

Zustand eines Systems charakterisiert durch **Ket**-Vektoren: $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ einem problemsprechenden Hilbertraum. [Über dem Körper \mathbb{C}]

Duale Vektoren sind **Bra**-Vektoren: $\langle\Phi|$, sie bilden von \mathcal{H} in den zugrundeliegenden Körper ab $\langle\Phi| : |\Psi\rangle \rightarrow \langle\Phi|\Psi\rangle \in \mathbb{C}$.

Postulat der QM: $|\Psi\rangle$ physikalisch $\Rightarrow \langle\Psi|\Psi\rangle > 0$ [somit $\in \mathbb{R}$]. $[\Rightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}}|\Psi\rangle$ normiert auf $\langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle = 1$.]

Lineare Abbildung auf \mathcal{H} : $\hat{A} : |\Psi\rangle \rightarrow \hat{A}|\Psi\rangle \equiv |A\Psi\rangle$. Dies induziert $\hat{A}^\dagger : \langle\Phi| \rightarrow \langle\Phi|\hat{A}^\dagger \equiv \langle A^\dagger\Phi|$.

Postulat der QM: physikalische Observablen beschrieben durch **selbstadjungierte** [i.d.R. hermitesche] Operatoren $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle \Rightarrow a'$ **Eigenwert** [EW] zum **Eigenvektor** [EV] $|a'\rangle$.

\hat{A} selbstadjungiert $\Rightarrow a' \in \mathbb{R}$ und EV verschiedener EW a', a'' sind orthogonal [$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a',a''}$].

Projektor $\hat{P}_{a'} = |a'\rangle\langle a'|$. Mit $\langle a'|a''\rangle = \delta_{a',a''}$ gilt $\sum_{a'} \hat{P}_{a'} = \mathbb{1}$, $\hat{P}_{a'}^2 = \hat{P}_{a'}$, $\hat{P}_{a'}\hat{P}_{a''} = \delta_{a',a''}\hat{P}_{a'}$.

Schrödingergleichung [SG]: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi, t\rangle = \hat{H} |\Psi, t\rangle$.

EW der SG sind E_n , entsprechende EV $|\Psi_n, t\rangle$ [„stationäre Zustände“].

Daraus ergibt sich die Zeitentwicklung für $|\Psi, t\rangle$ zu $|\Psi, t\rangle = \hat{U}(t-t_0)|\Psi, t_0\rangle$ mit dem **Zeitentwicklungsoperator** $\hat{U}(t, t_0)$ [unitär $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, $\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1}$, $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)$], erfüllt die SG $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U} = \hat{H}\hat{U}$.

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = 0 \Rightarrow \hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} [t - t_0]}\right]$$

Eine **Messung** wird durch einen Operator \hat{A} beschrieben. Die **orthonormierte Basis** zu \hat{A} sei $\{|a'\rangle\}_{a'}$, dann lässt sich $|\Psi\rangle = \sum_{a'} \underbrace{\langle a'|\Psi\rangle}_{c_{a'}} |a'\rangle$ ausdrücken.

Postulat der QM: Die **Wahrscheinlichkeit** $|\Psi\rangle$ im Zustand $|a'\rangle$ zu messen [$\hat{A}|\Psi\rangle = a'|\Psi\rangle$] ist $|c_{a'}|^2 = |\langle a'|\Psi\rangle|^2$. [$|a'\rangle, |\Psi\rangle$ auf 1 normiert.]

Näherungen: Die Lösungen müssen im Nachhinein überprüft werden!

Sollten **konsistent** untereinander und **systematisch** zu verbessern sein.

Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie:

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, wobei $\hat{H}_0|n, \alpha\rangle = \varepsilon_n|n, \alpha\rangle$, $n \in \mathbb{N}$, $\alpha = 1, \dots, N_n$ mit N_n dem Grad der Entartung von ε_n .

Sei \hat{V} also eine kleine Störung, $N_n = 1$, so erhält man mit dem Ansatz: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$, $|\Psi_n\rangle = \sum_k \lambda^k |\Psi_n^{(k)}\rangle$,

$E_n = \sum_k \lambda^k E_n^{(k)}$ [$\Rightarrow |n\rangle = |\Psi_n^{(0)}\rangle$, $\varepsilon_n = E_n^{(0)}$] und den Normierungen $\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_n^{(0)}\rangle = 1$, $\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_n\rangle = 1$ [\Rightarrow

$\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_n^{(k)}\rangle = \delta_{k0}$, $\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_m^{(0)}\rangle = \delta_{mn}$] aus $\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$ [stationäre SG] Folgendes:

$$\hat{H}_0|\Psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\Psi_n^{(0)}\rangle, \quad \hat{H}_0|\Psi_n^{(k)}\rangle + \hat{V}|\Psi_n^{(k-1)}\rangle = \sum_{p+q=k} E_n^{(p)}|\Psi_n^{(q)}\rangle.$$

Über Multiplikation mit $\langle\Psi_n^{(0)}| = \langle n|$ erhält man: [Mit $V_{nm} = \langle n|\hat{V}|m\rangle$: $E_n^{(1)} = V_{nn}$.]

$$E_n^{(k)} = \langle n|\hat{V}|\Psi_n^{(k-1)}\rangle, \quad k \geq 1.$$

Über Multiplikation mit $\langle\Psi_m^{(0)}| = \langle m|$, $m \neq n$ erhält man: [$|\Psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} |m\rangle$, $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}V_{nm}}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$.]

$$\langle m|\Psi_n^{(k)}\rangle = \frac{1}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \left[\langle m|\hat{V}|\Psi_n^{(k-1)}\rangle - E_n^{(1)}\langle m|\Psi_n^{(k-1)}\rangle - \dots - E_n^{(k-1)}\langle m|\Psi_n^{(1)}\rangle \right], \quad k \geq 1.$$

Wobei

$$|\Psi_n^{(k)}\rangle = \sum_{m \neq n} \langle m|\Psi_n^{(k)}\rangle |m\rangle, \quad k \geq 1.$$

Entartete Störungstheorie:

Nun $N_n \geq 1$, $E_{n\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_{n\alpha}^{(k)}$, $|\Psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_n} c_{n\alpha} |\Psi_{n\alpha}\rangle$, $|\Psi_{n\alpha}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\Psi_{n\alpha}^{(k)}\rangle$, $\hat{P}_{0n} = \sum_{\alpha=1}^{N_n} |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha|$
 $[[\hat{P}_{0n}, \hat{H}] = 0]$, $\hat{Q}_{0n} = \mathbb{1} - \hat{P}_{0n}$ [$\Rightarrow [\hat{Q}_{0n}, \hat{H}] = 0, \hat{Q}_{0n} \hat{P}_{0n} = 0$] und Basis $\{|n, \alpha\rangle\}$ so, dass $\langle n, \alpha | \hat{V} | n, \alpha' \rangle = V_{n\alpha n\alpha} \delta_{\alpha\alpha'}$.

Analog oben erhält man aus der stationären SG

$$\hat{H}_0 |\Psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle = E_{n\alpha}^{(0)} |\Psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle, \quad \hat{H}_0 |\Psi_{n\alpha}^{(k)}\rangle + \hat{V} |\Psi_{n\alpha}^{(k-1)}\rangle = \sum_{p+q=k} E_{n\alpha}^{(p)} |\Psi_{n\alpha}^{(q)}\rangle .$$

Offensichtlich ist:

$$|\Psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle = |n, \alpha\rangle, \quad E_{n\alpha}^{(0)} = \varepsilon_n .$$

Aufgrund der Wahl der Basis folgt [aus \hat{P}_{0n} SG $\propto \lambda^1$]:

$$E_{n\alpha}^{(1)} = \langle n, \alpha | \hat{V} | n, \alpha \rangle .$$

Mit der Forderung, dass $|\Psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle$ orthogonal auf $\hat{P}_{0n} \mathcal{H}$ steht, erhält man [aus \hat{Q}_{0n} SG $\propto \lambda^1$]:

$$|\Psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle = \hat{Q}_{0n} \frac{1}{\varepsilon_n - \hat{H}_0} \hat{Q}_{0n} \hat{V} |n, \alpha\rangle, \quad E_{n\alpha}^{(2)} = \langle n, \alpha | \hat{V} |\Psi_{n\alpha}^{(1)}\rangle .$$

Feynman-Hellmann Theorem
 $[H(\lambda) |\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\Psi(\lambda)\rangle, \langle \Psi(\lambda) | \Psi(\lambda)\rangle = 1]$:
 $\frac{d}{d\lambda} E(\lambda) = \langle \Psi(\lambda) | \frac{dH(\lambda)}{d\lambda} | \Psi(\lambda)\rangle .$

Vielteilchen-Quantensysteme:

Für N gekoppelte 1-Teilchen-Systeme [Hilbertraum \mathcal{H}_i , Zustände $|\Psi_i\rangle$, orthonormierte Basis $\{|\xi_i\rangle\}$, Operatoren \hat{A}_i]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N, \quad |\Psi\rangle = |\Psi_1 \dots \Psi_N\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\Psi_N\rangle, \quad \{|\xi_1 \dots \xi_N\rangle\} = \{|\xi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\xi_N\rangle\},$$

$$\hat{A} = \hat{A}_1 \otimes \dots \otimes \hat{A}_N, \quad [|\Phi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathcal{H}: \langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi_1 | \Psi_1 \rangle \dots \langle \Phi_N | \Psi_N \rangle, \quad |\Psi\rangle = \sum_{\xi_1 \dots \xi_N} \underbrace{\langle \xi_1 \dots \xi_N | \Psi \rangle}_{\Psi(\xi_1 \dots \xi_N)} |\xi_1 \dots \xi_N\rangle]$$

Für identische [ununterscheidbare] Teilchen muss die Physik [Wahrscheinlichkeit, Erwartungswerte] unabhängig unter beliebiger Vertauschung [Permutation Π , Operator $\hat{P}_\Pi, \hat{P}_\Pi^\dagger = \hat{P}_\Pi^{-1}$] dieser sein; entsprechende Observablen \hat{A} müssen symmetrisch sein $[[\hat{A}, \hat{P}_\Pi] = 0]$.

Unter Vertauschen 2er identischer Teilchen sind die Zustände entweder symmetrisch [Bosonen: $\hat{P}_\Pi |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$; Spin ganzzahlig] oder antisymmetrisch [Fermionen: $\hat{P}_\Pi |\Psi\rangle = \text{sign}(\Pi) |\Psi\rangle$; Spin halbzahlig].

Für nicht-wechselwirkende, identische Teilchen [\Rightarrow auch \mathcal{H}_i und \hat{H}_i identisch; stationäre, orthonormiert Eigenzustände $|n_i\rangle$]:

$$\hat{H}_i |n_i\rangle = E_i |n_i\rangle \text{ ist dann } \begin{aligned} |\Psi\rangle_s &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\Pi} \hat{P}_\Pi |n_1 \dots n_N\rangle, & \text{Bosonen} \\ |\Psi\rangle_a &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\Pi} \text{sign}(\Pi) \hat{P}_\Pi |n_1 \dots n_N\rangle, & \text{Fermionen} \end{aligned} \quad \text{[Austauschentartung!]}$$

Hartree-Fock-Näherung: [für Fermionen]

Annahme: Vielteilchen-Funktion kann durch Produkt von 1-Teilchen-Wellenfunktion approximiert werden [Fermionen: $\Psi_{HF} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\Pi} \text{sign}(\Pi) \prod_k \Psi_{\Pi(k)}(\vec{x}_k, m_k)$].

Slater-Determinante:
 [Fermionen!, Basen $\{|n_i\rangle\}$ und $\{|\xi_i\rangle\}$]
 $\Psi_{n_1, \dots, n_N}(\xi_1, \dots, \xi_N)$
 $= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\Pi} \text{sign}(\Pi) \langle \xi_1 | n_{\Pi(1)} \rangle \dots \langle \xi_N | n_{\Pi(N)} \rangle$
 $= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \langle n_1 | \xi_1 \rangle & \dots & \langle n_1 | \xi_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle n_N | \xi_1 \rangle & \dots & \langle n_N | \xi_N \rangle \end{pmatrix} .$

Methode: Man minimiere das Energiefunktional $E(\Psi) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ und ist somit der Grundzustandsenergie am nächsten; auch $|\Psi\rangle$ ist dann hoffentlich dem Grundzustand am nächsten.

Für ein Vielelektronen-Atom $\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{|\vec{x}_i|} + e^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{i-1} \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$ ergibt sich

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1; j \neq i}^N \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \equiv \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$

$$E(\Psi) = \sum_{i=1}^N \sum_{m_i=\pm\frac{1}{2}} \int d^3x_i \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} |\nabla \Psi_i(\vec{x}_i, m_i)|^2 - Ze^2 \frac{|\Psi_i(\vec{x}_i, m_i)|^2}{|\vec{x}_i|} \right] \\ + \frac{e^2}{2N[N-1]} \sum_{i \neq j} \sum_{m, m'=\pm\frac{1}{2}} \int d^3x \int d^3y \left[|\Psi_i(\vec{x}, m)|^2 |\Psi_j(\vec{y}, m')|^2 \frac{1}{|\vec{x}-\vec{y}|} \overbrace{-\Psi_i^\dagger(\vec{x}, m) \Psi_i(\vec{y}, m') \Psi_j^\dagger(\vec{y}, m') \Psi_j(\vec{x}, m) \frac{1}{|\vec{x}-\vec{y}|}}^{\text{nicht-klassischer Vielteilchen-Effekt}} \right].$$

Mit Berücksichtigung von $\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle = 1$ über den lagrangeschen Multiplikator ε ergibt sich mittels Variation von $\delta[E(\Psi) - \varepsilon[\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle - 1]] = 0$ die Hartree-Fock-Gleichung für $i = 1, \dots, N$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{|\vec{x}|} + e^2 \sum_{j=1}^{i-1} \sum_{m'=\pm\frac{1}{2}} \int d^3y \frac{|\Psi_j(\vec{y}, m')|^2}{|\vec{x}-\vec{y}|} - \varepsilon_i \right] \Psi_i(\vec{x}, m) = e^2 \sum_{j=1}^{i-1} \sum_{m'=\pm\frac{1}{2}} \int d^3y \frac{\Psi_i(\vec{y}, m') \Psi_j^\dagger(\vec{y}, m')}{|\vec{x}-\vec{y}|} \Psi_j(\vec{x}, m).$$

Nun iterativ hieraus alle Ψ_i bestimmen [höchstgradig nichttrivial!].

Addition von Drehimpulsen:

[\hat{J} physikalischer Operator \Rightarrow hermitesch]

Alle Drehimpulse \hat{J} erfüllen die Drehimpulsalgebra $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i \hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$.

Sei \hat{J}_i aus dem Hilbertraum \mathcal{H}_i [$\dim(\mathcal{H}_i) = 2j_i + 1$] und die Basen $|j_i m_i\rangle$ seien bezüglich \hat{J}_i^2 [$\hat{J}_i^2 |j_i m_i\rangle = \hbar^2 j_i(j_i + 1) |j_i m_i\rangle$] und \hat{J}_{iz} [$\hat{J}_{iz} |j_i m_i\rangle = \hbar m_i |j_i m_i\rangle$] diagonalisiert [$j_i \in \frac{\mathbb{N}_0}{2}$, $m_i \in \{-j_i, -j_i + 1, \dots, j_i\}$]. Die Leiteroperatoren sind $\hat{J}_{i\pm} = \hat{J}_{ix} \pm i \hat{J}_{iy}$ [$\hat{J}_{i\pm} |j_i m_i\rangle = c_{j_i m_i}^\pm |j_i [m_i \pm 1]\rangle$]. $[c_{jm}^\pm = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}]$

Dann ist $\hat{J} = \hat{J}_1 \oplus \hat{J}_2$ auf $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ [$\dim(\mathcal{H}_{12}) = [2j_1 + 1][2j_2 + 1]$] ebenfalls ein Drehimpuls. Dieser kann in der Basis $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ bezüglich $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_z$ oder auch in der Basis $|j_1 j_2 j m\rangle$ bezüglich \hat{J}^2, \hat{J}_z wirken. [Wobei $|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$.]

Aus $m \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2 j m | \hat{J}_z |j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle = [m_1 + m_2] \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle$ folgt

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle.$$

Man sieht, dass $|j_1 \overbrace{j_1}^m j_2 \overbrace{j_2}^m\rangle = |j_1 j_2 \overbrace{j_1 + j_2}^j j_1 + j_2\rangle$ eindeutig ist und kann über den Absteigeoperator \hat{J}_- alle anderen $|j_1 j_2 \overbrace{j_1 + j_2}^j m\rangle$, $m \in \{-[j_1 + j_2], -[j_1 + j_2] + 1, \dots, j_1 + j_2\}$ bestimmen [„Multipllett zu $j = j_1 + j_2$ “].

Für $m = j_1 + j_2 - 1$ gab es in der alten Basis $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ jedoch 2 Zustände; mittels $\hat{J}_z |j_1 j_2 \overbrace{j_1 + j_2 - 1}^j \overbrace{j_1 + j_2 - 1}^m\rangle = [j_1 + j_2 - 1] |j_1 j_2 \overbrace{j_1 + j_2 - 1}^j \overbrace{j_1 + j_2 - 1}^m\rangle$ und $\hat{J}_+ |j_1 j_2 \overbrace{j_1 + j_2 - 1}^j \overbrace{j_1 + j_2 - 1}^m\rangle = 0$ lässt sich dieser zweite Zustand bestimmen. Über \hat{J}_- erhält man dann das Multipllett zu $j = j_1 + j_2 - 1$.

Jeweils für das nächst kleinere m gab es einen Zustand in der alten Basis mehr, so dass sich iterativ mittels dieses Verfahrens bis $j = |j_1 - j_2|$ eine Basis der Dimension $[2j_1 + 1][2j_2 + 1]$ aufspannen lässt:

$$\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{j_1+j_2} \oplus \mathcal{H}_{j_1+j_2-1} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{|j_1-j_2|}.$$

[Man schreibt $\underbrace{3}_{j_1=1} \otimes \underbrace{3}_{j_2=1} = \underbrace{5}_{j=2} \oplus \underbrace{3}_{j=1} \oplus \underbrace{1}_{j=0}$.]

Clebsch-Gordan-Koeffizienten:

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \quad |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=m_1+m_2} \underbrace{\langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle}_{=[\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle]^\dagger} |j_1 j_2 j m\rangle$$

Die CG-Koeffizienten können reell gewählt werden [$\Rightarrow \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle^T$].

Mittels der Leiteroperatoren folgen Rekursionsformeln für die CG-Koeffizienten: $[\hat{J}^\pm = \hat{J}_1^\pm \oplus \hat{J}_2^\pm, \hat{J}^\pm = \hat{J}^\mp]$

$$c_{j_1 m_1}^\mp \langle j_1 m_1 \mp 1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle + c_{j_2 m_2}^\mp \langle j_1 m_1 j_2 m_2 \mp 1 | j_1 j_2 j m \rangle = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | \hat{J}_\pm | j_1 j_2 j m \rangle = c_{j m}^\pm \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \pm 1 \rangle.$$

Als Anfangsbedingung nutzt man $\langle j_1 \overbrace{j_1}^m j_2 \overbrace{j_2}^m | j_1 j_2 \overbrace{j_1 + j_2}^j \overbrace{j_1 + j_2}^m \rangle = 1$.

Tensor-Operatoren:

$$[\hbar = 1]$$

Ein skalärer Operator \hat{S} ist invariant gegen Drehungen [U Drehgruppe $\in SO(3)$ oder $SU(2)$, $\hat{\Gamma}(U)$ die Darstellung im Zustandsraum]:

$$\hat{\Gamma}(U)\hat{S}\hat{\Gamma}(U^{-1}) = \hat{S} \quad .$$

Für skalare Operatoren gilt: $[\hat{S}, \hat{J}] = 0$ und außerdem $\langle jm | \hat{S} | j'm' \rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \langle jm | \hat{S} | jm \rangle : \forall m$.
 [man schreibt $\langle j || \hat{S} || j \rangle$]

Höherdimensionale Tensoroperatoren \hat{T} transformieren unter Drehung wie folgt [wobei die Zustände $|jm\rangle$ so drehen: $\hat{\Gamma}(U)|jm\rangle = \sum_{m'} {}^{(U)}D_{mm'}^j |jm'\rangle$, mit ${}^{(U)}D_{mm'}^j = \langle jm' | \hat{\Gamma}(U) | jm \rangle$]:

$$\hat{\Gamma}(U)\hat{T}_M^J\hat{\Gamma}(U^{-1}) = \sum_{M'} {}^{(U)}D_{MM'}^J T_{M'}^J \quad . \quad [\hat{T}_M^J \text{ sind dann die Normalkomponenten}]$$

Es folgt $\Gamma(U)T_M^J|jm\rangle = \sum_{M',m'} {}^{(U)}D_{MM'}^J {}^{(U)}D_{m'm}^j T_{M'}^J |jm'\rangle$, $[\hat{J}_z, T_M^J] = MT_M^J$, $[\hat{J}_\pm, T_M^J] = c_{\pm}^J T_{M\pm 1}^J$.

Damit sieht man, dass $T_M^J|jm\rangle$ ein Eigenvektor von \hat{J}_z ist; also $\langle jm' | T_M^J | jm \rangle \propto \delta_{m'm+M}$.
 $[T_M^J | jm \rangle$ ist aber nicht zwingend ein Eigenvektor zu \hat{J}^2 !]

Aus einer Rekursionsbeziehung analog den Clebsch-Gordan-Koeffizienten folgt das

Wigner-Eckart-Theorem:
$$\langle jm | T_M^J | j'm' \rangle = \langle jm | JM j'm' \rangle \langle j || T^J || j' \rangle \quad .$$

$$\Rightarrow \langle jm | T_M^J | j'm' \rangle = 0 \quad \text{falls } j \notin \{J + j', \dots, |J - j'|\} .$$

Da die Normalkomponenten linear mit den kartesischen zusammenhängen, gilt für Vektoroperatoren

$$\langle jm | \hat{V} | jm' \rangle = \langle jm | \hat{J} | jm' \rangle \frac{\langle j || [\hat{V}, \hat{J}] || j \rangle}{j[j+1]} \quad .$$

Für ein Atom im schwachen Magnetfeld [Gesamtbahndrehimpuls \hat{L} , Gesamtspin \hat{S} , Gesamtdrehimpuls $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$] mit Basis der Zustände $|E_0LSJM\rangle$ bezüglich $\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ folgt in einem Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ mit der Lamor-Frequenz $\omega_L = \frac{-qB}{2m} = \frac{\mu_B}{\hbar} B$ und dem Stör-Hamiltonian $\hat{H}_1 = \omega_L[\hat{L}_z + 2\hat{S}_z]$:

$$\Delta E = \langle \hat{H}_1 \rangle = \hbar\omega_L g_L M \quad , \quad g_L = \frac{3}{2} + \frac{S[S+1] - L[L+1]}{2J[J+1]} \quad \text{- Landé-Faktor.}$$

Für ein Elektron im wasserstoffähnlichen Atom [Kernladungszahl Z] ergibt sich unter Berücksichtigung relativistischer Effekte in 1. Näherung [$\hat{H}_{rel.} \approx -\frac{1}{8} \frac{\hat{p}^4}{m^3 c^2}$] und der Spin-Bahn-Kopplung [$\hat{H}_{SB} = -\frac{1}{2} \frac{e}{m_e^2 c^2} [\hat{S}\hat{L}]_r \frac{1}{r} \frac{d\varphi(r)}{dr}$, $\varphi(r) = \frac{Ze}{r}$] die
 Thomas-Faktor

Feinstrukturaufspaltung:

$$\Delta E_{FS} = E_n \frac{[Z\alpha]^2}{n} \left[\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right] \quad , \quad E_n = -\frac{m_e c^2 [Z\alpha]^2}{2 n^2} \quad , \quad \alpha = \frac{e^2}{c} \quad , \quad \hbar = 1 \quad , \quad e^2 = \frac{[e^-]^2}{4\pi\epsilon_0} \quad .$$

Berücksichtigt man außerdem die Kopplung des Elektronenspins [$\vec{\mu}_e = \frac{e}{2m_e c} g_e \vec{s}$, $g_e \approx 2$] an das Magnetfeld des Kernspins [$\vec{\mu}_p = \frac{Ze}{2m_p c} g_p \vec{I}$, $g_p \approx 5,585$, $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \frac{1}{4\pi} \frac{\vec{\mu} \times \vec{r}}{r^3}$], so erhält man die Hyperfeinstrukturaufspaltung für s-Orbitale [H-Atom-ähnlich!] zu [Gesamtspin $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$]:

$$\langle n00 | \hat{H}_{HF} | n00 \rangle = \frac{4}{3} \frac{e^2}{a_0} \frac{g_p}{g_e} \frac{m_e}{m_p} \frac{\alpha^2}{n^3} Z^4 [F[F+1] - S[S+1] - I[I+1]] \quad .$$

$$\delta(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \Delta \frac{1}{|\vec{r}|}$$

Explizit zeitabhängige Störungen:

Im Heisenberg-Bild gilt $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ explizit zeitabhängig, $|\Psi, t\rangle$ explizit zeitabhängig, \hat{A} nicht explizit zeitabhängig. Ist $\hat{V}(t) \equiv 0$, so [Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$]: $|\Psi, t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi, t_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 [t - t_0]} |\Psi, t_0\rangle$.

Im Wechselwirkungs-Bild wählt man $|\Psi_I, t\rangle = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0[t-t_0]}|\Psi, t\rangle$, $\hat{V}_I(t) = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0[t-t_0]}\hat{V}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0[t-t_0]}$ und muss dann die Schrödinger-Gleichung $i\hbar\partial_t|\Psi_I, t\rangle = \hat{V}_I(t)|\Psi_I, t\rangle$ erfüllen.

Für den Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild ergibt sich dann formal

$$\hat{U}_I(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \hat{U}_I(t_1, t_0) \quad .$$

Iterativ ergibt sich mit $\hat{U}_I^{(0)}(t, t_0) = \mathbb{1}$ und $\hat{U}_I^{(n)}(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \hat{U}_I^{(n-1)}(t_1, t_0)$:

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t, t_0) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{U}_I^{(n)}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{i\hbar} \right]^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \dots \hat{V}_I(t_n) \\ &= \hat{T} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}_I(t')} \right] \quad - \quad \text{die Dyson-Reihe} \quad [\text{rein formale Darstellungsweise}]. \end{aligned}$$

Mit dem Zeitordnungsoperator: $\hat{T}[\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)] = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2) & , t_1 > t_2 \\ \hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1) & , t_1 < t_2 \end{cases}$; er ist linear.

$\hat{S} = \lim_{t \rightarrow \infty, t_0 \rightarrow -\infty} \hat{U}_I(t, t_0)$ heißt Streumatrix [sofern $\exists \hat{S}$ und $\hat{S}^\dagger = \hat{S}^{-1}$], $|\Psi_{in}\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} |\Psi, t\rangle$, $|\Psi_{out}\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} |\Psi, t\rangle$ sind die asymptotischen Zustände [$|\Psi_{out}\rangle = \hat{S}|\Psi_{in}\rangle$].

In einer orthonormierten Eigenbasis zu \hat{H}_0 $\{|n\rangle\}$ ist die Übergangswahrscheinlichkeit von $|n\rangle$ zu $|m\rangle$ dann in erster Ordnung $[\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle, \omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}[E_m - E_n], V_{mn} = \langle m|\hat{V}|n\rangle]$

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{i\omega_{mn}[t_1 - t_0]} \hat{V}_{mn}(t_1) \right|^2 \quad .$$

Für $\hat{V}(t) = \theta(t)\hat{V}$ ist $[t_0 < 0, t > 0]$ $\hat{P}_{n \rightarrow m}(t) = \frac{4}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\frac{1}{2}\omega_{mn}t)}{\omega_{mn}^2} |V_{mn}|^2$. Wiederkehrzeit $\tau = \frac{2\pi}{\omega_{mn}}$.

Es gilt $\lim_{t \rightarrow \infty} \hat{P}_{n \rightarrow m}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\hat{V}_{mn}|^2 \delta(\omega_{mn})t$ [\rightarrow divergiert \neq], somit für die Übergangsrate

Fermis goldene Regel: $\hat{\Gamma}_{n \rightarrow m}(t) = \frac{d}{dt} \hat{P}_{n \rightarrow m}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{V}_{mn}|^2 \delta(E_{mn})$.

Auch für adiabatische Störungen $\hat{V}' = e^{\eta t} \hat{V}$ [langsam ansteigend] gilt für $\lim_{\eta \rightarrow 0}$ und $\lim_{t_0 \rightarrow -\infty}$ $\hat{\Gamma}_{n \rightarrow m}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{V}_{mn}|^2 \delta(E_{mn})$.

Für eine periodische, adiabatische Störung $\hat{V}' = e^{\eta t} [e^{-i\omega t} \hat{V} + e^{i\omega t} \hat{V}^\dagger]$ ist die zeitlich gemittelte Übergangsrate $[\lim_{\eta \rightarrow 0}, \lim_{t_0 \rightarrow -\infty}]$ $\hat{\Gamma}_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar^2} [|\hat{V}_{mn}|^2 \delta(\omega_{mn} - \omega) + |\hat{V}_{nm}|^2 \delta(\omega_{mn} + \omega)]$.

Streutheorie:

Elastischer Streuprozess [\Leftrightarrow Energieerhaltung] an nicht explizit zeitabhängigem Potential $\hat{V}(\vec{x})$ eines freien Teilchens $|\Phi\rangle$: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ [$\hat{H}_0|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle, \hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$]. Green'sche Funktion \hat{G}_0 : $\hat{G}_0[E - \hat{H}_0]|\Phi\rangle = |\Phi\rangle$.

Es bestimmt sich dann $|\Psi^{(\pm)}\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{\underbrace{E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}_{\hat{G}'_0}} \hat{V}|\Psi^{(\pm)}\rangle$ - Lippmann-Schwinger-Gleichung.

Für ein freies Teilchen [einfallend] $\langle \vec{x} | \Phi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\vec{p}\vec{x}}$ erhält man mit dem Residuensatz $\hat{G}'_{\pm}(\vec{x}, \vec{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$.

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung schreibt sich dann $\langle \vec{x} | \Psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x} | \Phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} \langle \vec{x}' | \hat{V} | \Psi^{(\pm)} \rangle$.

Für ein lokales Potential [$\langle \vec{x}' | \hat{V} | \vec{x}'' \rangle = \hat{V}(\vec{x}')\delta(\vec{x}' - \vec{x}'')$] mit $V(\vec{x}') \gg 0$ nur für $|\vec{x}'| = r'$ nahe 0 und dem Detektor bei \vec{x} mit $|\vec{x}| = r \gg r'$ [$\alpha = \angle(\vec{x}, \vec{x}')$, $|\vec{x} - \vec{x}'| \approx r - r' \cos(\alpha)$, $\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \approx \frac{1}{r}$] folgt für einen elastischen Streuprozess eines einlaufenden freien Teilchens zu einer auslaufenden Kugelwelle:

$$\langle \vec{x} | \Psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \left[e^{i\vec{k}\vec{x}} + \frac{e^{i\vec{k}r}}{r} \underbrace{\left[-\frac{1}{4\pi} \right] \frac{2m}{\hbar^2} [2\pi]^3 \int d^3x' \frac{e^{-i\vec{k}'\vec{x}'}}{\sqrt{2\pi^3}} \hat{V}(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \Psi^{(+)} \rangle}_{f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} [2\pi]^3 \langle \vec{k}' | \hat{V} | \Psi^{(+)} \rangle} \right] .$$

$f(\vec{k}, \vec{k}')$ heißt Streuamplitude; sie entspricht der Wahrscheinlichkeitsamplitude eines in Richtung \vec{k} einfallenden Teilchens auf \hat{V} nach \vec{k}' gestreut zu werden.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist $\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{|\vec{j}_{\text{Detektor}}|}{|\vec{j}_{\text{Einfallend}}|} r^2 d\Omega = |f(\vec{k}, \vec{k}')|^2 d\Omega$. [$\vec{j} \hat{=} \text{Teilchenstrom}$]

Die Born'sche Näherung erster Ordnung ist nun: $|\Psi^{(+)} \rangle \approx |\vec{k} \rangle$; dann ist

$$f^{(1)}(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{i[\vec{k} - \vec{k}']\vec{x}'} \hat{V}(\vec{x}') \propto \text{FT}(\hat{V})(\vec{k} - \vec{k}') .$$

Mit $\theta = \angle(\vec{k}, \vec{k}')$ und dem Yukawa-Potential $\hat{V}(\vec{x}') = V_0 \frac{e^{-\mu r'}}{\mu r'}$ [$V_0 < 0, \frac{1}{\mu}$ Reichweite]: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu} \frac{1}{[2k \sin(\frac{\theta}{2})]^2 + \mu^2} \right]^2$.

Im $\lim_{\mu \rightarrow 0}$ mit $\frac{V_0}{\mu} = ZZ'e^2$ ergibt sich gerade der Rutherford'sche Streuquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left[\frac{ZZ'e^2}{E_{\text{kin}}} \right]^2 \frac{1}{\sin^4(\frac{\theta}{2})}$.

[$\lim_{\mu \rightarrow 0} \hat{V}_{\text{Yukawa}} = \hat{V}_{\text{Coulomb}}$; Rutherford jedoch klassisch hergeleitet!]

Für gebundene Zustände im Yukawa-Potential versagt die Born-Näherung [wahrscheinlich].

Aufgrund der Vollständigkeit von $\{|\vec{k}\rangle\}$ und mittels der Lippmann-Schwinger-Gleichung ergibt sich für den Übergangoperator $\hat{T}|k\rangle = \hat{V}|\Psi^{(+)}\rangle$ die Vorschrift

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{T} ,$$

welche sich iterativ lösen lässt [$\hat{T}^{i+1} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{T}^i$].

Es ergibt sich somit $f(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\vec{k}, \vec{k}')$, mit $f^{(n)}(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} [2\pi]^3 \langle \vec{k}' | \hat{V} \left[\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \right]^{n-1} |\vec{k} \rangle$.

Sphärische Wellen $|Elm\rangle$ können als alternative Basis verwendet werden [$\hat{H}_0|Elm\rangle = E|Elm\rangle, \hat{L}^2|Elm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|Elm\rangle, \hat{L}_z|Elm\rangle = \hbar m|Elm\rangle$] , wobei der Zusammenhang zu Freiraumlösungen $|\vec{k}\rangle$ wie folgt ist

$$\langle \vec{k} | Elm \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_{lm}(\vec{e}_k) , \vec{e}_k = \frac{\vec{k}}{k} .$$

[$\langle \vec{x} | Elm \rangle = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_l(kr) Y_{lm}(\vec{e}_r)$, sphärische Besselfunktion j_l]

Sei nun $\hat{V} = \hat{V}(r)$, o.B.d.A. nun $\vec{k} \parallel \vec{e}_z$ und Streuwinkel $\theta = \angle(\vec{k}, \vec{k}')$, dann ist Partialwellenamplitude
 $f(\vec{k}, \vec{k}') = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} [2l+1] f_l(k) P_l(\cos(\theta))$, mit $f_l(k) = -\frac{\pi}{k} \langle Elm | \hat{T} | Elm \rangle$.

Für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ sieht man $\langle \vec{x} | \Psi^+ \rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{[2l+1]}{2ik} P_l(\cos(\theta)) [S_l \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i[kr-l\pi]}}{r}]$, mit $S_l = 1 + 2i k f_l(k) = e^{2i\delta_l}$.

[$f_l = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin(\delta_l)$, Streuphase δ_l]

$$e^{i\vec{k}\vec{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} [2l+1] i^l j_l(kx) P_l(\vec{e}_k \vec{e}_x)$$

$$\sum_m Y_{lm}(\vec{e}_x) Y_{lm}^*(\vec{e}_{x'}) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\vec{e}_x \vec{e}_{x'})$$

$$\int_{-1}^1 du P_l(u) P_{l'}(u) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

Das optische Theorem besagt [hier \hat{V} beliebig]

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(\theta=0)) .$$

[sphärische Neumann-Funktionen n_l , sphärische Hankel-Funktionen $h_l^{(1)} = j_l + i n_l, h_l^{(2)} = j_l - i n_l$]

Für ein sphärisches $[\hat{V} = \hat{V}(r)]$, lokalisiertes $[\hat{V}(r) = 0 : r > R]$ Potential \hat{V} findet man mit der Schrödingergleichung

$$\Psi^{(+)}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l [2l+1] A_l(kr) P_l(\cos(\theta)) \quad , \quad \text{mit } A_l(kr) = \begin{cases} c_l^{(0)} j_l(kr) & , r < R \\ c_l^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)} h_l^{(2)}(kr) & , r \geq R \end{cases} .$$

Aus dem Vergleich dieses Ausdrucks mit der obigen Lösung für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ kann man $c_l^{(1)} = \frac{1}{2} e^{i\delta_l}$, $c_l^{(2)} = \frac{1}{2}$ bestimmen. Mit $\beta_l = r \frac{d}{dr} \ln(A_l) \Big|_{r=R}$, was aufgrund der Stetigkeit auch aus der Innenraumlösung $[r < R]$ bestimmt werden kann, ergibt sich:

$$\tan(\delta_l) = \frac{kR j_l'(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kR n_l'(kR) - \beta_l n_l(kR)} .$$

Für kleine Energien $[E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ klein] dominiert die s-Wellen-Streuung $[l = 0]$; für einen Potentialtopf der Höhe V_0 $[V_0 \in \mathbb{R}]$ ergibt sich dann [in 1. Näherung] $\sigma_{\text{tot}} = 4\pi a^2$, mit der Streulänge $a = -\frac{\delta_0}{k}$.

Treten im Potentialtopf V_0 gebundene Zustände auf, so wird die Streulänge beliebig groß [Feshbach-Resonanz].

Als erste Abschätzung für die Bindungsenergie ergibt sich [Potentialradius $R \ll a$] dann: $E_B = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$.

Klein-Gordon-Gleichung:

Koordinaten $x^\mu = (ct, x^1, x^2, x^3)$, Metrik $g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, Poincaré-Transformation $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu$ mit

$a^\mu = \text{const.} \in \mathbb{R}$ und $g_{\mu\nu} = g_{mn} \Lambda^\mu_m \Lambda^\nu_n$ [Lorentz-Transformation $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$].

Der Abstand $d(x, y) = g_{\mu\nu} [x - y]^\mu [x - y]^\nu$ ist invariant unter Poincaré-Transformationen.

Aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + [m_0 c^2]^2$ ergibt sich mit $\underline{p} = (\frac{E}{c}, \vec{p})$ und der Korrespondenzregel $p_\mu \rightarrow i \hbar \partial_\mu$ [$\kappa = \frac{m_0 c}{\hbar}$, $\square = \partial^\mu \partial_\mu$]:

$$\boxed{[\square + \kappa^2] \Phi(\underline{x}) = 0}$$

Für die kovariante Stromdichte $j^\mu = \frac{\hbar}{m_0} \text{Im}(\Phi \partial^\mu \Phi^*)$ gilt $\partial_\mu j^\mu = 0$.

Ist $\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} j(\underline{x}) = 0 : \forall t$, so ist $\rho = \frac{1}{c} j^0 = \frac{\hbar}{m_0 c^2} \text{Im}(\Phi \partial_t \Phi^*)$; es wird ρe^- als Ladungsdichte interpretiert [$\rho \in \mathbb{R}$].

Für ein ruhendes Teilchen gibt es 2 Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung

[positiver Energie $\Phi \propto e^{-i\kappa ct}$, negativer Energie $\Phi \propto e^{i\kappa ct}$].

$$\boxed{\text{Antikommutator: } \{A, B\} = AB + BA}$$

Dirac-Gleichung:

Um nur positive Energien zu erhalten, DGL linear in p^0 . Da Lorentz-Invarianz gefordert und Skalarprodukt dieses ist:

$$\boxed{[\gamma^\mu p_\mu - m_0 c] \Psi(\underline{x}) = 0}$$

Aus Lorentz-Invarianz folgt $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$ [Dirac- / Clifford-Algebra]; γ^μ müssen matrix-wertig sein [mind. 4×4].
[Kleinstmögliche Darstellungsform heit „irreduzibel“.]

Erfüllt γ^μ die Dirac-Algebra, so auch $\tilde{\gamma}^\mu = S \gamma^\mu S^{-1}$ [$S \in GL(4, \mathbb{C})$, „Spin-Basen-Transformation“] oder $\hat{\gamma} = \begin{pmatrix} \gamma^\mu & 0 \\ 0 & \gamma^\mu \end{pmatrix}$.

Mit $\sigma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ und den Pauli-Matrizen: $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ schreibt man $(\sigma_\mu) = (\tilde{\sigma}^\mu) = (\sigma_0, \sigma_i)$, $(\sigma^\mu) = (\tilde{\sigma}_\mu) = (\sigma_0, -\sigma_i)$ und somit die chirale Darstellung $\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \tilde{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix}$.

Dirac-Operator $\not{p} = \gamma^\mu p_\mu = \begin{pmatrix} & & p^0 + p^3 & p^1 - ip^2 \\ & 0_{2 \times 2} & p^1 + ip^2 & p^0 - p^3 \\ p^0 - p^3 & -p^1 + ip^2 & & \\ -p^1 - ip^2 & p^0 + p^3 & & 0_{2 \times 2} \end{pmatrix}$ und somit $\Psi \in \mathbb{C}^4$;

Ψ transformiert unter Spin-Basen-Transformation [nicht unter Lorentz-Transformation!] und heißt „Spinor“.

Unter Lorentz transformieren dabei $p'^\mu = \Lambda_\nu^\mu p^\nu$, $\gamma'^\mu = \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu$ und $\Psi'(\underline{p}') = \Psi(\underline{p}) \Rightarrow [\gamma'^\mu p'_\mu - mc] \Psi'(\underline{p}') = 0$;
 alternativ formuliert man mit $\gamma'^\mu = S \gamma^\mu S^{-1}$, $\tilde{\Psi}(\underline{p}') = S^{-1} \tilde{\Psi}(\underline{p}) : [\gamma^\mu p'_\mu - mc] \tilde{\Psi}(\underline{p}') = 0$.

Man findet $S = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A^{T-1} \end{pmatrix}$, $A \in SL(2, \mathbb{C})$. Für $\gamma_5 = i \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3$ gilt $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0$.

Es sei der „Dirac-konjugierte Spinor“ $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0$.

Alle kovarianten Bilineare [unter Lorentz-Transformation invariant] sind dann:

$s = \bar{\Psi} \Psi$ [Skalar], $j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi$ [Vektor], $t^{\mu\nu} = \bar{\Psi} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \Psi$ [Tensor], $q^\mu = \bar{\Psi} \gamma_5 \gamma^\mu \Psi$ [Axialvektor], $P \bar{\Psi} \gamma_5 \Psi$ [Pseudoskalar].

Mit $\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$ [ϕ linkshändiger, χ rechtshändiger Weyl-Spinor $\in \mathbb{C}^2$] erhält man aus der Dirac-Gleichung 2 gekoppelte

2×2 -Gleichungen $\begin{matrix} \sigma^\mu p_\mu \chi = mc \phi \\ \tilde{\sigma}^\mu p_\mu \phi = mc \chi \end{matrix}$, die im Limes $m \rightarrow 0$ entkoppeln.

In chiraler Darstellung findet man $\gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}$; mit $\begin{matrix} P_L = \frac{1}{2} [\mathbb{1}_{4 \times 4} + \gamma_5], \\ P_R = \frac{1}{2} [\mathbb{1}_{4 \times 4} - \gamma_5] \end{matrix}$ ist dann $P_L \Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix}$, $P_R \Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}$.

Die Ebenen-Wellen-Lösung der Dirac-Gleichung lautet $\Psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\vec{k}^2 + \kappa^2}}} e^{-i k^\mu x_\mu} u_k$ [$(p^0, \vec{p}) = (\frac{E}{c}, \frac{1}{\hbar} \vec{k})$,

$u_k = const. \in \mathbb{C}^4$], falls $[\gamma^\mu k_\mu - \kappa] u_k = 0$. Für ein Teilchen in Ruhe ergeben sich jedoch wiederum Spinoren positiver

$[u_k = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}]$ und Spinoren negativer $[u_k = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}]$ Energie [\rightarrow Anti-Teilchen].

Im elektromagnetischen Feld mit Potential $(A^\mu) = (A^0, \vec{A})$ [A^0 skalares Potential, \vec{A} Vektorpotential] und der kovarianten Ableitung $D_\mu = \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu$ gilt die Dirac-Gleichung $[i \not{D} - \kappa] \Psi = 0$.

Diese ist invariant unter Phasentransformation $[\Psi' = e^{\frac{ie}{\hbar c} \lambda(\underline{x})} \Psi, A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \lambda \Rightarrow [i \not{D}' - \kappa] \Psi' = 0]$. Die nach dem Noether-Theorem korrespondierende Erhaltungsgröße ist der Strom j^μ .

Schreibt man die Dirac-Gleichung in die hamilton'sche Form $i \hbar \partial_t \Psi = H \Psi$ um, so erhält man

$H = c \gamma^0 \gamma^k \underbrace{[p_k - \frac{e}{c} A_k]}_{\pi_k \text{ - kinetischer Impuls}} + m_0 c^2 \gamma^0 + e A^0$. Auch kann man $(\gamma^\mu) = \left\{ \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \right\}$ [Dirac-Darstellung] wählen.

Für kleine Impulse [nichtrelativistisch] und Wechselwirkungen [verglichen mit der Ruheenergie] erhält man mit

$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t}$ schließlich, dass $H = \frac{1}{2m_0} \vec{\pi}^2 + e A_0 - \frac{e \hbar}{2m_0 c} \vec{\sigma} \vec{B}$ [Magnetfeld \vec{B}].

Für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit $\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$ und dem bohrschen Magneton $\mu_B = \frac{e \hbar}{2m_0 c}$ erhält man damit den Landé-Faktor

zu $g = 2$ [$E_{\text{mag.}} = -\vec{\mu} \vec{B}$, wobei $\vec{\mu} = g \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}$] .

Fresnel-Integral: $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i \frac{a}{2} x^2} = \frac{e^{\pm i \frac{\pi}{4}}}{\sqrt{|a|}}, a > 0$

Pfadintegrale:

Aufgrund der Eigenschaft des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t_c) \hat{U}(t_c, t_a)$, erhält man nach Unterteilung des Zeitbereichs $[t_a, t_b]$ in $N + 1$ Schritte der Länge ε für einen Hamiltonian der Form $\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}, t) = \hat{T}(\hat{p}, t) + \hat{V}(\hat{x}, t)$ im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ folgende Formel [1-dimensional]:

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \left[\prod_{n=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \left[\prod_{m=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_m}{2\pi\hbar} \right] e^{\frac{i}{\hbar} S_N}$$

mit der Wirkung $S_N = \sum_{n=1}^{N+1} [p_n[x_n - x_{n-1}] - \varepsilon H(x_n, p_n, t_n)]$, falls H bestimmte Bedingungen erfüllt [z.B. 1) T polynomial in p und $V(x) \in C^\infty$ oder 2) $H(x, p)$ zeitunabhängig und nach unten beschränkt oder ...].

Im klassischen Limes [„Korrespondenzlimes“] mit $\frac{S(x_{0,i}(t))}{\hbar} \gg 1$ erhält man in zweiter Näherung für stationäre Pfade $x_{0,i}(t)$ [$\left. \frac{dS}{dx} \right|_{x=x_{0,i}(t)} = 0$]

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \left[\prod_{n=1}^N \right] \left[\prod_{m=1}^{N+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_m}{2\pi\hbar} \right] \sum_{x_{0,i}} \frac{i}{\hbar} \sqrt{\frac{\pm i 2\pi\hbar}{\left| \frac{d^2 S_N}{dx^2} \right|_{x=x_{0,i}}}} e^{S_N(x_{0,i})} .$$

[vgl. Perkeo-Experiment, Aharonov-Bohm-Effekt, ...]