quad \text{je nachdem ob } |1\rangle \text{ oder } |4\rangle \text{ wird } E \text{ um } \pm \mu_0 B \text{ angepasst (Pauli-Paramagnetismus: Kopplung an Spinfreiheitsgrade)}$$

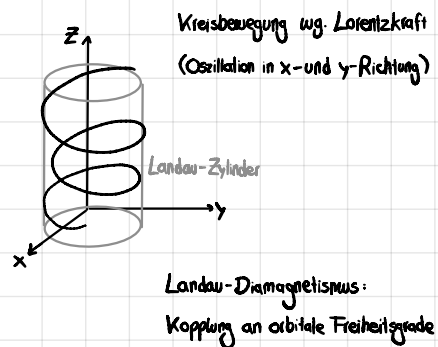
$$\text{Ohne Spin, } \vec{A} = \begin{pmatrix} -By \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{2\hbar} [(\hat{p}_x - eBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2] \psi = E \psi$$

$$\text{CSCO: } \hat{H}, \hat{p}_x, \hat{p}_z \rightarrow \psi(x) = e^{ik_x x} e^{ik_z z} u(y)$$

$$\frac{1}{2\hbar} [(\hbar k_x - eBy)^2 + \hat{p}_y^2] u(y) = (E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}) u(y), \quad \omega_L = \frac{eB}{m}$$

$$[\frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega_L^2}{2} (y - \frac{\hbar k_x}{eB})^2] u(y) = (E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}) u(y)$$

$$\rightarrow E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_L (n + \frac{1}{2}) \quad \text{unendlicher Entartungsgrad, da } k_x \text{ eine kontinuierliche Variable ist}$$



Teilchen in Kasten mit Kastenlänge $L \rightarrow$ Periodische RBen liefern Quantisierung von k_x und somit einen endlichen Entartungsgrad

Quantisierung des Strahlungsfelds / Vakuumkopplung

Spontane Emission: $\frac{dP_s}{d\Omega} \sim |\langle n, 0 | \hat{j}_k \cdot \vec{e}_{k,\lambda} | 0, m \rangle|^2$, wobei $\hat{j}_k(\vec{r}) = \hat{S}(\vec{r}) \cdot \hat{j}(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ und $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1 \rightarrow e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \approx 1 - i\vec{k} \cdot \vec{r}$

Atom Strahlungsfeld

↙ Muss möglich groß sein, damit Übergang wahrscheinlicher wird

1. Ordnung (Dipolübergänge): $\langle n, 0 | \hat{j}_k | 0, m \rangle \approx \langle n, 0 | \hat{j}_0 | 0, m \rangle$ wobei $\hat{j}_0 = \frac{1}{2} \hat{S}(\vec{r}) \cdot \hat{p} = \frac{1}{2} \hat{p}_x \hat{p}_x = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

$\rightarrow \frac{dP_s}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{2\pi\epsilon^2} |\hat{d}_{nm} \cdot \vec{e}_{k,\lambda}|^2$ mit $\hat{d}_{nm} = e \langle n, 0 | \vec{r} | 0, m \rangle$ Dipolmatrixelement wobei $\vec{r} = \vec{r}$ $[L_z, z] = 0$ $[L_z, x \pm iy] = \pm(x \pm iy)\hbar$

Auswahlregel analog zum Stark-Effekt: $L' = L \pm 1$ ($L=0$ wg. Parität verboten) und $m' = m$, jetzt jedoch auch $m' = m \pm 1$ erlaubt

Übergänge mit $L' = L \pm 1$ erst in höheren Ordnungen $\rightarrow$ magn. Dipol, el. Quadrupol, ... (Übergänge, wenn $\Delta E \neq 0$)

Plancksches Strahlungsgesetz

Photonengas $\hat{=}$ Ideales Bosonengas ohne Teilchenzahlerhaltung ($\rightarrow$ kein μ)

$$c(k) = \hbar c k \rightarrow \nu(\epsilon) = \frac{1}{2V} \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k) = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{d}{d\epsilon} \int k^2 dk = \frac{4\pi\epsilon^2}{(2\pi\hbar c)^3} \rightarrow \nu(\omega) = \frac{4\pi\omega^2}{(2\pi\hbar c)^3}$$

$$\nu(\omega, T) = \nu(\omega) \hbar \omega n_B(\hbar\omega) \rightarrow \nu(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad \text{Plancksches Strahlungsgesetz}$$

Oszillator	Bosonen
Eigenschwingung λ	Einleichenzustand λ
Anregungszahl n_λ	Besetzungszahl n_λ
$E = \sum_\lambda \hbar \omega_\lambda (n_\lambda + \frac{1}{2})$	$E = \sum_\lambda \epsilon_\lambda n_\lambda$

Streutheorie

$\hat{H}\psi = E\psi$, $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r})$ mit $V(\vec{r}) \rightarrow 0$ ($r \rightarrow \infty$) $\rightarrow$ Für $E > 0$: Ebene Wellen $|k\rangle$ mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, wobei $\vec{k}$ kontinuierlich

SG $\rightarrow$ Inhomogene Helmholtz Gleichung $(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r})\psi(\vec{r}) \rightarrow$ Kugelwellen $G_k(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}$ als retardierte Greens-Funktion

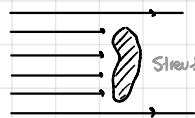
$\rightarrow \psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \int d^3r' G_k(\vec{r} - \vec{r}') \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$ Lippmann-Schwinger Gleichung $\left| \frac{d\psi}{d\Omega} = |f_k(\vec{n})|^2 \right.$ und $\left| \sigma = \int d\Omega |f_k(\vec{n})|^2 \right|$

Annahme: $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'| \rightarrow \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\vec{n}) + O(\frac{1}{r^2})$ mit $f_k(\vec{n}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$ Streuamplitude (ψ ist unbekannt)

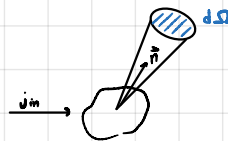
Optisches Theorem: $\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f_k(\theta=0))$ (folgt aus Interferenz) $\rightarrow$ Zusammenhang zw. Streuamplitude und Streuphase

V ist schwach $\rightarrow$ Berechnung der Streuamplitude durch Bornsche Reihe (analog zur Dyson-Reihe) $\rightarrow$ 1. Bornsche Näherung $\psi(\vec{r}) = \psi_0 + \hat{G}_k V \psi_0$

Zum Wirkungsquerschnitt:



Streufläche $\hat{=}$ Wirkungsquerschnitt



$$V_{\text{eff}} \rightarrow E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$$

$$E_n = -R_H \frac{1}{n^2} \text{ (diskont.)}$$

Der Wirkungsquerschnitt σ ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit einer WW zwischen einer einfallenden Wellenstrahlung oder einem einfallenden Teilchen („Projektil“) und einem anderen Teilchen (Streukörper oder Target).

Wenn durch die Reaktion zw. der einfallenden Primärstrahlung und dem Target eine Sekundärstrahlung entsteht (gestreute Primärstrahlung), so wird deren Intensitätsverteilung über die Raumrichtung Ω beschrieben durch $d\sigma/d\Omega$

Aufgabensammlung

• Harmonischer Oszillator (1D)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}; \quad \hat{a} := \frac{m\omega \hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad \hat{a}^\dagger := \frac{m\omega \hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad x_0 := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\hat{n} := \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}^\dagger \rightarrow \hat{H} = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2}) \rightarrow \text{Suche } |n\rangle \text{ mit } \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \text{ wobei } n \geq 0 \text{ wg. } \langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle \geq 0$$

$$\hat{n}|0\rangle = 0|0\rangle \rightarrow \hat{a}|0\rangle = 0 \rightarrow \Psi_0(x) = N e^{-x^2/2x_0^2} \text{ mit } E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, [\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{n}, \hat{a}^\dagger]|n\rangle = \hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle - \hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger|n\rangle \rightarrow \hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle \rightarrow \hat{a}^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle$$

$$\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger \rangle = \langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle = \langle \hat{a} | \hat{n} | \hat{a} \rangle = (n+1) \rightarrow \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \text{ und } \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \text{ analog}$$

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \text{ mit } E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

$$\text{Kohärente Zustände: } \hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \alpha \in \mathbb{C} \rightarrow |\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} |n\rangle \rightarrow |\Psi_\alpha(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\alpha\rangle$$

• Harmonischer Oszillator mit Störung $\hat{V} = \lambda(t) \hat{x}^3$

Übergangswahrscheinlichkeit von $|0\rangle$ zu $|1\rangle$:

$$\hat{a} = \frac{m\omega \hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \quad \left. \begin{array}{l} \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \end{array} \right\} \quad \langle 1 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^3 | 0 \rangle = \langle 1 | \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} | 0 \rangle = 1 + 2 = 3; \quad \omega_4 = \frac{E_4 - E_1}{\hbar} = \omega$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{m\omega \hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \quad W_{0,1} = \frac{1}{\hbar} \left| \int_0^t dt e^{i\omega_4 \tau} \langle 1 | \hat{V} | 0 \rangle \right|^2 = \frac{9\lambda^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt \lambda(t) e^{i\omega \tau} \right|^2$$

Welche Übergänge sind in 1. und 2. Ordnung zu finden, wenn $|i\rangle = |0\rangle$?

Zeitunabhängige ST, wenn $\lambda = \text{const.}$

$$1. \text{ Ordnung: } a_i^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt e^{i\omega_i \tau} \langle 1 | \hat{V} | 0 \rangle \rightarrow |1\rangle, |3\rangle$$

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |m^{(1)}\rangle \frac{\langle m | \hat{V} | 0 \rangle}{E_n - E_m}$$

$$2. \text{ Ordnung: } a_i^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_0^t dt e^{i\omega_n \tau} a_n^{(1)}(\tau) \langle 1 | \hat{V} | n \rangle \rightarrow |0\rangle, |2\rangle, |4\rangle, |6\rangle$$

$\rightarrow \dots$

• Harmonischer Oszillator mit $H = H_0 + \lambda(t) \hat{x}$

Gesucht: Übergangswahrscheinlichkeit von $|0\rangle$ zu $|2\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \rightarrow a_f(t) = \delta_{if} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt e^{i\omega_f \tau/\hbar} \langle f | \hat{V} | i \rangle; \quad \omega_4 = \frac{E_4 - E_1}{\hbar}$$

$$W_{1,2} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt \lambda(t) e^{i\omega_2 \tau/\hbar} \langle 2 | \hat{x} | 1 \rangle \right|^2; \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$W_{0,2} = \frac{1}{2m\hbar\omega} \left| \int_0^t dt \lambda(t) e^{i\omega_2 \tau/\hbar} \langle 2 | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \right|^2 = 0 \rightarrow 1. \text{ Ordnung Störungstheorie reicht hier nicht aus!}$$

$$W_{0,2}^{(2)} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \sum_n \int_0^t dt \lambda(t) e^{i\omega_n \tau} a_n^{(1)}(\tau) \langle 2 | \hat{x} | n \rangle \right|^2$$

$$= \frac{1}{2m\hbar\omega} \left| \int_0^t dt \lambda(t) (e^{i\omega_2 \tau} \underbrace{a_0^{(1)}(\tau)}_{=0} \langle 2 | \hat{x} | 3 \rangle + e^{i\omega_1 \tau} a_1^{(1)}(\tau) \langle 2 | \hat{x} | 1 \rangle) \right|^2 = \frac{1}{m\hbar\omega} \left| \int_0^t dt \lambda(t) e^{i\omega_2 \tau} a_1^{(1)}(\tau) \right|^2 + 0$$

• Harmonischer Oszillator mit Störung $(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})^2$

$\hat{x}\hat{p}$ als Störung nicht möglich, da nicht hermitesch $\rightarrow \hat{V} = (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})^2$

$$\left. \begin{aligned} \hat{x} &= \alpha(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} &= \beta(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \end{aligned} \right\} \langle 21|V|0\rangle = (\dots), \text{ wobei die Terme } \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}, \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} \text{ und } \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} \text{ beitragen}$$

• Stark-Effekt Wasserstoffspektrum ohne Spin: $E_n = -\frac{R_H}{n^2}$; $g(n) = n^2$

$$\vec{E} = E\hat{e}_z \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \hat{V} = eEz, \text{ wobei } [\hat{H}, \hat{S}] = 0 \rightarrow \vec{E} \text{ und } \vec{S} \text{ koppeln nicht}$$

$$\text{Quadratischer Stark Effekt: } n=1; E_1^{(1)} = 0; E_1^{(2)} = \sum_{m \neq 1} \frac{|\langle 100|\hat{z}|m10\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \sim E^2 < 0$$

$n=2$: $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$ Entartete Störungsrechnung $\rightarrow$ Diagonalisiere $\hat{V} \sim \hat{z}$

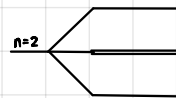
$$\left. \begin{aligned} \text{Auswahlregeln: } 1) \langle n'l'm|[\hat{L}_z, \hat{z}]|n'l'm\rangle &= (m-m')\hbar \langle n'l'm|\hat{z}|n'l'm\rangle = 0 \rightarrow m=m' \\ 2) \hat{p}\hat{z}\hat{p} &= -\hat{z} \rightarrow (-1)^{l'+l} \langle n'l'm|\hat{z}|n'l'm\rangle = -\langle n'l'm|\hat{z}|n'l'm\rangle \rightarrow (l+l') \text{ ist ungerade} \end{aligned} \right\} \hat{V} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \zeta = -3a_0 e E \sim E \text{ reell}$$

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle + |210\rangle), \nu = +\zeta$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle - |210\rangle), \nu = -\zeta$$

Allgemeiner für $n>2$: Wigner-Eckart-Theorem $\langle l'm|T_q^{(k)}|l,m\rangle \sim \langle lkmq|l'm\rangle$

$\hat{V} \sim \hat{z} = r \cos\theta$ entspricht $Y_0^0 \rightarrow l' = l \pm 1$, da $l=l'$ wg. (z) ausgeschlossen ist



Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten entsprechen den Entwicklungskoeffizienten, wenn man

bei der Drehimpulsaddition die neuen Zustände in der Basis der alten entwickelt: $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{l,m} \underbrace{\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | l m \rangle}_{CGK} |l m\rangle$

Beispiel: System im Zustand $|\psi, 0\rangle = |210\rangle$, E-Feld wird spontan angeschaltet (Sudden-Approximation)

$$|210\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \rightarrow |210\rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle e^{-iE_+ t/\hbar} - |-\rangle e^{-iE_- t/\hbar})$$

$$|210\rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_z t/\hbar} (|+\rangle e^{-i\zeta t/\hbar} - |-\rangle e^{+i\zeta t/\hbar}), \text{ wobei } E_{\pm} = E_z \pm \zeta$$

$$= \frac{1}{2} e^{-iE_z t/\hbar} [(|200\rangle + |210\rangle) e^{-i\zeta t/\hbar} - (|200\rangle - |210\rangle) e^{+i\zeta t/\hbar}]$$

$$= e^{-iE_z t/\hbar} \left[i \sin\left(\frac{\zeta t}{\hbar}\right) |200\rangle + \cos\left(\frac{\zeta t}{\hbar}\right) |210\rangle \right] \Rightarrow \text{Oszillationen zw. } |200\rangle \text{ und } |210\rangle \text{ mit Frequenz } \frac{\zeta}{\hbar} = \frac{3e a_0 E}{\hbar}$$

$$\approx e^{-iE_z t/\hbar} \left[\frac{i\zeta}{\hbar} t |200\rangle + |210\rangle \right] \text{ für kleine Zeiten} \rightarrow W_F = \frac{\zeta^2}{\hbar^2} t^2$$

Fermi:

$$W_F = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{\sin(\frac{\omega_F t}{2})}{\omega_F/2} \right|^2 |\langle 210|V|1\rangle|^2 = \frac{\zeta^2}{\hbar^2} \left| \frac{\sin(\frac{\omega_F t}{2})}{\omega_F/2} \right|^2 \approx \frac{\zeta^2}{\hbar^2} t^2 \text{ wie in der Entwicklung oben}$$

- Pauli-Matrizen $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$; $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad | \quad [\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad | \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \quad | \quad [\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k$$

- Spin in Magnetfeld

$$S = \frac{\hbar}{2} \text{ in Zustand } |\uparrow\rangle_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \vec{B} = B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}; \quad \vec{\mu}_{\text{spin}} = -\frac{2e\hbar}{4m} \vec{S} \rightarrow \hat{H} = \hat{S}_x + \hat{S}_z \sim \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \text{ ges.: Basis } |\psi_{\pm}\rangle, \text{ in der } \hat{H} \text{ diagonal ist}$$

$$\rho(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda - 1 & -1 \\ -1 & \lambda - 1 \end{vmatrix} = \lambda^2 - 2 = 0 \rightarrow \lambda = \pm\sqrt{2} \quad \begin{cases} \text{Kern} \begin{pmatrix} 1-\sqrt{2} & -1 \\ -1 & 1-\sqrt{2} \end{pmatrix} = \text{Kern} \begin{pmatrix} \sqrt{2}-1 & 1 \\ 1 & \sqrt{2}-1 \end{pmatrix} = \text{lin} \left\{ \begin{pmatrix} 1-\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \rightarrow |\psi_+\rangle = |\uparrow\rangle - (1-\sqrt{2})|\downarrow\rangle \rightarrow \langle 1|\sqrt{2}\rangle = \langle 1|\sqrt{2}\rangle|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \\ \text{Kern} \begin{pmatrix} 1+\sqrt{2} & -1 \\ -1 & 1+\sqrt{2} \end{pmatrix} = \text{Kern} \begin{pmatrix} \sqrt{2}+1 & 1 \\ 1 & \sqrt{2}+1 \end{pmatrix} = \text{lin} \left\{ \begin{pmatrix} 1+\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \rightarrow |\psi_-\rangle = |\uparrow\rangle - (1+\sqrt{2})|\downarrow\rangle \rightarrow \langle 1|\sqrt{2}\rangle = \langle 1|\sqrt{2}\rangle|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \end{cases}$$

$$\rightarrow |\uparrow\rangle = \alpha [|\psi_+\rangle - \frac{1-\sqrt{2}}{1+\sqrt{2}} |\psi_-\rangle] \xrightarrow{\hat{H} + \hat{H}(t)} \hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$\rightarrow |\uparrow\rangle(t) = \alpha [|\psi_+\rangle e^{-iE_+t/\hbar} - \frac{1-\sqrt{2}}{1+\sqrt{2}} |\psi_-\rangle e^{-iE_-t/\hbar}] \rightarrow (\text{Rabi-Oszillation zwischen } |\uparrow\rangle \text{ und } |\downarrow\rangle)$$

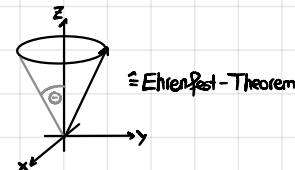
- Spinpräzession Präzession von $\langle \vec{S} \rangle$ um Magnetfeldachse mit Larmorfrequenz $\omega = \frac{eB}{\hbar}$

$$\hat{H} = \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{2e\hbar}{4m} \vec{S} \cdot \vec{B} \rightarrow \hat{H} = \frac{2e\hbar B}{4m} \hat{S}_z = \omega \hat{S}_z = \mu_B B \sigma_z = \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \text{o.B.d.A. } \chi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_0/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta_0/2) \end{pmatrix}$$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = \hat{U}(t) |\uparrow\rangle \langle \uparrow| \psi(0)\rangle + \hat{U}(t) |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \psi(0)\rangle$$

$$Ez: \chi_z \text{ mit } E_{\pm} = \pm \mu_B B = \pm \frac{\hbar\omega}{2} \rightarrow \chi(t) = a \chi_+ e^{-iE_+t/\hbar} + b \chi_- e^{-iE_-t/\hbar} = \begin{pmatrix} a e^{-i\omega t/2} \\ b e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \chi^\dagger \hat{S}_x \chi = \frac{\hbar}{2} \chi^\dagger \sigma_x \chi = (\dots) \rightarrow \langle \hat{S} \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sin\theta \cos(\omega t + \phi) \\ \sin\theta \sin(\omega t + \phi) \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$



$$\langle \hat{S}^2 \rangle = 3 \langle \hat{S}_z^2 \rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \rightarrow \langle \hat{S}_x^2 \rangle = \langle \hat{S}_y^2 \rangle = \langle \hat{S}_z^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \text{ folgt auch aus } \langle \hat{S}_z^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \chi^\dagger \sigma_z^2 \chi = \frac{\hbar^2}{4} (a^* b^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} (|a|^2 + |b|^2) = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\text{Alternativ: } e^{i\alpha(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})} = \cos(\alpha) 1 + i(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin(\alpha) \text{ für } |\vec{n}| = 1$$

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{-i\vec{\Phi}(t) \cdot \vec{S}}, \text{ wobei } \vec{\Phi}(t) = \vec{\omega} t \text{ mit } \vec{\omega} = \frac{2e\hbar}{4m} \vec{B}$$

$$\hat{U}(t) = \cos(\frac{\omega t}{2}) 1 - \frac{i\vec{\omega} \cdot \vec{\sigma}}{\omega} \sin(\frac{\omega t}{2}) \xrightarrow{\vec{B} = B \hat{e}_z} \hat{U}(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \rightarrow \chi(t) = \hat{U}(t) \chi(0) = \begin{pmatrix} a e^{-i\omega t/2} \\ b e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \rightarrow (\dots)$$

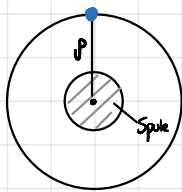
- Stern-Gerlach

$$\text{Anfangszustand } |\psi\rangle(0) = |\uparrow\rangle_z, \text{ Stern-Gerlach in x-Richtung} \rightarrow H = \frac{2e\hbar}{4m} B \sigma_x = \mu_B B \sigma_x$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_z \pm |\downarrow\rangle_z) \text{ mit Energien } E = \pm \mu_B B$$

$$|\psi\rangle(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_x + |\downarrow\rangle_x) \rightarrow |\psi\rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i\mu_B B t/\hbar} |\uparrow\rangle_x + e^{i\mu_B B t/\hbar} |\downarrow\rangle_x) \rightarrow \text{Oszillation zwischen } |\uparrow\rangle_z \text{ und } |\downarrow\rangle_z$$

- Teilchen auf dem Ring Modellsystem in der QM, welches zur Quantisierung der Energie führt



$$\rho = \text{const} \rightarrow \psi = \psi(\phi), \text{ wobei } V(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{wenn } r = \rho \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{Alternative Rechnung: Griffiths}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \frac{d^2}{d\phi^2}, \text{ da } \vec{\nabla} = \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \text{ bzw. } \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

$$H\psi = E\psi \rightarrow \psi''(\phi) = -\frac{2m\rho^2}{\hbar^2} E\psi(\phi) \quad \psi(\phi + 2\pi) \stackrel{!}{=} \psi(\phi)$$

$$E > V_0 \rightarrow \psi(\phi) = \alpha e^{iM\phi}, \text{ wobei } M = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \rho \rightarrow E = \frac{\hbar^2 M^2}{2m\rho^2}, M \in \mathbb{Z}$$

$$\text{Normierung: } 1 = \int_0^{2\pi} |\psi(\phi)|^2 d\phi = 2\pi \alpha^2 \rightarrow \alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \rightarrow \psi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\phi}, M \in \mathbb{Z}$$

$$\text{Alternativ (Energieentartung f\"ur } \pm M \text{ und LK): } \psi_M^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cos(M\phi) \text{ und } \psi_M^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin(M\phi)$$

$$\text{Mit Spule: Zwar ist } \vec{B} = 0 \text{ auf dem Ring, aber } \vec{A} = \vec{\nabla} \chi \neq 0 \text{ (lokal)} \quad \chi(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} d\vec{s} \cdot \vec{A}(\vec{s})$$

$$\text{Eichfreiheit} \rightarrow \text{W\"ahle z.B. } \chi = a\phi \rightarrow \vec{A} = \vec{\nabla} \chi = A(\rho) \hat{e}_\phi = \text{const. auf dem Ring (Coulomb-Eichung)}$$

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{s} = 2\pi \rho A = \oint \vec{B} \cdot d\vec{A} = \Phi \rightarrow A = \frac{\Phi}{2\pi\rho}$$

$$\text{Min. Kopplung} \rightarrow H = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m}, \text{ wobei } \vec{p}\psi = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi \text{ und } [\vec{A}, \vec{p}] = 0 \rightarrow E_M = \frac{1}{2m\rho^2} \left[M^2 \hbar^2 + \frac{e\Phi M \hbar}{\pi} + \frac{e^2 \Phi^2}{4\pi^2} \right], M \in \mathbb{Z} \quad (\text{wg. } 2\pi\text{-Periodizit\"at})$$

$$\text{Alternative Form (s. Griffiths): } E_M = \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \left[M + \frac{\Phi_0}{2\pi} \right]^2 \text{ mit dem Flussquantum } \Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e}$$

→ Die Energieniveaus werden aufgrund des magnetischen Flusses angepasst, da sich der kinetische Impuls aufgrund der minimalen Kopplung an das nicht-verschwindende Vektorpotential verändert → Aufhebung der 2-fachen Energieentartung der Energieniveaus

Statistische Physik: N Teilchen auf dem Ring ohne WW

$$\text{Kanonische Dichtematrix: } \hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \quad Z = \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (\text{Summe über Mikrozustände})$$

$$\text{Identische Teilchen ohne WW} \rightarrow \text{Faktorisierung in Einteilchenzustände: } Z = \frac{1}{N!} Z_1^N \text{ mit } Z_1 = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad \text{Einteilchenzustände}$$

$$\rightarrow F = -k_B T \ln Z \rightarrow S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \dots$$

$$\text{Großkanonisch: } \hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}, \quad Z = \text{tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}) = \sum_{N=0}^{\infty} Z(T, \mu, N) z^N \rightarrow Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(Z_1 z)^N}{N!} = e^{Z_1 z} \rightarrow \Omega = -k_B T Z_1 e^{\beta \mu}$$

Wasserstoffatom → Teilchen mit Spins → Ising-Modell (...)

Relativistische QM

Lorentztransformation, Kovarianz

Relativitätsprinzip: In allen IS gelten die gleichen physikalischen Gesetze und c ist immer gleich

Lorentztransformation: Transformation von 4-Vektoren $X^\mu = \Lambda^\mu_\nu X^\nu$ zw. IS und IS' unter Invarianz der Minkowskinorm $X_\mu X^\mu$

4-Vektor: Transformiert sich wie der 4-Ortsvektor unter L.T.:

$$X^\mu = \begin{pmatrix} ct \\ \vec{x} \end{pmatrix} \text{ mit } X^\mu X_\mu = c^2 t^2 - \vec{x}^2 = s^2 = \text{const.}$$

$$P^\mu = \begin{pmatrix} E/c \\ \vec{p} \end{pmatrix} \text{ mit } P^\mu P_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2 = \text{const.}$$

$$j^\mu = \begin{pmatrix} c\rho \\ \vec{j} \end{pmatrix} \text{ mit } \partial_\mu j^\mu = \partial_\mu \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

$$A^\mu = \begin{pmatrix} \varphi/c \\ \vec{A} \end{pmatrix} \rightarrow \text{Feldstärketensor, ...}$$

Relativistische Mechanik:

$$L = -mc^2 \sqrt{1-\beta^2} \rightarrow E = \gamma mc^2 = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}$$

Kovarianz: Transformationsverhalten, bei dem die Basisvektoren und die darin dargestellten Vektoren in gleicher Weise transformieren

→ Physikalische Gesetze bleiben forminvariant

Konsistenzbedingung: $X'^\mu = \Lambda'^\mu_\nu X^\nu$, $X'_\mu = \eta_{\mu\nu} \Lambda'^\nu_\sigma \eta^{\sigma\tau} X_\tau$

$$X'^\mu X'_\mu = \Lambda'^\mu_\nu \eta_{\mu\sigma} \Lambda'^\sigma_\rho X^\nu X^\rho \stackrel{!}{=} X^\nu g_{\nu\tau} X^\tau \rightarrow \Lambda'^\mu_\nu \eta_{\mu\sigma} \Lambda'^\sigma_\rho \stackrel{!}{=} g_{\nu\tau} \text{ bzw. } \Lambda'^T g \Lambda' = g \text{ Konsistenzbedingung}$$

$$\rightarrow \det \Lambda = \pm 1 \rightarrow L_\pm = \{ \Lambda | \det \Lambda = \pm 1 \} \quad \Lambda'^\mu_\nu g_{\mu\sigma} \Lambda'^\sigma_\rho = (\Lambda'^\mu_\nu - \frac{2}{\epsilon} \Lambda'^\mu_\nu) = 1 \rightarrow \Lambda'^0_0 \geq 1 \text{ oder } \Lambda'^0_0 \leq -1 \rightarrow L'_\pm \hat{=} \text{Eigentliche, orthochrone L.T.}$$

Invarianz der Minkowskinorm: $A^\mu B^\mu = A'^\mu B'_\mu = g_{\mu\nu} A'^\mu B'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda'^\mu_\alpha \Lambda'^\nu_\beta A^\alpha B^\beta = A^\alpha \Lambda'^\mu_\alpha g_{\mu\nu} \Lambda'^\nu_\beta B^\beta = A^\alpha g_{\alpha\beta} B^\beta = A^\alpha B_\alpha = A \cdot B$

L.T.: Boost in x-Richtung $\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma \beta \\ 0 & \gamma \end{pmatrix}$, also $t' = \gamma(t - \frac{vx}{c^2})$ und $x' = \gamma(x - vt)$ mit $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ und $\beta = \frac{v}{c}$

Längenkontraktion: $L = x'_2 - x'_1 = \gamma(x_2 - x_1) = \gamma L_0 \rightarrow L = \frac{L_0}{\gamma} < L_0$

Zeitdilatation: $x'_1 = x'_2 = 0$, $T = t'_2 - t'_1 = \gamma(t_2 - \frac{vx_2}{c^2} - t_1 + \frac{vx_1}{c^2}) = \gamma(t_2 - t_1)(1 - \frac{v^2}{c^2}) = \frac{T_0}{\gamma} \rightarrow T = \gamma T_0 > T_0$

Klein-Gordon-Gleichung

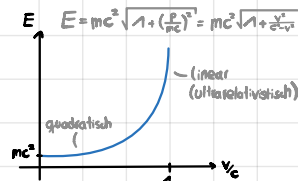
Probleme der SG $\hat{H}\Psi = E\Psi$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{Keine Symmetrie in Raum und Zeit} \rightarrow \text{Keine Lorentz-Invarianz} \\ \text{Keine relativistische Energie-Impuls-Beziehung} \end{array} \right.$

$$E^2 = m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2 \rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi = (m^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta) \Phi \rightarrow (\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \Phi = 0 \quad \text{KGG} \quad \Phi \text{ ist (Pseudo-)Skalarfeld}$$

Lösungen: $\Phi(\vec{x}, t) \sim e^{i(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)}$ mit $E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2}$

Probleme:

- $\mathcal{P}$ ist nicht positiv definit wegen Ableitungen 2. Ordnung
- Lösungen mit negativer Energie (Lösung: Interpretation als Antiteilchen)



Bemerkung: $(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}) \Psi = (i\partial_t + \frac{mc}{\hbar})(i\partial_t - \frac{mc}{\hbar}) \Psi = 0 \rightarrow \text{Lösungen der DG sind auch Lösungen der KGG}$

Dirac-Gleichung

Ansatz: Lineare Ableitung in Ort und Zeit

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 \rightarrow H^2 = c^2 (\vec{\alpha} \cdot \vec{p})^2 + \beta^2 m^2 c^4 + mc^2 [(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\beta + \beta(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})] \stackrel{\lambda = \pm 1}{=} c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4 \rightarrow (\vec{\alpha} \cdot \vec{p})^2 = \vec{p}^2, \alpha^2 = \beta^2 = 1, [(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\beta + \beta(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})] = 0$$

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})^2 = \alpha_i p_i \alpha_j p_j = \frac{1}{2} \{ \alpha_i, \alpha_j \} p_i p_j + p_i p_j \rightarrow \text{Clifford-Algebra: } \{ \alpha_i, \alpha_j \} = 2\delta_{ij} \text{ und } \{ \alpha_i, \beta \} = \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \text{ (folgt quasi aus KGG)}$$

$$\text{tr}(\alpha_i) = \text{tr}(\beta) = 0, \text{ da } H = H^\dagger \rightarrow \alpha_i^\dagger = \alpha_i, \beta^\dagger = \beta \rightarrow \text{tr}(\alpha_i) = -\text{tr}(\beta \alpha_i \beta) = -\text{tr}(\alpha_i) \text{ und } \text{tr}(\beta) = -\text{tr}(\alpha_i \beta \alpha_i) = -\text{tr}(\beta)$$

$$\text{tr}(M) = \sum \lambda_i \rightarrow N \text{ ist gerade} \rightarrow N=4, \text{ da f\u00fcr } N=2 \{ \alpha_i, 1 \} \neq 0 \rightarrow \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \text{ und } \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow \text{DG ist Spinor-Gleichung}$$

$$\text{Dirac-Darstellung: } \vec{\gamma} = \vec{\beta} \text{ und } \vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \{ \gamma^\mu, \gamma^\nu \} = 2g^{\mu\nu} 1$$

$$\text{Dirac-Gleichung: } (i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta mc^2) \psi = 0 \quad | : \frac{1}{mc} \beta \quad \alpha = \vec{\gamma}^\dagger \vec{\alpha} = \vec{\gamma}^\dagger \vec{\alpha}, \quad p = i\hbar \vec{\partial}$$

$$\rightarrow [i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \vec{\gamma}^\dagger \frac{\partial}{\partial \vec{x}} - \frac{mc}{\hbar}] \psi = 0 \rightarrow (i\partial - m \frac{\not{x}}{\hbar}) \psi = 0 \text{ bzw. } (\not{p} - mc) \psi = 0 \text{ Kovariante Form der DG}$$

$$\text{L\u00f6sungen: } E > 0 \rightarrow \text{Ansatz: } \psi(x) = u(p) e^{ipx} \rightarrow u(p, s) = N \begin{pmatrix} \frac{c}{E+m} \chi_s \\ \chi_s \end{pmatrix}, \quad \chi_s \in \{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \} \hat{=} \text{Spinzust\u00e4nde des Elektrons}$$

$$N = \sqrt{\frac{E+m}{2m}}$$

$$E < 0 \rightarrow \text{Ansatz: } \psi(x) = v(p) e^{ipx} \rightarrow v(p, s) = N \begin{pmatrix} \frac{E+m}{p} \chi_s \\ \chi_s \end{pmatrix}, \quad \chi_s \in \{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \} \hat{=} \text{Spinzust\u00e4nde des Positrons}$$

Forminvarianz: Transformationsverhalten f\u00fcr Dirac-Spinor ψ

$$x \xrightarrow{\Lambda} x' \quad \begin{matrix} \psi'(x') = S(\Lambda) \psi(x) \\ \psi(x) = S(\Lambda^{-1}) \psi'(x') \end{matrix}$$

L.T. und DG sind linear $\rightarrow \exists$ lineare Abbildung $S(\Lambda)$ mit $\psi'(x') = S(\Lambda) \psi(x) = \psi(\Lambda x)$, wobei $S(\Lambda^{-1}) = S(\Lambda)^\dagger$

$$S(\Lambda) (i\hbar \vec{\gamma}^\mu \partial_\mu - mc) S^{-1}(\Lambda) \psi'(x') = 0, \quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} = \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu \quad \left(\begin{matrix} \gamma\text{-Matrizen transformieren} \\ \text{nicht wg. Forminvarianz} \end{matrix} \right)$$

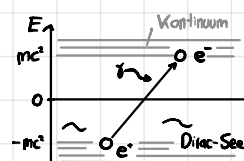
$$(IS) [S(\Lambda) i\hbar \vec{\gamma}^\mu \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu S^{-1}(\Lambda) - mc] \psi'(x') = 0$$

$$(IS') [i\hbar \vec{\gamma}^\mu \partial'_\mu - mc] \psi'(x') = 0 \rightarrow S(\Lambda) \vec{\gamma}^\mu \Lambda^\nu_\mu S^{-1}(\Lambda) = \vec{\gamma}^\nu \rightarrow S^{-1}(\Lambda) \vec{\gamma}^\mu S(\Lambda) = \Lambda^\mu_\nu \vec{\gamma}^\nu \text{ Bestimmungsgleichung}$$

$$\text{Infinitesimale eigentliche, orthochrone L.T.: } \Lambda^\mu_\nu = g^\mu_\nu + \Delta\omega^\mu_\nu \rightarrow \Delta\omega = i(\Delta\theta \cdot I + \Delta\eta \cdot K) \rightarrow S(\Lambda) = 1 + \frac{1}{2} \Delta\theta \cdot S(I) - \frac{1}{2} \Delta\eta \cdot S(K)$$

Interpretation negativer Energien: (Klassisch: Jedes e^- m\u00fcsste direkt unter Photonenabstrahlung zerfallen)

1) Dirac-See: „L\u00f6chertheorie“ unter Verwendung des Pauli-Prinzips
Im GZ seien alle Zust\u00e4nde mit $E < 0$ besetzt.



Paarbildung f\u00fcr $E > 2mc^2$:
 e^- mit $E < 0$ kann in Zustand mit $E > 0$
angeregt werden $\rightarrow$ „Loch“ $\hat{=}$ Positron

2) Feynman-St\u00fcckelberg: Ein Zustand mit $E < 0$ wird als Zustand

mit $E > 0$, inverser Ladung, gespiegeltem Raum und umgekehrter Zeitrichtung gedeutet. Die Wellenfunktion eines Elektrons mit $E < 0$ entspricht also der Wellenfunktion eines Positrons, das sich in einem gespiegelten Raum r\u00fcckw\u00e4rts in der Zeit bewegt $\rightarrow$ CPT-Symmetrie

• Nichtrelativistische Näherung

Ladungskonjugation (...)

Minimale Kopplung an em. Feld $\underbrace{p}_{\text{kanonisch}} \rightarrow \underbrace{p}_{\text{kin}} + eA \sim (p + eA - mc)\psi = 0$

DG: $H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 \rightarrow (\hbar \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + e\Phi)\psi = [c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) + \beta mc^2]\psi$

Ansatz: ψ besteht aus zwei Spinoren
→ Entkopplung der Gleichungen für Teilchen/Antiteilchen

$\vec{p}' = \left(\frac{E/c}{\vec{p}}\right), A' = \left(\frac{\Phi/c}{\vec{A}}\right)$

$\rightarrow \hbar \vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2 \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) - e\Phi \left(\frac{\vec{p}}{2}\right)$

Ansatz für $E > 0$: $\begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix} = e^{-imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix}$, wobei $\frac{v}{c} \ll 1, e\Phi \ll mc^2$

(Entwicklung der DG nahe der Ruheenergie in 1. Ordnung von $\frac{v}{c}$ mit kleinen äußeren Feldern)

$\rightarrow \hbar \vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2 \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) - e\Phi \left(\frac{\vec{p}}{2}\right)$

$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = \vec{\sigma}_j \cdot (\vec{p}_j + e\vec{A}_j)(\vec{p}_j + e\vec{A}_j) = (\delta_{jj} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k)(p_j + eA_j)(p_j + eA_j)$

$= (\vec{p} + e\vec{A})^2 + ie\epsilon_{ijk}\sigma_k(p_j A_j + A_j p_j)$

$\rightarrow \chi = \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc^2} \psi \ll \psi \rightarrow \hbar \vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \psi - e\Phi \psi$

$= (\vec{p} + e\vec{A})^2 + eh\epsilon_{ijk}\sigma_k \partial_j A_i = (\vec{p} + e\vec{A})^2 + eh\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$

$\rightarrow \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} - e\Phi + \frac{eh}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \psi$ Pauli-Gleichung $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \equiv$ Zweikomponentiger Ortswellenspinor

$\vec{A} = -\vec{A} \times \vec{B}, [\vec{A}, \vec{p}] = 0 \rightarrow (\vec{p} + e\vec{A})^2 = \vec{p}^2 + e\vec{A}^2 + 2e\vec{A} \cdot \vec{p} = \vec{p}^2 - e\epsilon_{ijk} p_j B_k = \vec{p}^2 + e\vec{L} \cdot \vec{B}$

$\rightarrow \hbar \vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{eh}{2m} (\vec{L} \cdot \vec{B})\right) \psi - e\Phi \psi \rightarrow g_F = 2$, wobei $\mu_B = \frac{eh}{2m}$

Ansatz für $E < 0$: $\begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix} = e^{imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix} \rightarrow \hbar \vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2 \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) - e\Phi \left(\frac{\vec{p}}{2}\right)$

$\rightarrow \psi = -\frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc^2} \chi \ll \chi \rightarrow \hbar \vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) = -\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \chi - e\Phi \chi \rightarrow \hbar \vec{\alpha} \cdot \left(\frac{\vec{p}}{2}\right) = \left(-\frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{eh}{2m} (\vec{L} \cdot \vec{B})\right) \chi - e\Phi \chi$

Änderung zu $E > 0$: $\psi \leftrightarrow \chi$ und $m \leftrightarrow -m$ (Antiteilchen) → Physikalisch: Feynman-Stückelberg → CPT-Symmetrie ($q \leftrightarrow -q, \vec{r} \leftrightarrow -\vec{r}, t \leftrightarrow -t$)

Entwicklung der DG in 2. Ordnung von $\frac{v}{c}$:

Foldy-Wouthuysen-Transformation → Feinstruktur → p^4 -Korrektur, Darwinterm, Spin-Bahn-Kopplung

Lorentz covariance vs. Lorentz invariance

→ Lorentz covariant: belongs to representation of Lorentz group, transformation can be written by using Λ^μ_ν $\# x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$

→ Lorentz invariant: does not change when changing reference frames

→ Form invariance: form of the equation stays the same (→ physical laws stay the same)

→ four-vectors: $a^\mu \rightarrow a'^\mu = \Lambda^\mu_\nu a^\nu \rightarrow$ covariant

→ spinors: $\psi \rightarrow \psi' = S(\Lambda)\psi \rightarrow$ covariant

→ scalars: $T \rightarrow T' = T \rightarrow$ invariant & covariant

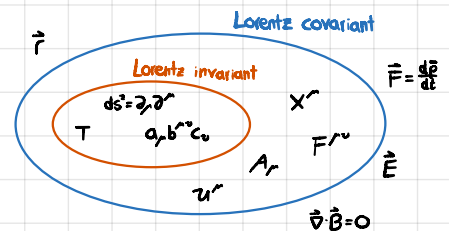
→ Lorentz tensors: $G^{\mu\nu} \dots J^\sigma \rightarrow G'^{\mu\nu} \dots J'^\sigma = \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta \dots \Lambda^\sigma_\gamma G^{\alpha\beta} \dots J^\gamma \rightarrow$ covariant

→ contractions: $a^\mu b_\mu = a'^\mu b'_\mu = a^\mu b_\mu \rightarrow$ invariant & covariant

→ equations: $\left. \begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= 4\pi\rho \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} &= 4\pi\vec{j} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \end{aligned} \right\} \rightarrow \left. \begin{aligned} \partial_\mu F^{\mu\nu} &= 4\pi j^\nu \\ \partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} &= 0 \end{aligned} \right\} \rightarrow \text{covariant}$

KG: $(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2})\phi = 0 \rightarrow$ invariant & covariant

Dirac: $\hat{H} = c(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) + \beta mc^2$ $\rightarrow$ $(i\partial_\mu \gamma^\mu - \frac{mc}{\hbar})\psi = 0 \rightarrow$ covariant



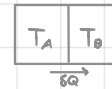
Theo F

- Basics OHS: $\forall$ td. System $\exists$ eine intensive Zustandsgröße Temperatur. Zwei Systeme im GG haben gleiche Temperatur.

1. HS: $\forall$ td. System $\exists$ eine extensive Zustandsgröße innere Energie U mit $dU = \delta Q + \delta W + \mu dN \rightarrow dU = TdS - pdV + \mu dN$

2. HS: $\forall$ td. System $\exists$ eine extensive Zustandsgröße Entropie S mit $dS \geq 0$

(Irreversibel) Prozess: $dS \geq \frac{\delta Q}{T} \rightarrow$ Auszeichnung einer Zeitrichtung



$$dS_A = -\frac{\delta Q}{T_A}, dS_B = \frac{\delta Q}{T_B}$$

$$dS = \delta Q \left(\frac{1}{T_B} - \frac{1}{T_A} \right) \geq 0 \rightarrow T_A \geq T_B$$

$\rightarrow$ Wärme fließt spontan nur von einem wärmeren zu einem kälteren System, da ansonsten $dS < 0$ (Clausius)

$\rightarrow$ $\exists$ td. Zustandsänderung, die eine Wärmemenge vollständig in Arbeit umwandelt (Lord Kelvin)

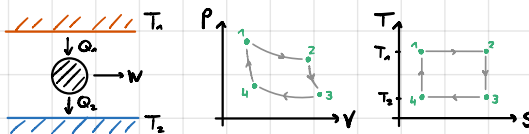
$\rightarrow$ Im td. GG ist S maximal

3. HS: $\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0$ „Nerst-Theorem“



Euler-Gleichung: $TS = U + pV - \mu N$

Carnot:



$$\eta = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{T_2}{T_1}, \oint dS = \oint \frac{\delta Q}{T} = 0$$

Legendre-Transformation: $F(x, y)$ mit $dF = \xi dx + \eta dy \rightarrow G(x, \eta) = F(x, y) - \eta y$ mit $y = y(x, \eta)$

$$dG = dF - \eta dy - y d\eta = \xi dx + \eta dy - \eta dy - y d\eta = \xi dx - y d\eta$$

$$U(S, V, N) = TS - pV + \mu N$$

$$dU = TdS - pdV + \mu dN$$

$$F(T, V, N) = U - TS = -pV + \mu N$$

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN$$

$$H(S, P, N) = U + pV = ST + \mu N$$

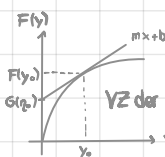
$$dH = TdS + Vdp + \mu dN$$

$$G(T, P, N) = U - TS + pV = \mu N$$

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN$$

$$\Omega(T, V, \mu) = U - \mu N - TS = -pV$$

$$d\Omega = -SdT - p dV - \mu dN$$



-S	U	V
H		F
-P	G	T

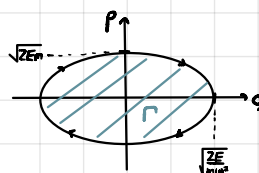
VZ der Krümmung von F darf sich nicht ändern

Im td. GG nehmen alle diese Potentiale bei jeweils festen natürlichen Variablen ihren Minimalwert an. (vgl. $dU \leq 0$ im abgeschlossenen System)

Wärmekapazität: $C = T \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{V, N}$

- Elementare Phasenraumzelle:

1D-Oszillator: $H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 = E$



$$\Gamma(E) = \pi \sqrt{2Em} \cdot \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \frac{2\pi E}{\omega}, [\Gamma] = \frac{h\omega}{2}$$

$\hookrightarrow$ klassisches Phasenraumvolumen

Größe der elementaren Phasenraumzelle: $\frac{\Gamma(E)}{\Omega(E)} = 2\pi\hbar \hat{=} \text{Phasenraumvolumen eines } E\text{-Zells}$

Quantisierung: $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), n = 0, 1, 2, \dots$

$$\rightarrow \Omega(E_n) = \frac{E_n}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \Omega(E) = \frac{E}{\hbar\omega} \text{ (# Zustände } \leq E)$$

Im klassischen Grenzfall geht das quantisierte System in ein kontinuierliches System über.

- Dichtematrix $\hat{\rho}$ enthält alle Informationen über das System

Reine Zustände $|\psi\rangle$ genügen der SG $\rightarrow |\psi\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$ $\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle = 1$ und i.A. $\langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle \neq 0$ für $\alpha \neq \beta$

Gemischte Zustände: Das Ensemble befindet sich mit der klassischen Wahrscheinlichkeit w_k im (reinen) Zustand $|\psi_k\rangle$

$$\rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \sum_k w_k \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_k \rangle = \sum_{k,m} \left(\sum_n w_k \langle m | \psi_k \rangle \langle \psi_k | n \rangle \right) \langle n | \hat{A} | m \rangle$$

Die Spur ist unabhängig von der gewählten Basis.

$$\rightarrow \hat{\rho} = \sum_k w_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \sum_{n,m} \langle m | \hat{\rho} | n \rangle \langle n | \hat{A} | m \rangle = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{A}) \quad \text{tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle = \sum_{n,m} \langle n | m \rangle \langle m | \hat{A} | m \rangle \langle n | m \rangle = \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle$$

Eigenschaften: $\hat{\rho}$ ist i.A. nicht diagonal: $|\psi_k\rangle = \sum_n c_{kn} |n\rangle \rightarrow \hat{\rho} = \sum_{k,n} w_k c_{kn} c_{kn}^* |n\rangle \langle n|$

$\rightarrow$ Matrixdarstellung in Basis $|n\rangle$: $\hat{\rho}_{nm} = \langle n | \hat{\rho} | m \rangle = \sum_k w_k c_{kn} c_{km}^* \rightarrow \hat{\rho}$ ist hermitesch $\rightarrow \exists$ ONB mit $\hat{\rho} = \sum_k w_k |n_k\rangle \langle n_k|$

• Norm: $\text{tr} \hat{\rho} = \sum_n \langle n | \hat{\rho} | n \rangle = \sum_k w_k \langle n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | n \rangle = \sum_k w_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle = 1$

• Positive Semidefinitheit: $\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle = \sum_k w_k |\langle \psi | \psi_k \rangle|^2 \geq 0 \quad \forall |\psi\rangle \quad (\forall \lambda, \lambda \geq 0)$

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Reines Ensemble: $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}(\hat{\rho} - 1) = 0$ und $\text{tr}(\hat{\rho}^2) = 1 \rightarrow \sum_n \hat{\rho}_{nn}(\hat{\rho}_{nn} - 1) = \lambda_n(\lambda_n - 1) = 0 \rightarrow \lambda_n \in \{0, 1\}$

Gemischtes Ensemble: $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho} \rightarrow$ Diagonaldarstellung: $\hat{\rho} = \begin{pmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & w_2 \end{pmatrix} \rightarrow$ Gleichverteilung/maximale Unordnung: $\hat{\rho} = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Quantität, um die „Unordnung“ der beiden Ensemble zu unterscheiden: Entropie $S = -k_B \text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$ unabhängig von der Basis

$$S = -k_B \sum_{n,m} \langle n | \hat{\rho} | m \rangle \langle m | \ln \hat{\rho} | n \rangle = -k_B \sum_{n,m} \hat{\rho}_{nm}^{(\text{diag})} \ln(\hat{\rho}_{nm}^{(\text{diag})}) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Reine Zustände: } S = 0 \\ \text{Gemischte Zustände: } S = -k_B \sum_n w_n \ln w_n \geq 0 \rightarrow S_{\text{max}} = k_B \ln(N) \end{array} \right.$$

S ist additiv/extensiv: $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A \hat{\rho}_B \rightarrow S = S_A + S_B$

Beispiele für Dichtematrizen: $\rho = |+\rangle \langle +| \rightarrow \rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

• $\rho = \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| + \frac{1}{2} |-\rangle \langle -| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$
 • $\rho = \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| + \frac{1}{2} |-\rangle \langle -| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$

- Mikrokanonisches Ensemble

$E, V, N = \text{const.}; D(E) = \sum_n \delta(E - E_n); \Omega(E) = \int dE' D(E') \rightarrow d\Omega = D(E) dE$

Von-Neumann-Gleichung: $\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$ im GG

$S(W, \lambda) = -k_B \sum_n w_n \ln w_n - \lambda k_B (\sum_n w_n - 1)$; Im td. GG ist S maximal

$\rightarrow \hat{H}$ und $\hat{\rho}$ haben gemeinsame Eigenbasis $\{|E, n\rangle\}$

$\rightarrow$ Entropiemaximierung: $w_i = \frac{1}{\dim H_E} = \frac{1}{\Omega(E)}$

$\frac{\partial S}{\partial w_i} = -k_B \ln w_i - k_B - \lambda k_B \stackrel{!}{=} 0 \rightarrow w_i = \frac{1}{e^{\lambda k_B}} = \text{const} \rightarrow \sum_i w_i = \frac{d\Omega}{dE} = 1 \rightarrow w_n = \begin{cases} \frac{1}{d\Omega(E)} & E < E_n < E + dE \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

$S = -k_B \sum_n w_n \ln w_n = -k_B \int_E^{E+dE} dE' D(E') W(E') \ln W(E') = -k_B dE D(E) W(E) \ln W(E) \rightarrow S(E) = k_B \ln(d\Omega(E))$

Dichteoperator: $\hat{\rho} = \frac{1}{d\Omega(E)} \sum_{n=1}^{d\Omega(E)} |E, n\rangle \langle E, n|$; $d\Omega(E) = \text{tr} \left(\sum_{n=1}^{d\Omega(E)} |E, n\rangle \langle E, n| \right)$ ($d\Omega \hat{=} Z$)

Mikrozustände

- Kanonisches Ensemble Kopplung der Ensemble an Wärmebad $\rightarrow \langle E \rangle, N, V = \text{const.}$

$$T = \langle E \rangle = U$$

$$S(W_i, \lambda, \beta) = -k_B \sum_n W_n \ln(W_n) - \lambda k_B (\sum_n W_n - 1) - \beta k_B (\sum_n W_n E_n - U)$$

$$\frac{\partial S}{\partial W_i} = -k_B (\ln(W_i)) - k_B - \lambda k_B - \beta k_B E_i \stackrel{!}{=} 0 \rightarrow W_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \text{ mit } Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$S = -k_B \sum_n W_n \ln W_n = -k_B \sum_n W_n (-\ln Z - \beta E_n) \Rightarrow S = k_B \ln Z + k_B \beta U \rightarrow F(T, V, N) = U - TS = -k_B T \ln(Z) \rightarrow S = -(\frac{\partial F}{\partial T}), \dots$$

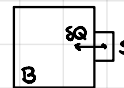
$$\frac{1}{T} = (\frac{\partial S}{\partial U})_{V, N} = k_B \beta + \underbrace{(k_B \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} + k_B U)}_{=0} (\frac{\partial \beta}{\partial U})_{V, N} \rightarrow \beta = \frac{1}{k_B T}, \text{ da } U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \rightarrow \hat{\rho} = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |n\rangle \langle n| = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}, Z = \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}})$$

Mikrozustände

$$\text{Energieschwankungen: } C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = (\dots) = \frac{\sigma_E^2}{k_B T^2} \sim N \rightarrow \frac{\sigma_E}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \rightarrow 0 \text{ (} N \rightarrow \infty \text{)}$$

Alternative Herleitung: Betrachte Gesamtsystem (System S, Wärmebad B) als mikrokanonisches Ensemble

$$E = E_S + E_B = \text{const}; E_S \ll E_B; W_{n,m} = \begin{cases} \frac{1}{d\Omega(E)} & \text{für } E < E_{S,n} + E_{B,n} < E + dE \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}; W_n = \sum_m W_{n,m} = \frac{d\Omega_B(E - E_{S,n})}{d\Omega(E)}$$



$$k_B \ln W_n = k_B \ln \Omega_B(E - E_{S,n}) - k_B \ln d\Omega(E) = S_B(E - E_{S,n}) - S(E) = S_B(E) - \frac{\partial S_B}{\partial E} E_{S,n} - S(E) \rightarrow k_B \ln W_n = \text{const.} - \frac{E_{S,n}}{T} \rightarrow W_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{S,n}}$$

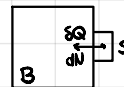
- Großkanonisches Ensemble Wärme- und Teilchenbad: $\langle E \rangle, \langle N \rangle, V = \text{const.}$

$$T = \langle E \rangle = U$$

$$\mu = \langle N \rangle$$

$$S(W_i, \lambda, \beta, \gamma) = -k_B \sum_n W_n \ln(W_n) - \lambda k_B (\sum_n W_n - 1) - \beta k_B (\sum_n W_n E_n - U) - \gamma k_B (\sum_n W_n N_n - N)$$

$$\text{Annahme: } [\hat{H}, \hat{N}] = 0$$



$$\frac{\partial S}{\partial W_i} = 0 \rightarrow W_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i - \gamma N_i} \rightarrow W_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_i - \gamma N_i)} \text{ mit } Z = \sum_n e^{-\beta(E_n - \gamma N_n)}, \hat{\rho} = \frac{e^{-\beta(\hat{H} - \gamma \hat{N})}}{Z} \text{ mit } Z = \text{tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \gamma \hat{N})})$$

$$S = -k_B \sum_n W_n \ln(W_n) = k_B \ln Z + k_B \beta U - k_B \gamma N \rightarrow \Omega(T, V, \mu) = U - TS - \mu N = -k_B T \ln Z \rightarrow N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}; \dots$$

↳ Invertierung liefert $\mu(T)$

$$\text{Bemerkung: } Z(T, V, \mu) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \gamma N_n)} = \sum_{n=0}^{\infty} Z(T, V, N) z^N \text{ mit } z = e^{\beta \mu}$$

$$\text{Protokoll: } \hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(\hat{H} - \gamma \hat{N})} \rightarrow \rho_{n,m} = \langle n | \hat{\rho} | m \rangle = \sum_l \langle n | \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_l - \gamma N_l)} | l \rangle \langle l | m \rangle, Z = \text{tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \gamma \hat{N})}) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \gamma N_n)} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_n e^{-\beta(E_n - \gamma N_n)} \rightarrow \text{Virialentwicklung}$$

$$\text{Alternativ: } E = E_S + E_B, N = N_S + N_B, E_S \ll E_B, N_S \ll N_B; W_{n,m} = \begin{cases} \frac{1}{d\Omega(E)} & \text{für } E < E_{S,n} + E_{B,n} < E + dE \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$k_B \ln W_n = k_B \ln(d\Omega(E - E_{S,n}, N - N_{S,n})) - k_B \ln(d\Omega(E))$$

$$W_n = \sum_m W_{n,m} = \frac{d\Omega_B(E - E_{S,n}, N - N_{S,n})}{d\Omega(E)}$$

$$= S_B(E - E_{S,n}, N - N_{S,n}) - S(E) = S_B(E, N) - \frac{\partial S_B}{\partial E} E_{S,n} - \frac{\partial S_B}{\partial N} N_{S,n} - S(E) = \text{const.} - \frac{E_{S,n} - \mu N_{S,n}}{T} \rightarrow W_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_n - \gamma N_n)}$$

Mikrokanonisch	Kanonisch	Großkanonisch
$E, N, V = \text{const}$	$\langle E \rangle, N, V = \text{const.}$	$\langle E \rangle, \langle N \rangle, V = \text{const.}$
$W_n = \frac{1}{d\Omega}$	$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}, W_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$	$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta(\hat{H} - \gamma \hat{N})}}{Z}, W_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_n - \gamma N_n)}$
$Z = d\Omega$	$Z = \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_n e^{-\beta E_n}$	$Z = \text{tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \gamma \hat{N})}) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \gamma N_n)} = \sum_{n=0}^{\infty} Z(T, V, N) z^N$
$S = k_B \ln(d\Omega)$	$F = -k_B T \ln Z \rightarrow S = -\frac{\partial F}{\partial T}$	$\Omega = -k_B T \ln Z \rightarrow S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}$
	$S = k_B \ln Z + k_B \beta U$	$S = k_B \ln Z + k_B \beta U - k_B \gamma N$

Quantenstatistik idealer Gase

Gk. Ensemble im td. Limes ($\langle N \rangle = \text{const.}$) als allgemeiner Ansatz

1) Bosonische Vielteilchenzustände

Symmetrisierung: $|\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle_S = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots}} \hat{P} |\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle$

Bosonischer Fock-Raum $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_S = |\{n_\lambda\}\rangle_S$ mit $n_\lambda \in \{0, 1, 2, \dots\}$

$|\{n_\lambda\}\rangle$ bilden eine vollständige ONB:

$\langle \{n_\lambda\} | \{n_\lambda\} \rangle = \prod_\lambda \delta_{n_\lambda, n_\lambda}$ und $\sum_{\{n_\lambda\}} |\{n_\lambda\}\rangle \langle \{n_\lambda\}| = \mathbb{1}$

↖ Besetzungszahldarstellung

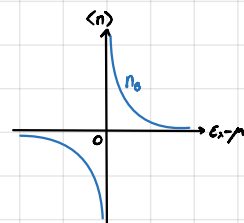
$\hat{N} |\{n_\lambda\}\rangle = \sum_\lambda n_\lambda |\{n_\lambda\}\rangle = N |\{n_\lambda\}\rangle$

$\hat{H} |\{n_\lambda\}\rangle = \sum_\lambda \epsilon_\lambda n_\lambda |\{n_\lambda\}\rangle$

Energie des Einteilchenzustandes

$Z_\lambda = \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} (e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)})^{n_\lambda} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}}$

$\langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} n_\lambda e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \frac{1}{Z_\lambda} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} Z_\lambda = n_B(\epsilon_\lambda - \mu) \Rightarrow n_B(\epsilon_\lambda - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} - 1}$ Bose-Einstein



2) Fermionische Vielteilchenzustände

Antisymmetrisierung: $|\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} |\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle$

Fermionischer Fock-Raum $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_A = |\{n_\lambda\}\rangle_A$ mit $n_\lambda \in \{0, 1\}$

$Z = \text{tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}) = \sum_{\{n_\lambda\}} \langle \{n_\lambda\} | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \{n_\lambda\} \rangle = \prod_\lambda Z_\lambda$



$Z_\lambda = \sum_{n_\lambda=0}^1 e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = 1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} \rightarrow \langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^1 n_\lambda e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda} = \frac{1}{Z_\lambda} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} Z_\lambda = \frac{e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}} \Rightarrow n_F(\epsilon_\lambda - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} + 1}$ Fermi-Dirac

3) Klassisches System

$Z_G = \text{tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}) = \sum_n \langle n | e^{-\beta(\epsilon_n - \mu N)} | n \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} Z(T, V, N) e^{\beta \mu N} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\beta \mu N}}{N!} (Z_1)^N = \exp(Z_1 e^{\beta \mu}) = \exp\left(\sum_\lambda e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}\right) = \prod_\lambda \exp(e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}) = \prod_\lambda Z_\lambda$

Faktorisierung von $Z(T, V, N)$: $Z = \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \frac{1}{N!} \sum_{n_1, \dots, n_N} \langle n_1, \dots, n_N | e^{-\beta \hat{H}} | n_1, \dots, n_N \rangle = \frac{1}{N!} Z_1^N$ mit $Z_1 = \sum_n \langle n | e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle$ (Annahme: Keine WW)

$\Rightarrow Z_\lambda = \exp(e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}) = \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}}{n_\lambda!}$

Mikrozustand

Einzelteilchenzustand

$\Rightarrow \langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{Z_\lambda} \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} n_\lambda \frac{e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}}{n_\lambda!} = \frac{1}{Z_\lambda} \frac{1}{\beta} \frac{\partial Z_\lambda}{\partial \mu} = e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} \Rightarrow n_{MB}(\epsilon_\lambda - \mu) = e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}$ Maxwell-Boltzmann

Einfacher: $Z = \prod_\lambda Z_\lambda \rightarrow \Omega_\lambda = -\frac{1}{\beta} \ln Z_\lambda = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{n_\lambda=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu) n_\lambda}}{n_\lambda!} \rightarrow \langle n_\lambda \rangle = -\frac{\partial \Omega_\lambda}{\partial \mu} = e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}$

• Mikrozustand / Makrozustand:

(Klassischer) Mikrozustand: $6N$ -dimensionaler Punkt $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ im Phasenraum $\rightarrow$ Vielteilchenzustand $\rightarrow$ Darstellbar durch Besetzungszahldarstellung

Postulat: Ein abgeschlossenes System im GG ist gleichwahrscheinlich in jedem seiner zugänglichen Mikrozustände

Makrozustand: Beschreibung des Systems durch die Angabe der Wahrscheinlichkeiten P_i für die Mikrozustände i

$$S_2 = +\frac{1}{2}$$

$$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$$

$\rightarrow$ Der Makrozustand beschreibt das System durch gemittelte Parameter, wie etwa Temperatur oder Druck.

Ein td. System mit geg. Makrozustand besetzt nun verschiedene Mikrozustände der Energie E_i mit gewissen Wahrscheinlichkeiten p_i .

Bemerkung: Mikrozustände bei Bosonen: Besetzungszahl n_λ , Impuls p , Spin s_z

$\hookrightarrow$ $(2s+1)$ -fache Spinentartung, wenn z.B. $n_\lambda = 5$ für $s=3$ Teilchen, dann sind $N = 2 \cdot 7 \cdot 5 = 35$ Teilchen in diesem Zustand

• Boltzmann-Gas

Kanonisch: $Z = \frac{1}{N!} Z_1^N$, wobei $Z_1 = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} = \frac{V}{\lambda_T^3}$ mit $\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$

Stirling: $N! \approx \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e}\right)^N$; $dF = -SdT - pdV + \mu dN$; $d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu$; $U = F + TS = \frac{d}{2} N k_B T$; $C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{d}{2} N k_B$; $P = N k_B T \frac{1}{V}$

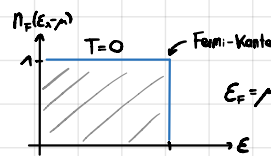
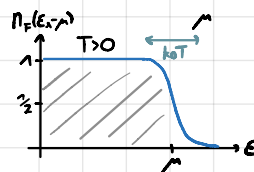
$Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)^N \approx \left(\frac{e}{N}\right)^N \left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)^N \rightarrow F \rightarrow S < 0$, wenn $\alpha = \frac{d}{2} \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m}} \leq \lambda_T \rightarrow$ Für hohe Dichten bzw. tiefe Temperaturen versagt die klassische Physik!

Großkanonisch: $Z = \sum_{N=0}^{\infty} Z(T, V, N) e^{\beta \mu N} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\beta \mu N}}{N!} Z_1^N = \exp(Z e^{\beta \mu}) \rightarrow \Omega = -k_B T \ln Z = -k_B T Z e^{\beta \mu} = -k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} e^{\beta \mu} \rightarrow \langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \dots$

• Ideales Fermigas

$$n_F(\epsilon, \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

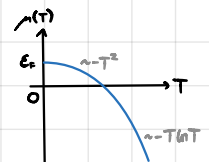
$$k_B T \ll \mu: Z = e^{\beta \mu} \gg 1$$



$$\epsilon_F = \mu(T=0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2 n}{2s+1} \right)^{2/3} \text{ aus } N = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon v(\epsilon)$$

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \sum_{\lambda} \ln(Z_{\lambda}) = -k_B T \sum_{\lambda} \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)}) = -k_B T V (2s+1) \int_0^{\infty} d\epsilon v(\epsilon) \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}) = \dots = -\frac{(2s+1)}{\lambda_T^3} V k_B T f_{5/2}(z)$$

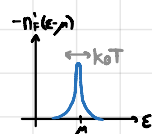
$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V, \mu} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0; \quad N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T, V} = \sum_{\lambda} n_F(\epsilon_{\lambda}, \mu) = (2s+1) \frac{V}{\lambda_T^3} f_{3/2}(z) \xrightarrow{\text{Invertierung}} z(T) \rightarrow \mu(T)$$



$$T \gg T_F: \text{Vermutung: } Z \ll 1 \rightarrow N \approx (2s+1) \frac{V}{\lambda_T^3} z \rightarrow \mu(T) \approx k_B T \ln\left(\frac{\lambda_T^3 N}{(2s+1)V}\right) \rightarrow \mu(T) \sim -T \ln(T) \quad \text{Bem.: } f_{\nu}(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} z^n}{n^{\nu}}$$

$T < T_F$: Sommerfeld-Entwicklung im Integral von Ω bzw. N zur Bestimmung von $\mu(T)$ (Sattelpunktsnäherung)

$$\Omega = -(2s+1) V \int_0^{\infty} d\epsilon b(\epsilon) (-n_F(\epsilon, \mu)), \text{ wobei } b(\epsilon) = \int_0^{\epsilon} d\epsilon' v(\epsilon') = b(\mu) + a(\mu)(\epsilon - \mu) + \frac{1}{2} v(\epsilon)(\epsilon - \mu)^2 + \dots$$



$$\frac{\Omega}{V} = -(2s+1) \left[b(\mu) + \frac{1}{6} v(\mu) (k_B T)^2 \right] \rightarrow N(T) = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = (2s+1) V \left[b'(\mu) + \frac{1}{6} v'(\mu) (k_B T)^2 \right] \stackrel{!}{=} (2s+1) V b'(\epsilon_F) = N(T=0)$$

$$b'(\mu) \approx b'(\epsilon_F) + b''(\epsilon_F)(\mu - \epsilon_F) \rightarrow \mu(T) \approx \epsilon_F - \frac{1}{6} \frac{v'(\epsilon_F)}{v(\epsilon_F)} (k_B T)^2 \quad \text{Kann auch mit } T \text{ zunehmen, wenn } v'(\epsilon_F) < 0, \text{ also für } n > d \text{ (s. unten)}$$

Freies e^- mit Einteilchen-Hamiltonian $H = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} + \frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{B} \cdot \vec{S}$

→ Landau-Diamagnetismus: Kopplung an orbitale Freiheitsgrade (oben)

→ Pauli-Paramagnetismus: Kopplung an Spinfreiheitsgrade → Einteilchenenergien werden zu $\epsilon = \epsilon_k \pm \mu_B B$ (vgl. Zeeman)

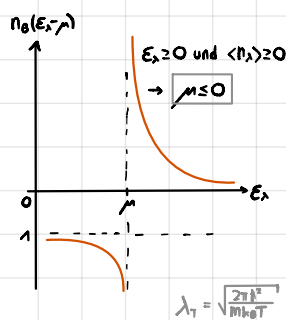
$$\epsilon_{k\sigma} - \mu = \epsilon_k \pm \mu_B B - \mu = \epsilon_k - \mu_{\pm}, \text{ wobei } \mu_{\pm} = \mu \mp \mu_B B$$

$$\text{Pauli-Suszeptibilität } \chi = \frac{\partial M}{\partial B} = 2\mu_B^2 \nu(\epsilon_F) = \text{const.}$$

$$\Omega = -k_B T \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_k \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu_{\sigma})}) \rightarrow M = -\frac{\partial \Omega}{\partial B} = \frac{\partial}{\partial B} \sum_{\sigma=\pm 1} \sum_k \mu_{\sigma} n_F(\epsilon_k - \mu_{\sigma}) = \mu_B \int d\epsilon \nu(\epsilon) \epsilon \approx 2\mu_B^2 \nu(\epsilon_F) B$$

Ideales Bosegas

Annahme: $s=0 \rightarrow$ Sonst: Multipliziere mit Entartungsgrad $(2s+1)$, der in $n_0(\epsilon, \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}$ noch nicht enthalten ist



$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \sum_k \ln Z_k = k_B T \sum_k \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}) \quad \text{GZ mit } \epsilon_k=0 \text{ separat behandelt werden}$$

$$N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \sum_k n_0(\epsilon_k, \mu) = \int d\epsilon \nu(\epsilon) n_0(\epsilon, \mu) \rightarrow \text{Invertierung des Integrals liefert } \mu(T)$$

$$\Omega = k_B T \ln(1-z) + k_B T V \int d\epsilon \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{\epsilon} \ln(1 - z e^{\beta\epsilon})$$

$$g_0(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}}$$

$$\Omega = k_B T \ln(1-z) - k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z) \quad \text{wobei } z = e^{\beta\mu} \in (0,1) \text{ f\"ur } \mu < 0$$

$$\zeta(u) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^u} = g_0(z=1)$$

Mittlere Teilchenzahl $N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \sum_k n_0(\epsilon_k, \mu) = -\beta z \frac{\partial \Omega}{\partial z} = \frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z)$; $g_{3/2}(z) = z \frac{\partial}{\partial z} g_{5/2}(z)$

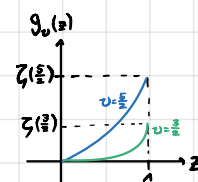
Für $T \rightarrow \infty$ gilt $\lambda_T^3 \rightarrow 0$, also muss $g_{3/2}(z) \rightarrow 0$ und somit $z \rightarrow 0$ bzw. $\mu \rightarrow -\infty$ ($N \approx \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z)$, also $n \lambda_T^3 \ll 1$)

Wenn jetzt $T \downarrow$, dann $\lambda_T \uparrow$ und somit $g_{3/2}(z) \uparrow$, also $z \uparrow$ und $\mu \uparrow$ bis $z=1$ und $\mu=0$

Hohe Temperaturen/kleine Dichten $n \lambda_T^3 \ll 1$: Virialentwicklung in $z = e^{\beta\mu} \ll 1$

$$\Omega = -k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z) \rightarrow \Omega \approx -k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} \left(z + \frac{z^2}{2^{5/2}} + \dots\right) \xrightarrow{P = -\frac{\partial \Omega}{\partial V}} P = n k_B T \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} n \lambda_T^3 + \dots\right) \quad \text{Virialentwicklung}$$

$$N \approx \frac{V}{\lambda_T^3} \left(z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \dots\right) \rightarrow z \approx n \lambda_T^3 \left(1 - \frac{1}{2^{3/2}} n \lambda_T^3 + \dots\right) \quad \text{Druckreduktion / effektive Anziehung durch Bose-Statistik}$$



Bose-Einstein-Kondensation (= Makroskopische Besetzung des GZ)

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(z) \quad \text{mit } N_0 = \frac{z}{1-z} \quad \lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T}}, \quad \nu(\epsilon) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi}\hbar^3} \sqrt{\epsilon}$$

Betrachte jetzt tiefe Temperaturen/große Dichten $n \lambda_T^3 \gg 1$: Die gme Wellenlänge λ_T ist größer als der mittlere Teilchenabstand $a = \sqrt[3]{V/N}$

Kritischer Punkt (Beginn der Kondensation / makroskopischen Besetzung des GZes): $n \lambda_c^3 = g_{3/2}(1) = \zeta(3/2)$

$$\rightarrow \text{Max. Dichte bzw. minimale Temperatur, bevor BEK vorliegt: } n_c(T) = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_T^3} \sim T^{-3/2} \leftrightarrow T_c(n) = \frac{2\pi\hbar^2}{m k_B} \left(\frac{n}{\zeta(3/2)}\right)^{2/3}$$

Da das Integral für die Teilchenzahl in 3D konvergiert (s unten) und somit einen Maximalwert N_c hat, kann nur eine begrenzte Anzahl an Teilchen außerhalb des GZes liegen. Wenn jetzt $n > n_c$ bzw. $T < T_c$ gilt, müssen die Teilchen somit in den GZ übergehen → Makroskopische Besetzung

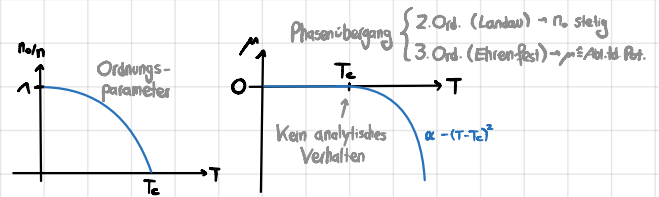
Bemerkung: Der Beitrag N_0 muss separat berücksichtigt werden, weil er beim Übergang von Summe zu Integral verloren gehen würde.

Im GZ ist $\epsilon=0 \rightarrow p=0 \rightarrow \langle n_p \rangle p^2 dp \approx dp \rightarrow 0$, da für $\mu=0$ $\langle n_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta\epsilon}-1} \approx \frac{1}{\beta\epsilon} \sim \frac{1}{p^2}$

Phänomene, die auf die Endlichkeit des Systems basieren, werden nicht berücksichtigt. $\rightarrow$ td. Limes $N \rightarrow \infty$ bzw. $V \rightarrow \infty$

Betrachte also die jeweiligen Größen im td. Limes $N \rightarrow \infty$ und $V \rightarrow \infty$:

			GZ	Außerhalb
$n < n_c; T > T_c$	$z < 1$	$\mu < 0$	$n_0 = \frac{N}{V} = 0$	$n = \frac{1}{\lambda_1^3} g_{3/2}(z)$
$n = n_c; T = T_c$	$z = 1$	$\mu = 0$	$n_0 = \frac{N}{V} = 0$	$n_c = \zeta(3/2) / \lambda_1^3$
$n > n_c; T < T_c$	$z = 1$	$\mu = 0$	$n_0 = n - n_c(T)$	$n_c = \zeta(3/2) / \lambda_1^3$



Wahren der Kondensation: $n = n_0 + n_c$

$$\rightarrow \frac{n_0}{n}(T) = 1 - \frac{n_c(T)}{n} = 1 - \frac{n_c(T)}{n_c(T_c)} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

Kriterium über die Beschränktheit der Teilchenzahl

$$N = - \left(\frac{\partial Z}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \sum_{\mathbf{k}} n_0(\epsilon_{\mathbf{k}}, \mu) = N_0 + \int d\epsilon v(\epsilon) n_0(\epsilon, \mu) = N_0 + \int d\epsilon \frac{v(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}$$

Bedingung: Konvergenz für $\mu=0 \rightarrow n_c(T) = (2\pi\hbar)^{-3} \int d\epsilon \frac{v(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1}$
 Dann ist auch Konvergenz für $\mu < 0$

Bestimmung von $\mu(T)$ für $T > T_c$:

$$n = \frac{1}{\lambda_1^3} g_{3/2}(z), \quad \frac{\partial n}{\partial T} = 0 \rightarrow (\dots) \rightarrow \frac{\partial z}{\partial T} = \frac{\partial z}{\partial T} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(z)}$$

$$\frac{\partial z}{\partial T} = \frac{\partial z}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{z}{\mu T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{3}{2} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \xrightarrow{T=T_c} \frac{\zeta(3/2)}{\zeta(3/2)} = 0$$

$$\frac{\partial^2 n}{\partial T^2} = \frac{3}{2} \frac{\partial z}{\partial T} \frac{\partial z}{\partial T} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \rightarrow \frac{\partial^2 n}{\partial T^2} \Big|_{T=T_c} < 0 \rightarrow \mu \sim - (T - T_c)^2$$

- Betrachte explizit die Dispersion $\epsilon \sim p^2$ in d-Dimensionen:

$$v(\epsilon) = \int d^d p \delta(\epsilon - \epsilon_p) \sim \int d^d p \delta(\epsilon - \epsilon_p) \sim \frac{1}{d\epsilon} \int d^d p \Theta(\epsilon - \epsilon_p) \sim \frac{1}{d\epsilon} \int_0^{\sqrt{\epsilon}} p^{d-1} dp \sim \frac{1}{d} \frac{d}{d\epsilon} \epsilon^{d/2} \sim \epsilon^{d/2-1}$$

$$n_c = \int d\epsilon \frac{v(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1} \sim \int d\epsilon \frac{\epsilon^{d/2-1}}{e^{\beta\epsilon} - 1} \frac{1}{1 - e^{-\beta\epsilon}} \sim \int d\epsilon \epsilon^{d/2-1} \left(\sum_{l=1}^{\infty} e^{-l\beta\epsilon} \right) \sim \int d\epsilon \epsilon^{d/2-1} \left(\sum_{l=1}^{\infty} e^{-l\beta\epsilon} \right) \sim \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{-l\beta\epsilon}}{l^{d/2}} \leq \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{d/2}} = \zeta\left(\frac{d}{2}\right) \rightarrow \text{BEK für } d \geq 3$$

- Allgemein: $\epsilon \sim p^n$ in d-Dimensionen $\rightarrow v(\epsilon) \sim \epsilon^{\frac{d-n}{n}} \rightarrow n_c = \int d\epsilon \frac{v(\epsilon)}{e^{\beta\epsilon} - 1} \sim \zeta\left(\frac{d-n}{n}\right) \rightarrow \text{BEK für } d > n$

- $v(\epsilon)$ für $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ in d=3: $v(\epsilon) = \int d^3 p \delta(\epsilon - \epsilon_p) = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d}{d\epsilon} \int_0^{\sqrt{2m\epsilon}} p^2 dp = \frac{d}{d\epsilon} \frac{(2m\epsilon)^{3/2}}{6\pi^2 \hbar^3} = \frac{m^{3/2} \epsilon^{1/2}}{\sqrt{2} \pi^2 \hbar^3}$