

Skript zur Vorlesung
Lecture Notes

Quantenmechanik II
Advanced Topics in Quantum Mechanics

Prof. Dr. habil. Wolf Gero Schmidt

27. November 2023

Universität Paderborn
Lehrstuhl für Theoretische Materialphysik

Inhaltsverzeichnis

0	Einführung Introduction	5
0.1	Literatur Textbooks	5
0.2	CGS-Einheitensystem CGS system	5
0.3	Erinnerung: Die Axiome der QM Reminder: Axiomatic Formulation of Quantum Mechanics	8
1	Störungsrechnung Perturbation theory	10
1.1	Zeitunabhängige Störungstheorie Time-independent perturbation theory	10
1.2	Zeitabhängige Störungstheorie Time-dependent perturbation theory	14
1.3	Das Wasserstoffmolekülion The hydrogen molecule ion	20
1.4	Das Ritz'sche Variationsprinzip The Ritz method	27
2	Teilchen im elektromagnetischen Feld Particles in electromagnetic field	32
2.1	Klassische Vorbemerkungen Remarks on classical theory	32
2.2	Schrödingergleichung von Teilchen im elektromagnetischen Feld Schrödinger equation for particle in electromagnetic field	33
2.3	Normaler Zeeman-Effekt The "normal" Zeeman effect	36
2.4	Änderung der Wellenfunktion bei einer Eichtransformation Gauge transformation induced change of the wave function	38
2.5	Aharonov-Bohm-Effekt Aharonov-Bohm effect	40
3	Der Elektronenspin The electron spin	48
3.1	Spinoren Spinors	48
3.2	Spinoperatoren, Paulimatrizen Spin operators, Pauli matrices	50
3.3	Spin im Magnetfeld Spin in a magnetic field	52
3.4	Transformation von Spinoren Spinor transformations	54

3.5	Pauli–Gleichung Pauli equation	58
4	Relativistische Quantenmechanik Relativistic Quantum Mechanics	60
4.1	Die Dirac–Gleichung Dirac equation	60
4.2	Der Pauli’sche Fundamentalsatz Pauli’s fundamental theorem	69
4.3	Lorentz–Invarianz der Dirac–Gleichung Lorentz Invariance of the Dirac Equation	76
4.4	Lorentztransformation der Viererstromdichte Lorentz transformation of 4-current density	85
4.5	Lösungen der freien Dirac–Gleichung Free particle solutions of the Dirac equation	88
4.6	Klein-Paradox Klein Paradox	94
4.7	Pauli–Gleichung als nichtrel. Grenzfall der Dirac–Gleichung Pauli equation, as the non-relativistic limit of the Dirac equation	102
4.8	Zustände positiver und negativer Energie States with positive and negative energy	105
4.9	Foldy-Wouthuysen-Transformation Foldy-Wouthuysen Transformation	108
4.10	Der Rashba-Effekt Rashba effect	121
4.11	Die Zitterbewegung des Elektrons Zitterbewegung of electrons	126
5	Wegintegralformulierung der Quantenmechanik The path integral formulation of quantum mechanics	134
5.1	Zeitentwicklungsoperator The time evolution operator	134
5.2	Propagatoren Propagators	136
5.3	Propagator für zeitunabhängigen Hamiltonoperator Propagator for time-independent Hamiltonian	140
5.4	Lippmann–Schwinger–Gleichung Lippmann–Schwinger equation	144
6	Greenfunktion der Einteilchen–Schrödingergleichung Green’s Function of the Single-Particle Schrödinger Equation	150
6.1	Definition und Darstellung Definition and Representation	150

6.2	Störungsrechnung mit Greenschen Funktionen Green's functions and Perturbation Theory	152
6.3	Zeitabhängige Greenfunktionen Time-Dependent Green's Functions	155
7	Mehrteilchensysteme	
	Many-particle systems	164
7.1	Identische Teilchen Identical particles	164
7.2	Fermionen Fermions	168
7.3	Hartree-Näherung Hartree approximation	172
7.4	Hartree-Fock-Methode Hartree-Fock Method	177
7.5	Besetzungszahlformalismus Occupation number representation	181
7.6	Feldoperatoren Field Operators	185
7.7	Quasiteilchen und Feynman-Diagramme Quasiparticles and Feynman diagrams	196
7.8	Vielteilchen-Greenfunktion Many-body Green's function	215
7.9	Fundamentales Gleichungssystem Hedin fundamental equations	228

0 Einführung Introduction

0.1 Literatur Textbooks

Reineker, Schulz, Schulz, *Theoretische Physik III+IV* (Wiley, 2008)
Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene* (Springer 2008)
Messiah, *Quantum Mechanics. Vol. I+ II* (North-Holland 1965)
Inkson, *Many-Body Theory of Solids: An Introduction* (Springer 1984)
Reinhold, *Quantentheorie der Moleküle: Eine Einführung* (Springer 2012)
Haken, Wolf, *Molekülphysik und Quantenchemie: Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen* (Springer 2006)
Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer 1990)
Mattuck, Richard D. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem* (Dover 1992)

0.2 CGS-Einheitensystem CGS system

Neben dem SI-Einheitensystem gibt es auch das sogenannte CGS-Einheitensystem (aus dem Englischen „centimetre gram second“, auch als Gaußsches Einheitensystem bezeichnet), ein metrisches, kohärentes Einheitensystem basierend auf den Einheiten Zentimeter, Gramm und Sekunde. In der theoretischen Physik wird das Gaußsche Einheitensystem gegenüber dem SI-System häufig bevorzugt, weil dadurch elektrisches und magnetisches Feld identische Einheiten erhalten, was logischer ist, da diese Felder nur verschiedene Komponenten des elektromagnetischen Feldstärketensors sind. Sie gehen durch Lorentztransformation auseinander hervor, sind also nur verschiedene „Ausprägungen“ des Elektromagnetismus allgemein und keine prinzipiell trennbaren Erscheinungen. Weiters taucht in dieser Formulierung der Maxwell-Gleichungen die Lichtgeschwindigkeit als Faktor auf, was bei relativistischen Betrachtungen hilfreich ist. Für manche Anwendungen werden gaußsche Einheiten, wie zum Beispiel die magnetische Feldstärkeeinheit Gauß, gegenüber den entsprechenden SI-Einheiten bevorzugt, weil dann die Zahlenwerte handlicher sind. In diesem Skript wird das CGS-System benutzt, um Anschluß an die Mehrzahl der Lehrbücher der Theoretischen Physik zu erlauben.

In addition to the SI system, which uses Metres, Kilograms and Seconds for length, mass and time (for this reason it is sometimes called the MKS system) there is another self-consistent system that uses centimetres, grams and seconds for length, mass and time. It is most often called the CGS system, or the Gaussian system. Each system has its own set of derived units for force, energy, electric current, etc.

Das physikalische Grundgesetz der Elektrostatik ist das Coulombgesetz

In order to understand the relation between the SI and the CGS system, we start

from Coulomb's law

$$F_1 = k_1 \frac{qq'}{r^2} \quad (0.1)$$

das die Kraft zwischen zwei Punktladungen q und q' im Abstand r beschreibt. Daraus wird das elektrische Feld als Kraft pro Einheitsladung abgeleitet [which describes the electrostatic interaction between electrically charged particles with charges \$q\$ und \$q'\$ with distance \$r\$. From this, we derive the electric field as force per unit charge](#)

$$E = k_1 \frac{q}{r^2} \quad (0.2)$$

Die Kraft pro Längeneinheit zwischen zwei unterschiedlich langen, parallelen stromdurchflossenen Leitern im Abstand d die den Strom I und I' tragen ist durch [The force per unit length between two thin, straight, stationary, parallel wires, a distance \$d\$ apart in free space that are carrying the currents \$I\$ and \$I'\$ is given by](#)

$$\frac{dF_2}{d\ell} = 2k_2 \frac{II'}{d} \quad (0.3)$$

gegeben. Strom und Ladung sind nicht unabhängig von einander, sondern durch die Kontinuitätsgleichung [Current and charge are not independent from each other, but related via the continuity equation](#)

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (0.4)$$

Der Vergleich der mechanischen Kräfte für bekannte Ladungen und Ströme liefert [Comparing measured mechanical forces for known currents and charges shows that](#)

$$\frac{k_1}{k_2} = c^2 \quad \text{c... Lichtgeschwindigkeit speed of light} \quad (0.5)$$

Die magnetische Induktion B leitet sich aus der Kraft zwischen den stromdurchflossenen Leitern ab als [The magnetic field \$B\$ is derived from the force between the current carrying wires as](#)

$$B = 2k_2 \alpha \frac{I}{d} \quad (0.6)$$

Dabei ist d der Abstand von einem Draht der vom Strom I durchflossen wird. [Here \$d\$ is the distance from the wire carrying current \$I\$](#) Das elektrische Feld \bar{E} und das magnetische Feld \bar{B} sind durch das Faradaysche Induktionsgesetz verknüpft. Es gilt [The electric field \$\bar{E}\$ and the magnetic field \$\bar{B}\$ are related via the Maxwell-Faraday equation](#)

$$\bar{\nabla} \times \bar{E} + k_3 \frac{\partial \bar{B}}{\partial t} = 0 \quad (0.7)$$

In quellenfreien Gebieten genügt das \bar{B} -Feld der Wellengleichung [In the absence of charges and currents \$\bar{B}\$ satisfies a wave equation](#)

$$\bar{\nabla}^2 \bar{B} - \frac{k_2 k_3 \alpha}{k_1} \frac{\partial^2 \bar{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (0.8)$$

die aus den Maxwellgleichungen folgt. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der dadurch beschriebenen Wellen ist aber bekannt als Lichtgeschwindigkeit c , d.h. [The propagation speed of the wave described by this equation is known as speed of light \$c\$, i.e.](#)

$$\frac{k_1}{k_2 k_3 \alpha} = c^2 \quad (0.9)$$

vorhin $k_1/k_2 = c^2$, damit $k_3 = \frac{1}{\alpha}$. D.h. können 2 Konstanten z.B. k_1 und k_3 wählen, und daraus folgen dann k_2 und α . Die spezielle Wahl im SI und im CGS-System ist unten gegeben. [Above we have seen that \$k_1/k_2 = c^2\$, thus \$k_3 = \frac{1}{\alpha}\$. In other words we can fix the values of two constants, e.g., \$k_1\$ and \$k_3\$, and then \$k_2\$ and \$\alpha\$ are determined. The respective choice in the CGS and SI system is shown below.](#)

	k_1	k_2	α	k_3
CGS	1	$\frac{1}{c^2}$	c	$\frac{1}{c}$
SI	$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$	$\frac{\mu_0}{4\pi}$	1	1

Daraus ergeben sich dann auch unterschiedliche Darstellungen für \bar{D} und \bar{H} -Feld, die Maxwell-Gleichungen und die Lorentzkraft. [This then results in different representations for \$\bar{D}\$ und \$\bar{H}\$ as well as for Maxwells equations and the Lorentz force.](#)

	D, H	Maxwell	Lorentz
CGS	$\bar{D} = \bar{E} + 4\pi\bar{P}$ $\bar{H} = \bar{B} - 4\pi\bar{M}$	$\bar{\nabla} \cdot \bar{D} = 4\pi\rho$; $\bar{\nabla} \times \bar{H} = \frac{4\pi}{c}\bar{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial\bar{D}}{\partial t}$ $\bar{\nabla} \cdot \bar{B} = 0$; $\bar{\nabla} \times \bar{E} + \frac{\partial\bar{B}}{c\partial t} = 0$	$q\bar{E} + \frac{q\bar{v}}{c} \times \bar{B}$
SI	$\bar{D} = \epsilon_0\bar{E} + \bar{P}$ $\bar{H} = \frac{1}{\mu_0}\bar{B} - \bar{M}$	$\bar{\nabla} \cdot \bar{D} = \rho$; $\bar{\nabla} \times \bar{H} = \bar{j} + \frac{\partial\bar{D}}{\partial t}$ $\bar{\nabla} \cdot \bar{B} = 0$; $\bar{\nabla} \times \bar{E} + \frac{\partial\bar{B}}{\partial t} = 0$	$q\bar{E} + q\bar{v} \times \bar{B}$

Die SI-Einheit für die Kraft ist [The SI force unit is](#)

$$\mathbf{Newton} \quad 1N = 1 \frac{kgm}{s^2}. \quad (0.10)$$

Die CGS-Einheit für die Kraft ist [The CGS force unit is](#)

$$\mathbf{dyn} \quad 1dyn = 1 \frac{g \cdot cm}{s^2} \quad (0.11)$$

$$\implies 10^5 dyn = 1N$$

Die SI-Einheit für Energie ist [The SI energy unit is](#)

$$\mathbf{Joule} \quad 1J = 1 \frac{kg \cdot m^2}{s^2} \quad (0.12)$$

Die CGS-Einheit für Energie ist [The CGS energy unit is](#)

$$\mathbf{erg} \quad 1erg = 1g \frac{cm^2}{s^2} \quad (0.13)$$

$$\implies 10^7 \text{erg} = 1 \text{J}$$

Die CGS-Einheit der Ladung ist direkt vom Coulombgesetz abgeleitet [The CGS charge unit is directly derived from Coulombs law](#)

$$F = \frac{qq'}{r^2} \quad (0.14)$$

Zwei Ladungen von je ein *esu* spüren im Abstand von 1 *cm* die Kraft 1 *dyn*. [Two charges of 1 esu each exert at a distance of 1 cm the force 1 dyn on each other.](#)

$$\implies 1C = 1As = 3 \cdot 10^9 \text{esu}$$

Die CGS-Einheit des Magnetfeldes ist der Gauß [The CGS magnetic field unit is](#)

$$1G = 1 \frac{\text{dyn}}{\text{esu}} = 10^{-4} \text{Tesla} \quad (0.15)$$

$1G \approx$ Stärke des Erdmagnetfeldes [strength of earth magnetic field](#)

0.3 Erinnerung: Die Axiome der QM

[Reminder: Axiomatic Formulation of Quantum Mechanics](#)

- (i) Physikalische Zustände quantenmechanischer Systeme werden durch eindimensionale Unterräume eines (seperablen) Hilbert-Raums dargestellt. Der normierte Zustandsvektor $|\psi\rangle$ mit $\|\psi\| = 1$ ist gewöhnlich der Repräsentant des jeweiligen Quantenzustands. [The possible states of a quantum mechanical system are represented by unit vectors \(called "state vectors"\). Formally, these reside in a complex separable Hilbert space - variously called the "state space" or the "associated Hilbert space" of the system - that is well defined up to a complex number of norm 1 \(the phase factor\).](#)
- (ii) Jeder Observablen entspricht ein hermitescher Operator. Orts- und Impulsoperatoren erfüllen dabei die Kommutationsrelationen [Observables are represented by Hermitian operators. The commutation relations of the position and momentum operators read](#)

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \hat{I} \delta_{jk}, \quad (0.16)$$

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0, \quad (0.17)$$

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0. \quad (0.18)$$

- (iii) Das Spektrum jedes hermiteschen Operators entspricht der Menge der zulässigen Meßwerte der zugehörigen Observable. [The spectrum of any Hermitian operator corresponds to the set of allowed values of the corresponding observable.](#)

- (iv) Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung der Observablen A an einem Quantensystem im Zustand $|\psi\rangle$ den Eigenwert a zu messen, ist $|\langle a|\psi\rangle|^2$, wobei $|a\rangle$ der Eigenzustand des der Observablen zugeordneten Operators \hat{A} zum Eigenwert a ist. $|\langle a|\psi\rangle|^2$ is the probability to measure the eigenvalue a for the observable A for a system's quantum state $|\psi\rangle$. Here $|a\rangle$ is the eigenstate corresponding to the eigenvalue a of the operator \hat{A} that represents the observable A .
- (v) Unmittelbar nach einer Messung der Observablen A mit dem Meßresultat a befindet sich das System sicher im Zustand $|a\rangle$. If a is the result of the measurement of A , then $|a\rangle$ is the system's quantum state after the measurement. Any repeated measurement will yield the same result. This phenomenon is called wavefunction collapse.
- (vi) Die Zeitentwicklung eines qm. Zustands wird durch qm. Evolutionsgleichungen (bisher Schrödinger-Gleichung) beschrieben. The time evolution of the system's quantum state is described by quantum mechanical equations of motion. Up to now Schrödinger's equation was considered the quantum law of evolution.

1 Störungsrechnung

Perturbation theory

1.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

Time-independent perturbation theory

suchen Lösung der SG [want to solve SE](#)

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.1)$$

Transformation in eine gegebenenfalls leichter lösbare Gleichung,
[Transformation into a possibly more easily solvable equation,](#)

$$\hat{H}'|\psi'\rangle = E|\psi'\rangle \quad (1.2)$$

möglich? [possible?](#)

Transformieren [Transform](#)

$$|\psi'\rangle = \hat{U}^+|\psi\rangle \quad (1.3)$$

mit dem unitären Operator [using the unitary operator](#) \hat{U} .

Ansatz für [ansatz for](#) \hat{U} :

$$\hat{U} = e^{\hat{S}}. \quad (1.4)$$

Wegen [Because of](#)

$$\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1} \quad (\text{Unitarität } \text{unitarity}) \quad (1.5)$$

folgt [it follows](#)

$$e^{\hat{S}^+} = e^{-\hat{S}} \Rightarrow \hat{S} = -\hat{S}^+ \quad (1.6)$$

d.h. \hat{S} ist antihermitesch [i.e., \$\hat{S}\$ is antihermitian.](#)

Jetzt Trafo [Now transform](#)

$$|\psi'\rangle = \hat{U}^+|\psi\rangle = e^{-\hat{S}}|\psi\rangle. \quad (1.7)$$

Aus

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.8)$$

wird [transforms into](#)

$$\hat{H}e^{\hat{S}}|\psi'\rangle = Ee^{\hat{S}}|\psi'\rangle \quad (1.9)$$

$$\underbrace{e^{-\hat{S}}\hat{H}e^{\hat{S}}}_{\hat{H}'}|\psi'\rangle = E|\psi'\rangle, \quad (1.10)$$

d.h. erhalten physikalisch gleichwertige, unitär transformierte SG *i.e. obtain equivalent, unitarily transformed SE*

$$\hat{H}'|\psi'\rangle = E|\psi'\rangle. \quad (1.11)$$

Als Lösungen erhält man die EW E und die EV $|\psi'\rangle$ *The eigenvalues E and the eigenvectors $|\psi'\rangle$ are obtained.*

Aus letzteren bestimmt man die ursprünglichen EV *from the latter one obtains the original EV*

$$|\psi\rangle = e^{\hat{S}}|\psi'\rangle. \quad (1.12)$$

Das eigentliche Problem besteht jetzt darin, die geeignete unitäre Transformation zu finden. Manchmal helfen dabei Symmetrieüberlegungen. Die Alternative ist Störungsrechnung. *The real problem now consists in finding the appropriate unitary transform. Sometimes symmetry considerations are helpful. Alternatively one has to do perturbation theory.*

Machen Zerlegung *Split the Hamiltonian*

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1. \quad (1.13)$$

\nearrow
 ungestörter
 Operator
 unperturbed
 Hamiltonian

\uparrow
 Störung
 perturbation

Für \hat{H}_0 sei die SG gelöst *Assume SE to be solved for \hat{H}_0*

$$\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (1.14)$$

Die EV des gestörten Problems sollen aus den ungestörten EV durch unitäre Trafo hervorgehen *require EV of the perturbed system to be related to the unperturbed EV by a unitary transform*

$$|\psi_n\rangle = e^{\hat{S}}|\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (1.15)$$

Die gestörte WF hängt vom Störparameter λ ab *the perturbed wave functions depend on the (small) parameter λ*

$$|\psi_n\rangle \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (1.16)$$

$$\text{d.h. i.e.} \quad \hat{S} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 0. \quad (1.17)$$

Machen Taylor-Entwicklung nach Potenzen von λ *Expand \hat{S} into a Taylor series with respect to λ*

$$\hat{S} = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \hat{S}^{(k)} = \lambda \hat{S}^{(1)} + \lambda^2 \hat{S}^{(2)} + \dots \quad (1.18)$$

$$E_n = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots \quad (1.19)$$

Starten von gestörter SG **Start from the perturbed SE**

$$\hat{H} \underbrace{|\psi_n\rangle}_{\parallel e^{\hat{S}}|\psi_n^{(0)}\rangle} = E_n \underbrace{|\psi_n\rangle}_{\parallel \leftarrow \text{Ansatz } e^{\hat{S}}|\psi_n^{(0)}\rangle} \quad (1.20)$$

$$\Rightarrow \underbrace{e^{-\lambda\hat{S}^{(1)}}}_{\parallel (1-\lambda\hat{S}^{(1)})} \uparrow \underbrace{e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{\hat{S}}}_{\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n \underbrace{|\psi_n^{(0)}\rangle}_{\parallel E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)}} \quad (1.21)$$

(nur Terme linear in λ berücksichtigt
consider only first-order terms)

$$(1.22)$$

$$(1 - \lambda\hat{S}^{(1)})(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1)(1 + \lambda\hat{S}^{(1)})|\psi_n^{(0)}\rangle = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)})|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (1.23)$$

$$\{\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 - \lambda\hat{S}^{(1)}\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_0\hat{S}^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2)\}|\psi_n^{(0)}\rangle = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)})|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (1.24)$$

Koeffizientenvergleich liefert **comparison of coefficients shows**

$$\lambda^0 : \hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (1.25)$$

$$\lambda^1 : \{\hat{H}_1 - \hat{S}^{(1)}\hat{H}_0 + \hat{H}_0\hat{S}^{(1)}\}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (1.26)$$

Multiplikation der 2. Gleichung mit $\langle\psi_m^{(0)}|$ liefert **multiplikation of the 2nd equation by $\langle\psi_m^{(0)}|$ yields**

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle - \underbrace{\langle\psi_m^{(0)}|\hat{S}^{(1)}\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle}_{E_n^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle} + \underbrace{\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_0\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{E_m^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle} = E_n^{(1)}\delta_{mn} \quad (1.27)$$

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle - (E_n^{(0)} - E_m^{(0)})\langle\psi_m^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}\delta_{mn}. \quad (1.28)$$

Für $n = m$ erhalten wir **For $n = m$ we obtain**

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle, \quad (1.29)$$

d.h. für $\lambda = 1$ ergibt sich der gestörte Eigenwert als **for $\lambda = 1$ the perturbed eigenvalue is obtained as**

$$\boxed{E_n = E_n^{(0)} + \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle} \quad (1.30)$$

D.h. können aus den Eigenwerten und Eigenvektoren des ungestörten Problems die Eigenwerte des gestörten Problems approximativ bestimmen! Obviously we may approximate the eigenvalues of the perturbed system from the eigenvalues and eigenvectors of the unperturbed Hamiltonian!

Wie ändern sich die Eigenvektoren? How do the eigenvectors change upon perturbation?

$$|\psi_n\rangle = e^{\hat{S}}|\psi_n^{(0)}\rangle \approx (1 + \lambda\hat{S}^{(1)})|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (1.31)$$

Für $\lambda = 1$ und unter Ausnutzung von In case of $\lambda = 1$ and exploiting that

$$\hat{I} = \sum_m |\psi_m^{(0)}\rangle\langle\psi_m^{(0)}| \quad (1.32)$$

folgt it follows

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_m |\psi_m^{(0)}\rangle\langle\psi_m^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (1.33)$$

$$|\psi_n\rangle = \{1 + \langle\psi_n^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle\}|\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \langle\psi_m^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle|\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (1.34)$$

Wegen $\hat{S}^+ = -\hat{S}$ gilt Because of $\hat{S}^+ = -\hat{S}$ it holds

$$\langle\psi_n^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle = -\langle\psi_n^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle^* \quad (1.35)$$

$$\Rightarrow \langle\psi_n^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle = ix_n \text{ mit here } x_n \in \mathbb{R} \text{ (rein imaginär, pure imaginary)} \quad (1.36)$$

$$\Rightarrow |\psi_n\rangle = (1 + ix_n)\{|\psi_n^{(0)}\rangle + (1 + ix_n)^{-1} \sum_{m \neq n} \langle\psi_m^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle|\psi_m^{(0)}\rangle\} \quad (1.37)$$

$$\approx e^{ix_n}\{\dots\}. \quad (1.38)$$

Können Phasenfaktor einer Wellenfunktion beliebig wählen, machen spezielle Wahl $x_n = 0$ Phase factors of wave functions may be arbitrarily chosen, our choice: $x_n = 0$.

Damit

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \langle\psi_m^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle|\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (1.39)$$

Aus (1.28) folgt für $n \neq m$ from (1.28) it follows for $n \neq m$

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{S}^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle = \frac{\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (1.40)$$

d.h. i.e.

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (1.41)$$

Bemerkungen *remarks*

- (i) In die gestörten Wellenfunktionen mischen alle ungestörten Wellenfunktionen ein *Essentially all unperturbed wave functions contribute to the wave function of the perturbed system.*
- (ii) Einfluß energetisch benachbarter Zustände potentiell am größten *thereby the states in the energetic vicinity typically contribute most.*
- (iii) Hier nur Terme bis λ^1 betrachtet, entspricht Störungsrechnung 1. Ordnung; genauere Approximation durch Terme höherer Ordnung *Here we have only considered first-order terms in λ , i.e., first-order perturbation theory; more accurate description possible by including higher-order terms.*

1.2 Zeitabhängige Störungstheorie Time-dependent perturbation theory

Sei Hamiltonian given by

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \underbrace{\hat{H}_1(t)}_{\text{zeitabhängige Störung time-dependent perturbation}} \quad (1.42)$$

Lösung des ungestörten stationären Problems *Assume solution of the unperturbed, stationary problem*

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (1.43)$$

sei bekannt, gelte *to be known, assume that*

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{I}. \quad (1.44)$$

Gesucht ist Lösung des zeitabhängigen Problems *We are looking for the solution of the time-dependent problem*

$$i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (1.45)$$

Entwickeln $|\psi(t)\rangle$ nach $|n\rangle$ **Expand $|\psi(t)\rangle$ in $|n\rangle$**

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \tilde{c}_n(t)|n\rangle \quad (1.46)$$

$$= \sum_n c_n(t) \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{\substack{\text{Zeitabhängigkeit der Lösung des stat. Problems} \\ \text{time-dependance of the solution to the stationary problem}}} |n\rangle \quad (1.47)$$

Damit in SG **Insert in SE**

$$\begin{aligned} & i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle + i\hbar \sum_n c_n(t) \left(-\frac{i}{\hbar} E_n \right) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle \\ &= \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \underbrace{\hat{H}_0}_{E_n|n\rangle} |n\rangle + \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \hat{H}_1(t) |n\rangle. \end{aligned} \quad (1.48)$$

Es verbleibt **It remains**

$$\sum_n i\hbar \dot{c}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \hat{H}_1(t) |n\rangle \quad | \langle m| \quad (1.49)$$

$$i\hbar \dot{c}_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} = \sum_n \langle m| \hat{H}_1(t) |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} c_n(t). \quad (1.50)$$

Mit Abkürzung **with abbreviation** $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \dots$ Übergangsfrequenz **transition frequency**

folgt Bewegungsgleichung für **the equation of motion for $c_m(t)$**

$$i\hbar \dot{c}_m(t) = \sum_n \langle m| \hat{H}_1(t) |n\rangle e^{-i\omega_{nm}t} c_n(t). \quad (1.51)$$

System von (im allg. unendlich vielen) DGL mit zeitabhängigen Koeffizienten (**In general infinite dimensional system of differential equations with time-dependent coefficients.**)

Falls das System zur Zeit $t_0 = 0$ im Zustand $|l\rangle$ ist, ist $|c_n(t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das System durch die Störung \hat{H}_1 zur Zeit t in den Zustand $|n\rangle$ übergegangen ist. **If $|l\rangle$ is the state vector of our system for $t_0 = 0$, then $|c_n(t)|^2$ represents the probability that the perturbation \hat{H}_1 has induced the transition of the system in the state vector $|n\rangle$ at time t .**

Approximative Lösung durch Integration **Approximate solution from integrating**

$$\int_{t_0}^t d\tau \Rightarrow c_m(t) = c_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^t d\tau H_{1mn}(\tau) e^{-i\omega_{nm}\tau} c_n(\tau). \quad (1.52)$$

Falls \hat{H}_1 eine "kleine" Störung ist, und τ "kurz", sind die $c_n(t) \approx c_n(t_0)$, dann It holds $c_n(t) \approx c_n(t_0)$ provided \hat{H}_1 is "small" and τ is "short"; then

$$c_m(t) \approx c_m(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_n c_n(t_0) \int_{t_0}^t d\tau H_{1mn}(\tau) e^{-i\omega_{nm}\tau}. \quad (1.53)$$

Können diese Koeffizienten unter dem Integral 1.52 einsetzen und so sukzessive bessere Lösungen bestimmen These coefficients may be inserted into the above integral 1.52, thus successively better solutions may be obtained.

- Kurzzeitige Störung short perturbation

$$\hat{H}_1(t) \neq 0 \quad \text{für} \quad 0 \leq t \leq T \quad (1.54)$$

Vor der kurzzeitigen Störung sei das System im Eigenzustand $|l\rangle$ von \hat{H}_0 , d.h. The system is assumed to be in the eigenstate $|l\rangle$ of \hat{H}_0 before the perturbation starts, i.e.

$$c_n(t_0) = \delta_{nl}. \quad (1.55)$$

Damit gilt approximativ für Thus it holds approximately for $0 \leq t \leq T$

$$c_m(t) \approx \delta_{ml} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau H_{1ml}(\tau) e^{-i\omega_{lm}\tau} \quad (1.56)$$

Für $t \geq T$ verlässt das System den erreichten Zustand nicht mehr, wegen For $t \geq T$ the system remains in its state, because of

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_n \begin{array}{c} H_{1mn}(t) \\ \| \\ 0 \text{ für for} \\ t \geq T \end{array} e^{-i\omega_{nm}t} c_n(t) = 0 \quad (1.57)$$

d.h. i.e.

$$c_m(t) = c_m(T) \quad \text{für for } t \geq T \quad (1.58)$$

Damit ist die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{l \rightarrow m}$ das System zur Zeit $t \geq T$ im Zustand $|m\rangle$ zu finden, wenn es vor der Stärkung in $|l\rangle \neq |m\rangle$ war Thus the transition probability $P_{l \rightarrow m}$ to find the system in the state $|m\rangle$ at time

$t \geq T$ provided it was in the state $|l\rangle \neq |m\rangle$ before being perturbed is given by

$$P_{l \rightarrow m} = |c_m(T)|^2 \approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T d\tau H_{1ml}(\tau) e^{-i\omega_{lm}\tau} \right|^2. \quad (1.59)$$

Betrachten Fourier-Transformation der Matrixelemente von [Consider Fourier transform of matrix elements of \$\hat{H}_1\(t\)\$](#)

$$\tilde{H}_{1ml}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau H_{1ml}(\tau) e^{i\omega\tau} \quad (1.60)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^T d\tau H_{1ml}(\tau) e^{i\omega\tau} \quad (1.61)$$

Damit [Thus](#)

$$P_{l \rightarrow m} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\tilde{H}_{1ml}(\omega_{ml})|^2$$

(1.62)

- Monochromatische Störung [Monochromatic perturbation](#)
 betrachten monochromatisches Lichtfeld [consider now monochromatic light](#)

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{a}(F e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} + F^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}) \quad (1.63)$$

mit Polarisationsvektor [with polarization vector \$\vec{a}\$](#) und komplexer Amplitude [and complex amplitude \$F\$](#)

d.h. Störpotential [i.e. perturbation given by](#)

$$V(t) = -e \vec{x} \vec{E}(\vec{x}, t) \quad (1.64)$$

||
 $\hat{H}_1(t)$

(Wechselwirkungsenergie des Elektrons mit \vec{E} -Feld [interaction energy of electron with electric field \$\vec{E}\$](#))

\vec{E} einsetzen liefert [insert the above \$\vec{E}\$](#)

$$\hat{H}_1 = \underbrace{-e \vec{x} \vec{a} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} F}_{\hat{A}} e^{-i\omega t} \underbrace{-e \vec{x} \vec{a} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} F^*}_{\hat{A}^+} e^{i\omega t} \quad (1.65)$$

$|\vec{k}| |\vec{x}| = \frac{2\pi}{\lambda} |\vec{x}| \dots$ klein, falls **small in case of** $|\vec{x}| \ll \lambda$ d.h. für Atome in nicht zu kurzwelliger Strahlung gilt, **i.e., for atoms in long-wave radiation it holds**

$$\hat{A} \approx -e \hat{\vec{x}} \vec{a} F \qquad \hat{A}^+ \approx -e \hat{\vec{x}} \vec{a} F^* \quad (1.66)$$

damit **thus**

$$H_{1,ml}(\tau) = A_{ml} e^{-i\omega\tau} + A_{ml}^* e^{i\omega\tau} \quad (1.67)$$

$$\begin{aligned} & \parallel \\ & \langle m | \hat{A} | l \rangle \\ & \parallel \\ & -F \vec{a} \langle m | e \hat{\vec{x}} | l \rangle \end{aligned}$$

damit in die Approximation für die **insert now this expression into the approximation for** $c_m(t)$

$$c_m(t) \approx c_m(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau \sum_n H_{1,mn}(\tau) e^{-i\omega_{nm}\tau} c_n(0) \quad (1.68)$$

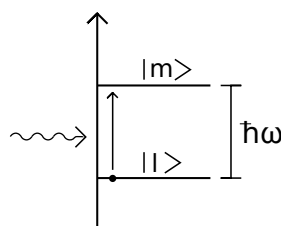
Sei Atom für $t_0 = 0$ (vor dem Einschalten des Feldes) in $|l\rangle$, d.h. $c_n(0) = \delta_{nl}$ dann ergibt sich für $m \neq l$ **Assume atom to be in the state** $|l\rangle$ **for** $t_0 = 0$, **i.e., before the field is switched on. Then** $c_n(0) = \delta_{nl}$ **and for** $m \neq l$ **it holds**

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{A_{ml}}{i\hbar} \left. \frac{e^{-i(\omega_{lm}+\omega)\tau}}{-i(\omega_{lm}+\omega)} \right|_0^t + \frac{A_{ml}^*}{i\hbar} \left. \frac{e^{-i(\omega_{lm}-\omega)\tau}}{-i(\omega_{lm}-\omega)} \right|_0^t \quad (1.69)$$

mit **using that** $\omega_{lm} = -\omega_{ml}$

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{A_{ml}}{i\hbar} \frac{e^{i(\omega_{ml}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{ml}-\omega)} + \frac{A_{ml}^*}{i\hbar} \frac{e^{-i(\omega_{ml}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{ml}+\omega)} \quad (1.70)$$

Jetzt speziell Absorption **Consider now optical absorption**



$\omega_{ml} \approx \omega$, d.h. näherungsweise in Resonanz, **assume roughly resonant radiation**
 $E_m \approx E_l + \hbar\omega$

\Rightarrow 1. Summand dominiert (wegen kleinem Nenner) **1st term dominates (because of denominator)**

$$\Rightarrow c_m^{(1)}(t) \approx \frac{A_{ml}}{i\hbar} \frac{e^{i(\omega_{ml}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{ml}-\omega)} \quad (1.71)$$

gilt it holds

$$|e^{ix} - 1|^2 = |e^{i\frac{x}{2}}e^{i\frac{x}{2}} - e^{i\frac{x}{2}}e^{-i\frac{x}{2}}|^2 \quad (1.72)$$

$$= \underbrace{|e^{i\frac{x}{2}}|^2}_1 \underbrace{|(e^{i\frac{x}{2}} - e^{-i\frac{x}{2}})|^2}_{2i \sin \frac{x}{2}} \quad (1.73)$$

$$= 4 \sin^2 \frac{x}{2} \quad (1.74)$$

$$\Rightarrow |c_m^{(1)}(t)|^2 = P_{l \rightarrow m}(t) \quad (1.75)$$

$$= \frac{|A_{ml}|^2}{\hbar^2} \frac{4 \sin^2 \frac{\omega_{ml} - \omega}{2} t}{(\omega_{ml} - \omega)^2} \quad (1.76)$$

$$= \frac{|A_{ml}|^2}{\hbar^2} \cdot 4 \cdot \underbrace{\frac{\sin^2(\omega_{ml} - \omega) \frac{t}{2}}{(\omega_{ml} - \omega)^2 \frac{t}{2}}}_{\downarrow t \rightarrow \infty} \cdot \frac{t}{2} \quad (1.77)$$

$\pi \delta(\omega_{ml} - \omega)$

$$\left(\text{Erinnerung reminder } \delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 kx}{kx^2} \right) \quad (1.78)$$

d.h. thus

$$P_{l \rightarrow m}(t) = |A_{ml}|^2 \frac{2\pi t}{\hbar^2} \delta(\omega_{ml} - \omega) \quad (1.79)$$

Übergangsrate transition rate, also called decay probability

$$w_{lm} := \frac{d}{dt} P_{lm}(t) \quad (1.80)$$

(Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit
 probability of transition per unit time)

$$\boxed{w_{lm} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |A_{ml}|^2 \delta(\omega_{ml} - \omega)} \quad (1.81)$$

”Fermi’s Goldene Regel” ”Fermi’s golden rule”

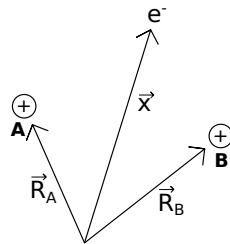
Bemerkungen remarks

- Energieerhaltung durch δ -Funktion δ function ensures energy conservation

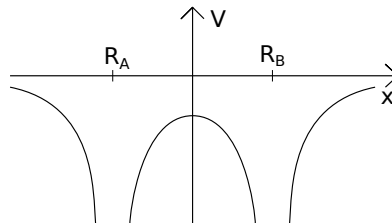
- Übergangsrate $\sim |\text{Übergangsmatrixelement}|^2$ transition rate $\sim |\text{matrix element}|^2$ of the perturbation between the final and initial states
- Although named after Fermi, most of the work leading to the Golden Rule was done by Dirac, who formulated an almost identical equation, including the three components of a constant, the matrix element of the perturbation and an energy difference. It is given its name because, being such a useful relation, Fermi himself called it "Golden Rule".

1.3 Das Wasserstoffmolekulation The hydrogen molecule ion

Einfachste chemische Verbindung H_2^+ The hydrogen molecule ion consists of an electron orbiting about two protons, and is the simplest imaginable molecule. Let us investigate whether or not this molecule possesses a bound state: i.e., whether or not it possesses a ground-state whose energy is less than that of a hydrogen atom and a free proton.



Potentialschema schematic potential



föhren Relativkoordinaten ein transform to relativ coordinates

$$\vec{x}_A = \vec{x} - \vec{R}_A \quad (1.82)$$

$$\vec{x}_B = \vec{x} - \vec{R}_B \quad (1.83)$$

Kernabstand proton distance R_{AB}

Eigentlich haben wir es hier mit einem Dreiteilchenproblem zu tun, welches schon klassisch nicht exakt lösbar ist. Actually, we are dealing here with a three-body problem that already classically cannot be solved analytically.

⇒ betrachten die Kerne als in Ruhe befindlich, ihre Lage geht nur als Parameter in das Problem ein (Born–Oppenheimer–Näherung) Consider the core positions as fixed, they enter the problem only as a parameter (Born–Oppenheimer Approximation)

Damit Hamilton–Operator Hamiltonian thus given as

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\hat{x}_A|} - \frac{e^2}{|\hat{x}_B|} \quad (1.84)$$

mit zugehöriger, zeitunabhängiger SG where the corresponding time-independent SE reads

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.85)$$

betrachten zunächst den Fall, daß beide Kerne unendlich weit entfernt sind, im Grundzustand gilt consider at first the case where the cores are infinitely far from each other; then for the ground state it holds

$$\hat{H}_A|\phi_A\rangle = E_1|\phi_A\rangle \quad \text{mit with } \hat{H}_A = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\hat{x}_A|} \quad (1.86)$$

$$\hat{H}_B|\phi_B\rangle = E_1|\phi_B\rangle \quad \text{mit with } \hat{H}_B = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\hat{x}_B|} \quad (1.87)$$

Das jeweilige Problem \hat{H}_A/\hat{H}_B ist bekanntermaßen das Wasserstoffproblem, E_1 ist die Grundzustandsenergie ($-13,6$ eV) The respective problem \hat{H}_A/\hat{H}_B is known as hydrogen problem, E_1 corresponds to the ground-state energy (-13.6 eV)

Falls die Kerne ∞ entfernt sind, kann die Wellenfunktion des Gesamtsystems als Superposition von $|\phi_A\rangle$ und $|\phi_B\rangle$ dargestellt werden Provided the atoms are ∞ far from each other, the wave function of the complete system may be written as superposition from $|\phi_A\rangle$ and $|\phi_B\rangle$

$$|\psi\rangle = c_A|\phi_A\rangle + c_B|\phi_B\rangle \quad (1.88)$$

Nehmen jetzt an, daß dieser Ansatz auch für endlichen Abstand gut ist (Näherung von Heitler und London). Now assume that this ansatz works as well for finite distances (approximation made by Heitler and London).

Sei Suppose

$$\langle\phi_A|\phi_A\rangle = \langle\phi_B|\phi_B\rangle = 1 \quad (1.89)$$

$$\langle\phi_A|\phi_B\rangle = \langle\phi_B|\phi_A\rangle = \underset{\uparrow}{S} \neq 0 \quad (1.90)$$

Überlappintegral
 overlap integral

Setzen Heitler–London–Ansatz ein [Insert Heitler–London Ansatz](#)

$$\hat{H}(c_A|\phi_A\rangle + c_B|\phi_B\rangle) = E(c_A|\phi_A\rangle + c_B|\phi_B\rangle) \quad (1.91)$$

$$\left(\hat{H}_A - \frac{e^2}{|\hat{x}_B|}\right)c_A|\phi_A\rangle + \left(\hat{H}_B - \frac{e^2}{|\hat{x}_A|}\right)c_B|\phi_B\rangle = E(c_A|\phi_A\rangle + c_B|\phi_B\rangle) \quad (1.92)$$

$$c_A \left(\underbrace{E_1 - E}_{\Delta E} - \frac{e^2}{|x_B|} \right) |\phi_A\rangle + c_B \left(\underbrace{E_1 - E}_{\Delta E} - \frac{e^2}{|x_A|} \right) |\phi_B\rangle = 0 \quad (1.93)$$

Multiplikation mit $\langle\phi_A|$ und $\langle\phi_B|$ führt zu [multiplication by \$\langle\phi_A|\$ and \$\langle\phi_B|\$ leads to](#)

$$c_A \left\{ \Delta E - \underbrace{\langle\phi_A|\frac{e^2}{|\hat{x}_B|}|\phi_A\rangle}_C \right\} + c_B \left\{ \Delta E \cdot S - \underbrace{\langle\phi_A|\frac{e^2}{|\hat{x}_A|}|\phi_B\rangle}_D \right\} = 0 \quad (1.94)$$

und [and](#)

$$c_A \left\{ S\Delta E - \underbrace{\langle\phi_B|\frac{e^2}{|\hat{x}_B|}|\phi_A\rangle}_D \right\} + c_B \left\{ \Delta E - \underbrace{\langle\phi_B|\frac{e^2}{|\hat{x}_A|}|\phi_B\rangle}_C \right\} = 0 \quad (1.95)$$

damit Gleichungssystem [obtain system of equations](#)

$$(\Delta E - C)c_A + (\Delta E \cdot S - D)c_B = 0 \quad (1.96)$$

$$(\Delta E \cdot S - D)c_A + (\Delta E - C)c_B = 0 \quad (1.97)$$

nichttriviale Lösungen für [existence of nontrivial solutions requires](#)

$$(\Delta E - C)^2 - (\Delta E \cdot S - D)^2 = 0 \quad (1.98)$$

d.h. [i.e.](#)

$$\Delta E - C = \pm(\Delta E \cdot S - D) \quad (1.99)$$

$$\Delta E = \frac{C \pm D}{1 \pm S} \quad (1.100)$$

$$\text{bzw. } E = E_1 - \frac{C \pm D}{1 \pm S} \text{ respectively.} \quad (1.101)$$

Einsetzen in Gleichungssystem liefert [Insertion in the equations above results in](#)

$$c_A = \pm c_B \quad (1.102)$$

d.h. wir erhalten symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktion, mit Normierung ergibt sich [That means we obtain a symmetric as well as an asymmetric wave function; normalization leads to](#)

$$|\phi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}(|\phi_A\rangle + |\phi_B\rangle) \quad (1.103)$$

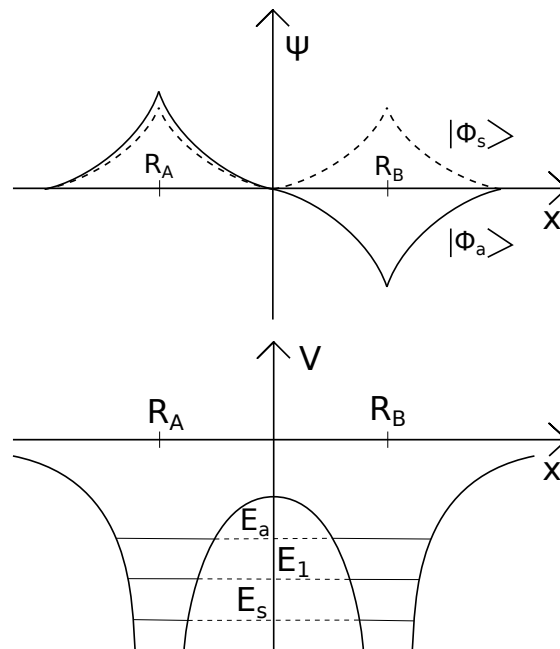
$$\text{mit where } E_S = E_1 - \frac{C+D}{1+S} \quad (1.104)$$

$$|\phi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}(|\phi_A\rangle - |\phi_B\rangle) \quad (1.105)$$

$$\text{mit where } E_a = E_1 - \frac{C-D}{1-S} \quad (1.106)$$

für endlichen Kernabstand gilt [it holds for finite core-core distance](#)

$$E_S < E_1 < E_a \quad (1.107)$$



Bei der Berechnung der Gesamtenergie des Problems muß noch die Kernabstoßung berücksichtigt werden [Still need to consider the core-core repulsion for the calculation of the total energy](#)

$$E_{\text{tot}}(R_{AB}) = E_1 - \Delta E_{s/a}(R_{AB}) + \frac{e^2}{R_{AB}}. \quad (1.108)$$

Betrachten Coulombintegral [Consider Coulomb integral](#)

$$C = \langle \phi_A | \frac{e^2}{|\hat{x}_B|} | \phi_A \rangle \quad (1.109)$$

Offensichtlich **Obviously**

$$\lim_{R_{AB} \rightarrow \infty} C = 0, \quad \lim_{R_{AB} \rightarrow 0} C = \langle \phi_A | \frac{e^2}{|\hat{x}_A|} | \phi_A \rangle = \langle V_H \rangle \quad (1.110)$$

Letzterer Ausdruck kann durch das Virialtheorem abgeschätzt werden. Für eine homogene Potentialfunktion vom Grad s gilt **The size of the latter expression can be approximated using the Virial theorem. If the potential energy V between two particles is proportional to a power s of their distance it holds**

$$\langle T \rangle = \frac{s}{2} \langle V \rangle \quad (1.111)$$

Hier ist $s = -1$ und damit **Exploiting that $s = -1$ in the present case one obtains**

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2} \langle V \rangle \implies C = 2E_H \quad (1.112)$$

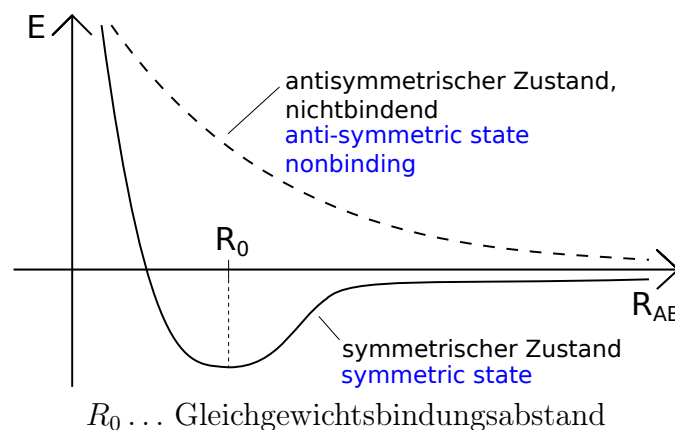
Offensichtlich kompensiert für große Abstände das Coulombintegral C gerade die Coulombabstoßung zwischen den Kernen und gibt für kleine Abstände einen endlichen, negativen Wert. Der für die Bindung entscheidende Beitrag stammt offensichtlich vom Austauschintegral **The Coulomb integral C obviously compensates for the Coulomb repulsion of the protons for large distances and assumes a finite, negative value for small proton distances. The decisive contribution to a possible bonding between the protons stems from the exchange integral**

$$D = \langle \phi_A | \frac{e^2}{|\hat{x}_A|} | \phi_B \rangle \quad (1.113)$$

für welches sich ebenfalls eine Abschätzung angeben läßt **for which one can as well determine upper bounds**

$$\lim_{R_{AB} \rightarrow \infty} D = 0, \quad \lim_{R_{AB} \rightarrow 0} D = \langle \phi_A | \frac{e^2}{|\hat{x}_A|} | \phi_A \rangle = \langle V_H \rangle \quad (1.114)$$

Die genauere, d.h. numerische Rechnung zeigt, daß die Energie des symmetrischen Zustands Anlaß zu einem Minimum gibt **The numerical evaluation of the above expressions shows that the energy of the symmetric state gives rise to a minimum**



Das Wasserstoffmolekulation dient oft als Beispiel einer "anschaulichen" Interpretation der chemischen Bindung. Im Lehrbuch "Molekülphysik und Quantenchemie" von Hermann Haken und Hans Christoph Wolf (Springer, 1994) heißt es zum Beispiel: "...ist bei dem gebundenen Zustand die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons zwischen den beiden Kernen relativ groß. Es kann also, energetisch gesehen, von der Coulombschen Anziehungsenergie beider Kerne profitieren, wodurch die potentielle Energie des Gesamtsystems abgesenkt wird. Im lockernden Zustand ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons zwischen den beiden Kernen klein, in der Mitte sogar 0, was bedeutet, daß das Elektron fast nur die Anziehungskraft jeweils eines Kerns spürt."

Interessanterweise steht das im Widerspruch zur Aussagen eines anderen renommierten Lehrbuchs, "Quantentheorie der Moleküle" von Joachim Reinhold (Teubner, 1994), wo es heißt: "Oft wird [...] der Eindruck erweckt, als würden sich "bindende" Elektronen (im Beispiel des H_2^+ ein einzelnes Elektron, im allgemeinen aber "Elektronenpaare") deshalb bevorzugt (d.h. mit großer Wahrscheinlichkeit) zwischen den Kernen aufhalten, weil dann durch die räumliche Anordnung von negativer Ladung zwischen den beiden positiven Kernladungen die potentielle Energie besonders niedrig wäre. Diese auf klassische elektrostatischen Vorstellungen beruhende Interpretation ist jedoch unzulässig. Gründliche Analysen der Zusammenhänge ergeben ein anderes Bild. Zwar ist beim Gleichgewichtsabstand in der Tat die potentielle Energie abgesenkt (und die kinetische Energie weniger stark erhöht), aber für die Bindungsbildung, d.h. die anziehende Wirkung bei der Annäherung der Atome ist die *Absenkung der kinetischen Energie* entscheidend (die potentielle Energie wird dabei - wenn auch schwach - erhöht). Eine Erklärung dafür läßt sich aus der Unschärferelation folgern. Bei der Bindungsbildung kommt es in der Bindungsregion zu einer "Durchdringung", "Überlagerung", "Überlappung" oder "Interferenz" (hier ist das Wellenbild günstig) der atomaren Zustandsfunktionen ("Wellenfunktionen"). Bei "bindenden" Verhältnissen (positive Überlappung) resultiert daraus eine Vergrößerung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen in der Bindungsregion, bei "antibindenden" ("negative Überlappung") eine Verringerung. Bei bindenden Verhältnissen stehenden Elektronen also größere Raumbereiche (im Vergleich zum Fall getrennter Atome) zur Verfügung, ihre Ortsunschärfe wird größer. Dadurch sinkt ihre Impulsunschärfe. Da der mittlere Impuls bei gebundenen Elektronen 0 ist, werden somit kleinere Impulse wahrscheinlicher. Wegen $T = p^2/2m_e$ werden damit auch kleinere Werte für die kinetische Energie wahrscheinlicher, wodurch sich die mittlere kinetische Energie der Elektronen verringert. Durch diese Verringerung wird die Vergrößerung der potentiellen Energie überkompensiert. Die kinetische Energie ist damit der entscheidende Energiebeitrag für die Bindungsbildung."

Aus der Gegenüberstellung dieser beiden Aussagen wird deutlich, daß die "anschauliche" Interpretation der Quantenmechanik ihre Grenzen hat, und man sich

im Zweifelsfall auf die numerischen Ergebnisse beschränken muß.

Tunneleffekt tunnel effect

betrachten jetzt zeitabhängige Lösung des Wasserstoffmolekülions, aus Vereinfachungsgründen nehmen wir im folgenden verschwindenden Überlapp an, d.h. $S = 0$
 now consider the time-dependent solution to the hydrogen molecule ion, for simplification we assume in the following vanishing overlap, i.e., $S = 0$

$$i\hbar\dot{\psi} = \hat{H}\psi \quad (1.115)$$

$$\text{wobei where } |\psi_s(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_s t} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_A\rangle + |\phi_B\rangle) \quad (1.116)$$

$$|\psi_a(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_a t} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_A\rangle - |\phi_B\rangle) \quad (1.117)$$

$$(1.118)$$

damit lautet die allgemeine Lösung the general solution is given as

$$|\psi(t)\rangle = c_s|\psi_s(t)\rangle + c_a|\psi_a(t)\rangle \quad (1.119)$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}E_s t} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_s + c_a e^{-i\frac{E_a - E_s}{\hbar} t} \right) |\phi_A\rangle \quad (1.120)$$

$$+ e^{-\frac{i}{\hbar}E_s t} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_s - c_a e^{-i\underbrace{\frac{E_a - E_s}{\hbar}}_{\omega_T} t} \right) |\phi_B\rangle \quad (1.121)$$

präparieren spezielle Anfangsbedingung prepare special initial values

$$|\psi(t=0)\rangle = |\phi_A\rangle \quad (1.122)$$

d.h. e^- am Kern A i.e., electron is at core A

Einsetzen in allg. Lösung liefert Insertion in general solution leads to

$$\left. \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}(c_s + c_a) = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(c_s - c_a) = 0 \end{array} \right\} c_s = c_a = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (1.123)$$

daraus folgt it follows

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_s t} \frac{1}{2} \left\{ (1 + e^{-i\omega_T t}) |\phi_A\rangle + (1 - e^{-i\omega_T t}) |\phi_B\rangle \right\}. \quad (1.124)$$

Wahrscheinlichkeit das Elektron am Kern A zu finden [Probability to find the electron at core \$A\$](#)

$$|c_A(t)|^2 = \left| e^{-\frac{i}{\hbar}E_s t} \frac{1}{2} (1 + e^{-i\omega_T t}) \right|^2 \quad (1.125)$$

$$= \left| e^{-\frac{i}{\hbar}E_s t} e^{-i\frac{\omega_T}{2}t} \frac{e^{i\frac{\omega_T}{2}t} + e^{-i\frac{\omega_T}{2}t}}{2} \right|^2 \quad (1.126)$$

$$= \cos^2 \frac{\omega_T}{2} t. \quad (1.127)$$

analog folgt für die Wahrscheinlichkeit das Elektron am Kern B zu finden [the probability to find the electron at core \$B\$ is then analogously obtained as](#)

$$|c_B(t)|^2 = \sin^2 \frac{\omega_T}{2} t \quad (1.128)$$

Offensichtlich gilt [Obviously it holds](#)

$$|c_A(t)|^2 + |c_B(t)|^2 = 1. \quad (1.129)$$

Das Elektron oszilliert zwischen den beiden Kernen A und B mit der Tunnel-[frequenz The electron is oscillating between the cores \$A\$ and \$B\$ with the tunnel frequency](#)

$$\omega_T = \frac{E_a - E_s}{\hbar}. \quad (1.130)$$

Mit wachsendem Kernabstand entarten E_a und E_s zunehmend, und die Tunnel-[frequenz nimmt ab. Im Grenzfall \$R_{AB} \rightarrow \infty\$ gilt \$E_a = E_s \Rightarrow \omega_T = 0\$. The energies \$E_a\$ and \$E_s\$ increasingly degenerate with increasing core-core distance, and, thus, the tunnel frequency decreases. In the limit \$R_{AB} \rightarrow \infty\$ it holds \$E_a = E_s \Rightarrow \omega_T = 0\$.](#)

Die Überlegungen in diesem Kapitel basieren auf einem sehr einfachen Ansatz für die Wellenfunktion, wir sind vom Grundzustand des Wasserstoffatoms gestartet. Realistischer ist sicher eine Beimischung höherer angeregter Zustände. Eine Methode, wie man zu einer besseren Näherung kommen kann, wird im folgenden diskutiert.

[The hydrogen molecule ion has been considered here assuming a very simple form for the wave function that has been constructed from the hydrogen ground-state wave function. Probably it would be much more realistic to assume additional contributions from hydrogen excited states. One possible way to arrive at a more realistic wave function is described below.](#)

1.4 Das Ritz'sche Variationsprinzip [The Ritz method](#)

The Ritz method is a direct method to find an approximate solution for boundary value problems. The method is named after Walter Ritz. "Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik", Journal für die Reine und Angewandte Mathematik, **135**, pages 1-61 (1909).

Betrachten das Funktional **Consider the functional**

$$\bar{H}[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (1.131)$$

und suchen aus der Menge aller zulässigen Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ den Zustand $|\tilde{\psi}_1\rangle$, der dieses Funktional minimiert. **and search among all allowed state vectors $|\psi\rangle$ the state $|\tilde{\psi}_1\rangle$ which minimizes the functional.**

Benutzen Spektraldarstellung von **Exploit spektral representation of \hat{H}**

$$\hat{H} = \sum_n |n\rangle \langle n| E_n, \quad (1.132)$$

wobei **where**

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad n \geq 1. \quad (1.133)$$

Damit **Thus**

$$\bar{H}[\psi] = \frac{\sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle E_n}{\sum_n \langle \psi | n \rangle \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{c_n}} \quad (1.134)$$

Entwicklungskoeffizient
coefficient

$$\bar{H} = \frac{\sum_n |c_n|^2 E_n}{\sum_n |c_n|^2} \geq \frac{E_1 \sum_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} = E_1. \quad (1.135)$$

D.h. wir können das Funktional $\bar{H}[\psi]$ nach unten durch den niedrigsten Eigenwert (Grundzustandsenergie) von \hat{H} abschätzen. **The trial wave-function ψ will always give an expectation value larger than the ground-energy (or at least, equal to it).**

Falls **In case**

$$|\psi\rangle = \alpha|1\rangle \quad (\alpha \neq 0) \quad (1.136)$$

folgt **it follows**

$$\bar{H}[\psi] = E_1. \quad (1.137)$$

Können diese Eigenschaft des Funktionals ausnutzen, um näherungsweise den Grundzustand und die Grundzustandsenergie zu bestimmen. **One may exploit this property of the functional for approximating the ground-state vector and the ground-state energy.**

Machen für praktischen Rechnungen einen Ansatz, in dem der Grundzustand von Parametern a_1, \dots, a_n abhängt: [For actual calculations one makes an ansatz where the ground-state vector depends on parameters \$a_1, \dots, a_n\$:](#)

$$|\psi_1\rangle = |\psi_1(a_1, \dots, a_n)\rangle. \quad (1.138)$$

Als Beispiel kann der Heitler-London-Ansatz von Gl. 1.91 dienen, der um eine Beimischung weiterer Wellenfunktionen ergänzt werden könnte. [The Heitler-London Ansatz Eq. 1.91 may serve as an example, it could be complemented by further wave functions.](#)

Damit wird das Funktional \bar{H} eine von den Parametern a_i abhängige Funktion [In this way the functional \$\bar{H}\$ turns into a function that depends on the parameters \$a_i\$](#)

$$\bar{H}_1(a_1, \dots, a_n) = \frac{\langle \psi_1(a_1, \dots, a_n) | \hat{H} | \psi_1(a_1, \dots, a_n) \rangle}{\langle \psi_1(a_1, \dots, a_n) | \psi_1(a_1, \dots, a_n) \rangle}. \quad (1.139)$$

Suchen das Minimum dieser Funktion durch Lösen des Gleichungssystems [Search for the minimum of this function by means of solving the system of equations](#)

$$\frac{\partial \bar{H}_1(a_1, \dots, a_n)}{\partial a_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.140)$$

Die so gefundenen a_i beschreiben den approximativen Grundzustand [The parameters \$a_i\$ found in this way determine the approximate ground state](#)

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = |\psi_1(a_1, \dots, a_n)\rangle \quad (1.141)$$

mit der approximativen Grundzustandsenergie [and the approximate ground-state energy is given by](#)

$$\tilde{E}_1 = \bar{H}[\tilde{\psi}_1]. \quad (1.142)$$

Analog können wir die höheren angeregten Zustände und Energien abschätzen. Dazu minimieren wir $\bar{H}[\psi]$ unter der Nebenbedingung, daß $|\psi\rangle \perp$ zum Grundzustand ist, d.h. $\langle \psi | 1 \rangle = 0$. Offensichtlich gilt dann [In an analogous manner we may approximate the higher excited states and energies. In order to do so, we minimize \$\bar{H}\[\psi\]\$ under the condition that \$|\psi\rangle\$ is \$\perp\$ to the ground state, i.e., \$\langle \psi | 1 \rangle = 0\$. Then obviously it holds](#)

$$\bar{H}[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (1.143)$$

$$= \frac{\sum_{n=2} \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle E_n}{\sum_{n=2} \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle} \quad (1.144)$$

$$\geq \frac{\sum_{n=2} |c_n|^2 E_2}{\sum_{n=2} |c_n|^2} = E_2. \quad (1.145)$$

Beispiel [Example](#): Grundzustand des harmonischen Oszillators: [Ground state of the harmonic oscillator](#):

Ansatz für Wellenfunktion [Ansatz for wave function](#) $\psi(x, a) = e^{-\frac{a}{2}|x|}$ mit Parameter [with parameter](#) a

$$\bar{H}(a) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}|x|} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + m\omega^2 \frac{x^2}{2} \right) e^{-\frac{a}{2}|x|}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a|x|}} \quad (1.146)$$

Für den Nenner gilt [For the denominator it holds](#)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a|x|} = 2 \int_0^{\infty} dx e^{-ax} = \frac{2}{a}. \quad (1.147)$$

Für den Zähler berechnen wir zunächst [Start by evaluating for the numerator the term](#)

$$\frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{a}{2}|x|} = \left(-\frac{a}{2} \right)^2 e^{-\frac{a}{2}|x|} \left(\frac{d|x|}{dx} \right)^2 - \frac{a}{2} e^{-\frac{a}{2}|x|} \frac{d^2|x|}{dx^2} \quad (1.148)$$

und beachten [and remember that](#)

$$\frac{d|x|}{dx} = \begin{cases} +1 & x > 0 \\ -1 & x < 0 \end{cases}, \quad \frac{d^2|x|}{dx^2} = 2\delta(x). \quad (1.149)$$

Damit folgt für den ersten Teil des Zählers [In this way for the first part of the numerator it is obtained](#)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}|x|} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{a}{2}|x|} = \frac{a^2}{4} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a|x|}}_{\frac{2}{a}} - \frac{a}{2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a|x|} 2\delta(x)}_2 = -\frac{a}{2}. \quad (1.150)$$

Für den zweiten Teil des Zählers gilt [For the second part it holds](#)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}|x|} x^2 e^{-\frac{a}{2}|x|} = \frac{2}{a^3} \int_0^{\infty} d(ax) (ax)^2 e^{-ax} = \frac{4}{a^3}. \quad (1.151)$$

Damit ergibt sich $\bar{H}(a)$ als [Altogether \$\bar{H}\(a\)\$ is obtained as](#)

$$\bar{H}(a) = \frac{a}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{a}{2} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{4}{a^3} \right\} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{a^2}{4} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{2}{a^2}. \quad (1.152)$$

Bestimmung von a durch [Determine \$a\$ via](#)

$$\frac{d\bar{H}(a)}{da} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4} - \frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{a^3} \stackrel{!}{=} 0 \quad (1.153)$$

$$\Rightarrow a^2 = 2\sqrt{2} \frac{m\omega}{\hbar}. \quad (1.154)$$

Damit in $\bar{H}(a)$ [This inserted in \$\bar{H}\(a\)\$ yields](#)

$$\bar{H}(a) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4} \cdot 2\sqrt{2} \frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{2\hbar}{2\sqrt{2}m\omega} \quad (1.155)$$

$$= \hbar\omega \left(\frac{\sqrt{2}}{4} + \frac{\sqrt{2}}{4} \right) \approx 0.7\hbar\omega > \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad (1.156)$$

Damit näherungsweise das exakte Ergebnis reproduziert. [Thus the exact result is approximately reproduced.](#)

2 Teilchen im elektromagnetischen Feld Particles in electromagnetic field

2.1 Klassische Vorbemerkungen Remarks on classical theory

Lagrange-Funktion Lagrange function $L = T - V$

mit verallgemeinerten Potential V aus dem sich die generalisierten Kräfte Q_i ableiten lassen with generalized potential V which gives rise to generalized forces Q_i

$$Q_i = \frac{d}{dt} \frac{\partial V}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial V}{\partial q_i}. \quad (2.1)$$

Fordern jetzt, daß diese generalisierte Kraft der Lorentz-Kraft auf ein bewegtes Teilchen im elektromagnetischen Feld entspricht Now require that the generalized force corresponds to the Lorentz force on a particle moving in an electromagnetic field

$$\vec{F} = q\vec{E} + \frac{q}{c}\vec{v} \times \vec{B} \quad (2.2)$$

mit elektrischer Feldstärke $\vec{E}(\vec{r}, t)$ und Magnetfeld $\vec{B}(\vec{r}, t)$ where $\vec{E}(\vec{r}, t)$ is the electric field and $\vec{B}(\vec{r}, t)$ the magnetic field

Übungsaufgabe: Zeigen, daß Exercise: Show that

$$V = -\frac{q}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} + q\varphi \quad (2.3)$$

$$\text{mit with } \vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (2.4)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (2.5)$$

genau Anlaß zu dieser Kraft gibt! exactly gives rise to the Lorentz force!

Damit erhalten wir die Lagrange-Funktion für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld. Thereby we obtain the Lagrange function for a charged particle in an electromagnetic field.

$$L = T - V = \frac{m}{2}\vec{v}^2 + \frac{q}{c}\vec{A} \cdot \vec{v} - q\varphi \quad (2.6)$$

Daraus erhalten wir die kanonisch konjugierten Impulse From this we obtain the canonical momentum functions

$$\left. \begin{aligned} p_x &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + \frac{q}{c}A_x \\ p_y &= \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} + \frac{q}{c}A_y \\ p_z &= \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} + \frac{q}{c}A_z \end{aligned} \right\} \vec{p} = m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A} \quad (2.7)$$

D.h. im elektromagnetischen Feld ist der kanonisch konjugierte Impuls verschieden vom mechanischen Impuls $m\vec{v}$ des Massenpunkts **Obviously, the canonical momentum is to be distinguished from the mechanical momentum $m\vec{v}$ for charged particles in electromagnetic fields**

Jetzt bestimmen wir die Hamiltonfunktion **Now we determine the Hamiltonian function**

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - L \\
 &= p_x \dot{x} + p_y \dot{y} + p_z \dot{z} - L \\
 &= \vec{p} \cdot \vec{v} - L \\
 &= \frac{1}{m} \underbrace{\vec{p} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)}_{m\vec{v}} - \frac{m}{2} \frac{1}{m^2} \underbrace{\left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2}_{m\vec{v}} - \frac{q}{c} \vec{A} \frac{1}{m} \underbrace{\left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)}_{m\vec{v}} + q\varphi \\
 &= \frac{1}{m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) - \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\varphi
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

d.h. i.e.,

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\varphi$$

(2.9)

2.2 Schrödingergleichung von Teilchen im elektromagnetischen Feld Schrödinger equation for particle in electromagnetic field

Übertragen die klassische Hamiltonfunktion eines geladenen Teilchens auf den Hamiltonoperator des Elektrons **The electron Hamiltonian (quantum mechanical operator corresponding to the total energy of the system) is obtained from the Hamiltonian function of a charged particle**

$$H \rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}, t) \right]^2 + e\varphi(\hat{x}, t) \tag{2.10}$$

daraus ergibt sich sofort die SG **From this we obtain immediately the SE**

$$i\hbar\dot{\psi} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right] \psi \tag{2.11}$$

bzw. ausmultipliziert (dabei beachten, daß $[\hat{\vec{p}}, \vec{A}] = -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A})$) **or expanded, respectively, remembering that $[\hat{\vec{p}}, \vec{A}] = -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A})$**

$$i\hbar\dot{\psi} = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + e\varphi - \frac{1}{m} \frac{e}{c} \vec{A} \hat{p} - \frac{1}{2m} \frac{e}{c} \frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) + \frac{1}{2m} \left(\frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right] \psi \tag{2.12}$$

wobei $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$.

Erinnerung Elektrodynamik **Reminder Electrodynamics**
können Potentiale umeichen **may gauge transform the potentials in such a way**

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}f \quad (2.13)$$

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} f \quad (2.14)$$

ohne daß sich die Felder ändern, insbesondere können wir die Coulomb-Eichung voraussetzen, d.h. **that the fields do not change. In particular we may assume the so-called Coulomb gauge, i.e.,**

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0. \quad (2.15)$$

In Coulomb-Eichung ergibt sich für die Schrödingergleichung **Within Coulomb gauge the SE reads**

$$i\hbar\dot{\psi} = \left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\varphi - \frac{1}{m} \frac{e}{c} \vec{A} \hat{p} + \frac{1}{2m} \left(\frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right\} \psi. \quad (2.16)$$

Betrachten speziell konstantes Magnetfeld, dann Vektorpotential gegeben durch **Consider now the special case of a constant magnetic field, the corresponding magnetic vector potential is given as**

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} [\vec{r} \times \vec{B}] \quad (2.17)$$

Beweis: [Proof](#):

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})_i = (\vec{\nabla} \times (-\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}))_i = \epsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{1}{2} \epsilon_{klm} x_l B_m \right) \quad (2.18)$$

$$= \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial x_l}{\partial x_j} B_m \right) \quad (2.19)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\delta_{lj}}$

$$= -\frac{1}{2} \underbrace{\epsilon_{ijk} \epsilon_{kjm}}_{-2\delta_{im}} B_m \quad (2.20)$$

$$= B_i \quad (2.21)$$

□

Betrachten für dieses \vec{A} jetzt 3. und 4. Term der Schrödingergleichung [Now consider the 3th and 4th term of the SE for this particular choice of \$\vec{A}\$](#)

Term linear in \vec{A} (paramagnetischer Term) [term linear in \$\vec{A}\$ \(paramagnetic term\)](#)

$$-\frac{1}{m} \frac{e}{c} \vec{A} \hat{p} \psi = \frac{i\hbar e}{mc} \left(-\frac{1}{2} \right) (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla} \psi \quad (2.22)$$

$$= \frac{i\hbar e}{2mc} (\vec{r} \times \vec{\nabla}) \cdot \vec{B} \psi \quad (2.23)$$

$$\stackrel{\nearrow}{=} -\frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} \psi \quad (2.24)$$

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

quadratischer Term in \vec{A} (diamagnetischer Term) [squared term in \$\vec{A}\$ \(diamagnetic term\)](#)

$$\frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 \psi = \frac{e^2}{8mc^2} (\vec{r} \times \vec{B})^2 \psi \quad (2.25)$$

$$= \frac{e^2}{8mc^2} (\vec{r}^2 \vec{B}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2) \psi \quad (2.26)$$

$$\text{o.v.a.A. } \vec{B} \parallel \vec{e}_z = \frac{e^2 \vec{B}^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) \psi \quad (2.27)$$

vergleichen Größenordnung dieser Terme für $q = e$ in Atomen [compare magnitude](#)

of these terms in case of atoms for $q = e$

$$\frac{\frac{e^2}{8mc^2} \langle x^2 + y^2 \rangle \cdot B^2}{\frac{e}{2mc} \langle L \rangle \cdot B} \approx 10^{-10} B \text{ (in Gau\ss)} \quad (2.28)$$

↑
 $\langle x^2 + y^2 \rangle \approx a_0^2$: Bohr'scher
 Radius Bohr radius

$$\langle L \rangle \approx \hbar \quad (2.29)$$

⇒ für "normale" B-Felder ($B \leq 10^5$ Gau\ss) ist der quadratische (diamagnetische) Term gegenüber dem linearen (paramagnetischen) Term vernachlässigbar für atomare Systeme for magnetic fields of "normal" strength ($B \leq 10^5$ Gau\ss) the squared (diamagnetic) term is negligible compared to the linear (paramagnetic) term for atom-sized system

Situation ändert sich für delokalisierte Elektronen (z.B. Metallelektronen) oder extreme Feldstärken (auf Neutronensternen $B \sim 10^{12}$ Gau\ss) The situation changes if delocalized electrons (e.g. in metals) or extreme fields (e.g. on neutron stars with $B \sim 10^{12}$ Gau\ss) are considered

vergleichen paramagnetischen Term mit Coulombenergie in Atomen compare paramagnetic term with Coulomb energy typical for atoms

$$\frac{\frac{e}{2mc} \langle L \rangle \cdot B}{\frac{e^2}{a_0}} \sim 10^{-10} B \text{ (in Gau\ss)} \quad (2.30)$$

⇒ unter typischen Laborbedingungen ist die Änderung der atomaren Niveaus durch magnetische Felder gering The shift of the atomic energy levels due to magnetic fields is small in typical laboratory conditions

2.3 Normaler Zeeman-Effekt The "normal" Zeeman effect

diamagnetischer Term klein (2.2) as we have just seen, the diamagnetic term is typically negligible, cf. chapter 2.2

⇒ gehen für das Wasserstoffatom im räumlich und zeitlich konstanten Magnetfeld vom folgenden Hamilton-Operator aus consider in the following a hydrogen atom in a spatially constant and time-independent magnetic field with Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2mc} B L_z \quad (2.31)$$

wobei das Magnetfeld parallel zur z-Achse gelegt wurde here the magnetic field was chosen parallel to the z axis

hierbei ist [thereby it holds](#)

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad (2.32)$$

mit Eigenfunktionen [with eigen functions](#)

$$\psi \quad (2.33)$$

Die ψ_{nlm_l} sind auch Eigenfunktionen von \hat{L}^2 und \hat{L}_z , und damit auch Eigenfunktionen von \hat{H} . Es gilt [The \$\psi_{nlm_l}\$ are eigen functions of \$\hat{L}^2\$ and \$\hat{L}_z\$ as well. Therefore they are eigen functions of \$\hat{H}\$ too. It holds](#)

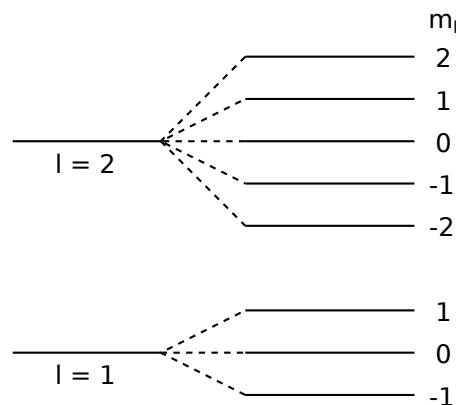
$$\hat{H}\psi_{nlm_l} = \left\{ -\frac{Ryd}{n^2} - \frac{e\hbar m_l \cdot B}{2mc} \right\} \psi_{nlm_l} \quad (2.34)$$

d.h. die Energieeigenwerte sind verschoben [i.e., the energy eigen values are shifted](#)

$$E_{nlm_l} = -\frac{Ryd}{n^2} + \hbar\omega_L m_l \quad \text{mit} \quad (2.35)$$

$$\omega_L = -\frac{eB}{2mc} \quad \dots \quad \text{Lamor-Frequenz} \quad (2.36)$$

Das Magnetfeld hebt die $(2l + 1)$ -fache Entartung der Energieniveaus auf. Jedes Niveau mit Drehimpulsquantenzahl l wird in $(2l + 1)$ äquidistante Niveaus aufgespalten. [The magnetic field lifts the \$\(2l + 1\)\$ -fold degeneracy of the energy levels. A given level with azimuthal quantum number \$l\$ \(also known as orbital angular momentum quantum number or second quantum number\) splits into \$\(2l + 1\)\$ equidistant levels.](#)



Hamiltonoperator in Coulomb-Eichung für konstantes Magnetfeld (vgl. 2.2)
 Coulomb-gauge Hamiltonian for constant magnetic field (cf. 2.2)

$$H = \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + e\varphi - \frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{e^2 B^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) \quad (2.37)$$

erlaubt die Berechnung des magnetischen Moments $\vec{\mu}$ nach der Definition $\vec{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{B}}$
 allows for calculating the magnetic moment $\vec{\mu}$ according to the definition $\vec{\mu} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{B}}$
 Daraus folgt für den paramagnetischen Term This leads in case of the paramagnetic term to

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L} = \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} \quad (2.38)$$

mit dem Bohr'schen Magneton where the Bohr magneton

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (2.39)$$

has been introduced. Der paramagnetische Term kann typischerweise abgeschätzt werden als The paramagnetic term is approximately given by

$$|\langle \vec{\mu} \rangle| = \mu_B \frac{|\langle \vec{L} \rangle|}{\hbar} \approx \mu_B \quad (2.40)$$

(Hier ist noch nicht der Spin berücksichtigt!) (Up to now the spin has not been considered yet!)

Der diamagnetische Beitrag ergibt sich zu The diamagnetic term is given as

$$\vec{\mu} = -\frac{e^2 \vec{B}}{4mc^2} (x^2 + y^2) \quad (2.41)$$

Danach gilt im Atom Accordingly, it holds for the atom

$$\langle \vec{\mu} \rangle \approx \frac{e^2 \vec{B}}{4mc^2} a_0^2. \quad (2.42)$$

2.4 Änderung der Wellenfunktion bei einer Eichtransformation Gauge transformation induced change of the wave function

Die Lorentz-Kraft hängt nur von \vec{B} ab (vgl. 2.1), aber die Schrödinger-Gleichung enthält das Vektorpotential. The Lorentz force depends on the magnetic field only (cf. 2.1). The vector potential, however, enters the SE.

Hängt die Wellenfunktion (und das dadurch beschriebene geladene Teilchen) von der Eichung ab? Depends the wave function (and the charged particle it describes) on the gauge?

Untersuchen den Einfluß der Eichtrafo [Investigate the influence of the gauge transformation](#)

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A}' + \vec{\nabla} f \\ \varphi &\rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} f\end{aligned}\quad \text{mit } f = f(\vec{r}, t) \quad (2.43)$$

SG in der ersten Eichung lautet [In this gauge the SE reads](#)

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\vec{r}, t) \right\} \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (2.44)$$

Für die Wellenfunktion $\psi'(\vec{r}, t)$ in der gestrichenen Eichung gilt [In the prime-denoted gauge the wave function \$\psi'\(\vec{r}, t\)\$ is given by](#)

$$\psi'(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t) e^{\frac{ie}{\hbar c} f(\vec{r}, t)} \quad (2.45)$$

Beweis Proof:

Untersuchen zunächst die Wirkung von [Start by investigating the influence of \$\hat{D}' = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}'\$ auf \$\psi'\$](#)

$$\hat{D}' \psi' = \hat{D}' e^{\frac{ie}{\hbar c} f(\vec{r}, t)} \psi(\vec{r}, t) \quad (2.46)$$

$$= e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \left\{ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \underbrace{\frac{e}{c} \vec{A}' - \frac{e}{c} (\nabla f)}_{-\frac{e}{c} \vec{A}} \right\} \psi(\vec{r}, t) \quad (2.47)$$

$$= e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \hat{D} \psi \quad (2.48)$$

nochmalige Anwendung liefert [repeated application leads to](#)

$$\hat{D}'^2 e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \psi = e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \hat{D}^2 \psi \quad (2.49)$$

d.h. i.e.

$$\left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right)^2 e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (2.50)$$

Damit in die SG in gestrichener Eichung [Consider now SE in prime-denoted gauge](#)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \psi}_{\psi'} = \left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right)^2 + e\varphi' \right\} e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \psi \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} &\downarrow \\ &-\frac{e}{c} \dot{f} e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \psi + i\hbar e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &\stackrel{(2.50)}{=} \frac{1}{2} e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + e \left(\varphi - \frac{1}{c} \dot{f} \right) e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \psi \end{aligned} \quad (2.52)$$

Erster Term links und letzter Term rechts heben sich auf. Die nur noch als Vorfaktor auftretende Exponentialfunktion kann eliminiert werden. Es verbleibt **First lhs term and last rhs term cancel. The prefactor (exponential function) may be eliminated. It remains**

$$i\hbar\dot{\psi}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 \psi(\vec{r}, t) + e\varphi\psi(\vec{r}, t), \quad (2.53)$$

d.h. die SG in ungestrichener Eichung i.e., the SE in unprimed gauge
 □

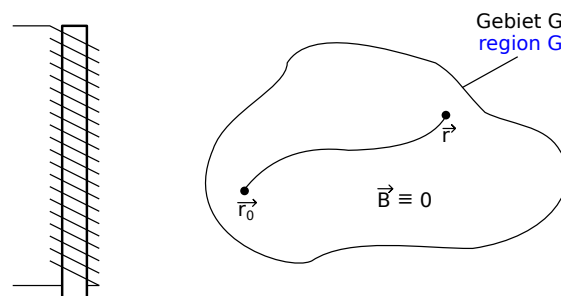
Die Eichtransformation bedingt also einen zusätzlichen Orts- und zeitabhängigen Phasenfaktor der Wellenfunktion. Die Umeichung hat jedoch keine beobachtbaren physikalischen Konsequenzen, da sich $|\psi|^2$ dabei nicht ändert. **The gauge transformation introduces an additional space and time-dependent phase factor into the wavefunction. However, since the observable translates to the probability density, $|\psi|^2$ this phase dependence seems invisible. One physical manifestation of the gauge invariance of the wavefunction is found in the Aharonov-Bohm effect, see below.**

2.5 Aharonov–Bohm–Effekt Aharonov–Bohm effect

Betrachten die Wellenfunktion eines Elektrons in Gegenwart eines zeitunabhängigen Magnetfeldes $\vec{B}(\vec{r})$. Dieses möge in einem Raumgebiet verschwinden **Consider an electron travelling along a path within a region in which the magnetic field, $\vec{B}(\vec{r})$ is identically zero.**

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = 0 \quad (2.54)$$

wie es z.B. außerhalb einer unendlich langen Spule der Fall ist: **This is the case, e.g., outside an ideal solenoid (i.e. infinitely long and with a perfectly uniform current distribution):**



im Gebiet G gilt $\vec{B} \equiv 0$, d.h. können \vec{A} darstellen als $\vec{A} = \vec{\nabla} f$ mit [In the region G it holds \$\vec{B} \equiv 0\$, i.e. we may write \$\vec{A}\$ as \$\vec{A} = \vec{\nabla} f\$ where](#)

$$f(\vec{r}) = \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}'), \quad (2.55)$$

wobei \vec{r}_0 ein beliebiger Punkt in G ist. [here \$\vec{r}_0\$ is an arbitrary point in the region \$G\$.](#)

Die Wellenfunktion eines Elektrons in G kann man bestimmen aus [The electron wave function in \$G\$ may be determined from](#)

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + V\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi, \quad (2.56)$$

oder aus der eichtransformierten Gleichung ohne Vektorpotential [or from the gauge transformed equation that does not contain the vector potential](#)

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}(-f) = 0 \quad (2.57)$$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 \psi' + V\psi' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' \quad (2.58)$$

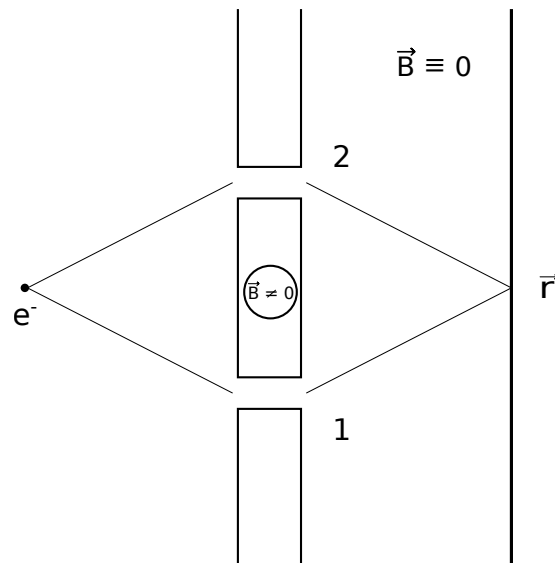
wobei gilt [here it holds](#)

$$\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}) e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \quad (2.59)$$

$$= \psi'(\vec{r}) e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')} . \quad (2.60)$$

Dabei ist ψ' die Wellenfunktion im Potential V mit $\vec{B} \equiv 0$ im ganzen Raum. [Thereby \$\psi'\$ is the wave function corresponding to the potential \$V\$ where it holds \$\vec{B} \equiv 0\$ everywhere.](#)

Jetzt stellt sich die Frage, ob ein Elektron, das sich nur in Regionen bewegt, in denen zwar $\vec{A}(\vec{r})$ verschieden von Null ist, aber $\vec{B}(\vec{r})$ verschwindet, etwas von der Existenz des Magnetfelds im nicht zugänglichen Raumgebiet spürt. Betrachten dazu ein Interferenzexperiment (Doppelspaltexperiment) mit einer den Elektronen unzugänglichen Spule in deren Innern $\vec{B} \neq 0$ gilt, wobei sonst $\vec{B} \equiv 0$ ist. [This leads to the question whether an electron that is confined to a region where \$\vec{A}\(\vec{r}\)\$ is non-vanishing, but where \$\vec{B}\(\vec{r}\)\$ is identical to zero is affected by the magnetic field outside its allowed region. Consider an interference experiment \(double-slit experiment\), where a solenoid causes a magnetic field in region not accessible to the electrons.](#)



betrachten zunächst die Lösung des Problems, bei der der Spalt 1 geöffnet ist, und der Spalt 2 geschlossen sei. *at first consider the solution for the case that slit 1 is open and slit 2 is closed*

$\psi_{1,0}(\vec{r})$ sei Wellenfunktion des Elektrons für $\vec{B} = 0$ in der Spule

$$\psi_{1,B}(\vec{r}) = \psi_{1,0}(\vec{r}) e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_1^{\vec{r}} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')} \quad (2.61)$$

ist dann Wellenfunktion mit eingeschaltetem \vec{B} -Feld. *is the wave function for the case that the magnetic field \vec{B} is switched on.*

Für Spalt 2 geöffnet und Spalt 1 geschlossen gilt entsprechend *In case slit 2 is open and slit 1 is closed it holds accordingly*

$$\psi_{2,B}(\vec{r}) = \psi_{2,0}(\vec{r}) e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_2^{\vec{r}} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')} \quad (2.62)$$

Wenn beide Spalte geöffnet sind, ist die Wellenfunktion durch die Superposition von $\psi_{1,B}$ und $\psi_{2,B}$ gegeben: *The wave function for two open slits is given by the*

superposition of $\psi_{1,B}$ and $\psi_{2,B}$:

$$\psi_B(\vec{r}) = \psi_{1,0}(\vec{r})e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_1 d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')} + \psi_{2,0}(\vec{r})e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_2 d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')} \quad (2.63)$$

$$= e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_2 d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')} \left\{ \psi_{1,0} e^{\frac{ie}{\hbar c} \left\{ \int_1 d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}') - \int_2 d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}') \right\}} + \psi_{2,0} \right\} \quad (2.64)$$

$\oint d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}') = \int d\vec{A} \cdot \underbrace{\vec{\nabla} \times \vec{A}}_{\vec{B}} = \Phi_B$
↑
magn. Fluß
magnetic flux

$$\psi_B(\vec{r}) = e^{\frac{ie}{\hbar c} \int_2 d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')} \left\{ \psi_{1,0}(\vec{r})e^{\frac{ie\Phi_B}{\hbar c}} + \psi_{2,0}(\vec{r}) \right\} \quad (2.65)$$

D.h. die Phasenrelation zwischen ψ_1 und ψ_2 wird bei Änderung des eingeschlossenen magnetischen Flusses Φ_B geändert, und somit wird auch das Interferenzbild verschoben. Dies gilt, obwohl die Elektronen nicht in den Bereich des endlichen Magnetfeldes gelangen können. Dies ist der Aharonov–Bohm–Effekt. Der experimentelle Nachweis findet sich zum Beispiel in (G. Möllenstedt, W. Bayh: *Messung der kontinuierlichen Phasenschiebung von Elektronenwellen im kraftfeldfreien Raum durch das magnetische Vektorpotential einer Luftspule*. In: Die Naturwissenschaften **49**, 81 (1962)).

Historische Anmerkung: Aharonov und Bohm veröffentlichten ihre Arbeit 1959. Werner Ehrenberg und Raymond E. Siday konnten den Effekt jedoch bereits 1949 voraussagen und bereits 1939 hat Walter Franz in den Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft auf diesen Effekt hingewiesen, siehe unten.

**Tagung des Gauvereins Ostland in Danzig
vom 18. bis 20. Mai 1939.**

5. Hr. **W. Franz** (Königsberg, Pr): Elektroneninterferenzen im Magnetfeld.

Nach de Broglie ist einem Elektron vom Impuls \mathbf{p} eine Wellenlänge $\lambda = h/|\mathbf{p}|$ zugeordnet, worin h die Plancksche Konstante. Im Magnetfeld tritt zum korpuskularen Impuls $m\mathbf{v}$ der Zusatz $e/c\mathfrak{A}$, wo \mathfrak{A} das Vektorpotential des Magnetfeldes. Da \mathfrak{A} nur bis auf einen Gradienten bestimmt ist, hat im Magnetfeld auch die Wellenlänge keinen eindeutigen physikalischen Sinn. Doch fällt diese Vieldeutigkeit bei der physikalischen Anwendung, der Interferenz, heraus. — Der Wellenzahlvektor eines Elektronenfeldes $\vec{k} = 2\pi/\lambda$, nach de Broglie also \mathbf{p}/h , ist der Gradient der Phase, muß also rot-frei sein. Im Magnetfeld ist nun $\text{rot}(m\mathbf{v}) \neq 0$; der Zusatz $e/c\mathfrak{A}$ stellt die Bedingung $\text{rot}\vec{k} = 0$ wieder her. — Bei der Beugung am Doppelspalt ergibt sich als Bedingung für ein Interferenzmaximum $m\cdot v\cdot \Delta s + e/c\Phi = n\cdot h$, worin Δs die geometrische Gangdifferenz der beiden möglichen korpuskularen Bahnen und Φ der magnetische Fluß durch die von ihnen eingeschlossene Fläche ist, n eine ganze Zahl. Hiernach ergibt sich in Übereinstimmung mit der Erfahrung, daß die Interferenz nur durch die Richtung bestimmt wird, in welcher die Elektronen die Spalte erreichen und verlassen. Die durch die Bahnkrümmung im Magnetfeld hervorgerufenen Gangdifferenzen werden durch den Zusatz $e/c\Phi$ aufgehoben.

Obviously the phase shift between ψ_1 and ψ_2 depends on the magnetic flux Φ_B , and the interference pattern will change accordingly. This holds, albeit the electrons cannot access the region of the non vanishing magnetic field. This is the so-called Aharonov–Bohm effect. It was experimentally confirmed, e.g. by Osakabe *et al.* in *Experimental confirmation of Aharonov-Bohm effect using a toroidal magnetic field confined by a superconductor*, Phys. Rev. A **34**, 815 (1986). The Aharonov–Bohm effect illustrates the physicality of electromagnetic potentials, whereas previously it was possible to argue that only the electromagnetic fields were physical and that the electromagnetic potentials were purely mathematical constructs (φ and \vec{A} being non-unique, in addition to not appearing in the Lorentz Force formula). The Aharonov–Bohm effect shows that the local \vec{E} and \vec{B} fields do not contain full information about the electromagnetic field, and the electromagnetic potential, φ and \vec{A} , must be used instead. By Stokes' theorem, the magnitude of the Aharonov–Bohm effect can be calculated using the \vec{E} and \vec{B} fields alone, or using the φ and \vec{A} potential alone. But when using just the \vec{E} and \vec{B} fields, the effect depends on the field values in a region from which the test particle is excluded,

not only classically but also quantum mechanically. In contrast, when using just the electromagnetic potential φ and \vec{A} , the effect only depends on the potential in the region where the test particle is allowed. Therefore we can either abandon the principle of locality (which most physicists are reluctant to do) or we are forced to accept that the electromagnetic potential - composed of φ and \vec{A} - offers a more complete description of electromagnetism than do the electric and magnetic fields. In classical electromagnetism the two descriptions were equivalent. With the addition of quantum theory, though, the electromagnetic potentials φ and \vec{A} are seen as being more fundamental. The \vec{E} and \vec{B} fields can be derived from the potential, but the potential, by gauge freedom, cannot be derived from the \vec{E} and \vec{B} fields. In a broader sense, the Aharonov–Bohm effect illustrates that the Lagrangian approach to dynamics, based on energies, is not just a computational aid to the Newtonian approach, based on forces. Thus the Aharonov–Bohm effect validates the view that forces are an incomplete way to formulate physics, and potential energies must be used instead.

Historical note: In their widely known 1959 paper on the "Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory," Aharonov and Bohm made the observation that it is well known that in classical mechanics, the motion of a particle can be affected only by forces acting at the particle at its well-defined location. They noted that this is not the case in quantum mechanics where two different paths or histories of a single particle can interfere and potentials can have measurable effect outside of classically allowed regions. They illustrate this effect for electromagnetic potentials by two examples: the electric and the magnetic effects upon particles moving in regions where no force exists, but where differences of the scalar or vector potentials along two possible paths of the particle can physically manifest themselves by affecting the resulting interference pattern of the particle. They further note that in the magnetic case for an infinitely long and narrow solenoid, and for which they provide an exact solution of the scattering problem, that such a scenario can be experimentally tested. There is some controversy about the priority of this discovery, given the earlier (1949) work by Ehrenberg, and Siday on "The Refractive Index in Electron Optics and the Principles of Dynamics." In a crucial passage in the conclusion of this paper, they remark that, "One might therefore expect wave-optical phenomena to arise which are due to the presence of a magnetic field, but not due to the magnetic field itself, i.e., which arise whilst the rays are in field-free regions only". Moreover, it is known that Walter Franz, who was a student of Arnold Sommerfeld, had predicted the "unorthodox nature of interference processes" associated with the Aharonov–Bohm effect already earlier: Franz wrote an article 1939 published in "Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft". In this article the subsequent A-B effect was preceded by 20 years, and this article can, therefore, be considered as the first publication of the phenomenon. Unfortunately, the significance of Franz's work was not appreciated by the English language science community, as it was not translated into English.

As can be seen below, the interpretation of the Aharonov–Bohm effect is still object of debate.

RAPID COMMUNICATIONS

PHYSICAL REVIEW A **86**, 040101(R) (2012)

Role of potentials in the Aharonov-Bohm effect

Lev Vaidman

Raymond and Beverly Sackler School of Physics and Astronomy, Tel-Aviv University, Tel-Aviv 69978, Israel
(Received 12 October 2011; revised manuscript received 12 January 2012; published 10 October 2012)

There is a consensus today that the the main lesson of the Aharonov-Bohm effect is that a picture of electromagnetism based on the local action of the field strengths is not possible in quantum mechanics. Contrary to this statement, it is argued here that when the source of the electromagnetic potential is treated in the framework of quantum theory, the Aharonov-Bohm effect can be explained without the notion of potentials. It is explained by local action of the field of the electron on the source of the potential. The core of the Aharonov-Bohm effect is the same as the core of quantum entanglement: the quantum wave function describes all systems together.

DOI: [10.1103/PhysRevA.86.040101](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.040101)

PACS number(s): 03.65.Ta, 03.65.Ud, 03.65.Vf

PHYSICAL REVIEW A **92**, 026101 (2015)

Comment on “Role of potentials in the Aharonov-Bohm effect”

Yakir Aharonov

School of Physics and Astronomy, Tel Aviv University, Tel Aviv 6997801, Israel
and Schmid College of Science, Chapman University, Orange, California 92866, USA

Eliahu Cohen

School of Physics and Astronomy, Tel Aviv University, Tel Aviv 6997801, Israel

Daniel Rohrlich*

Department of Physics, Ben-Gurion University of the Negev, Beersheba 8410501, Israel
(Received 19 February 2015; revised manuscript received 4 June 2015; published 31 August 2015)

Are the electromagnetic scalar and vector potentials dispensable? Vaidman [*Phys. Rev. A* **86**, 040101(R) (2012)] has suggested that local interactions of gauge-invariant quantities, e.g., magnetic torques, suffice for the description of all quantum electromagnetic phenomena. We analyze six thought experiments that challenge this suggestion. All of them have explanations in terms of *local* interactions of *gauge-dependent* quantities, and, in addition, some have explanations in terms of *nonlocal* interactions of *gauge-invariant* quantities. We claim, however, that two of our examples have no gauge-invariant formal description and that, in general, no *local* description can dispense with electromagnetic potentials.

DOI: [10.1103/PhysRevA.92.026101](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.026101)

PACS number(s): 03.65.Ta, 03.65.Ud, 03.65.Vf

PHYSICAL REVIEW A **92**, 026102 (2015)

Reply to “Comment on ‘Role of potentials in the Aharonov-Bohm effect’”

Lev Vaidman

Raymond and Beverly Sackler School of Physics and Astronomy, Tel Aviv University, Tel Aviv 69978, Israel

(Received 15 July 2015; published 31 August 2015)

The preceding Comment challenged my claim that potentials might be just auxiliary mathematical tools and that they are not necessary for explaining physical phenomena. The Comment did not confront my explanation without the potentials of the Aharonov-Bohm effects that appeared in the original article, but stated that I cannot apply this explanation for seven other examples. In my reply, using my method, I provide explanations of one of the examples, show that two other examples are not relevant, and agree that the remaining examples require further analysis. However, I argue that none of the examples provides robust counterexamples to my claim, similar to the original Aharonov-Bohm setups which were explained in my article, so the Comment does not refute my claim.

DOI: [10.1103/PhysRevA.92.026102](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.026102)

PACS number(s): 03.65.Ta, 03.65.Ud, 03.65.Vf

3 Der Elektronenspin

The electron spin

3.1 Spinoren

Spinors

Stern–Gerlach–Experiment: Elektron hat Eigendrehimpuls, Spin Stern-Gerlach experiment: electron has an intrinsic angular momentum (to be distinguished from the orbital angular momentum, which can vary and depends on the presence of other particles), the so-called spin

Spin beschrieben durch vektoriellen Spinoperator Spin is described by an operator with three components that represent the three cartesian components of spin angular momentum

$$\hat{S} = \hat{S}_x \vec{e}_x + \hat{S}_y \vec{e}_y + \hat{S}_z \vec{e}_z \quad (3.1)$$

mit Vertauschungsrelationen these operators possess commutation relations analogous to those of the three corresponding orbital angular momentum operators

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \epsilon_{ijk} i\hbar \hat{S}_k \quad (3.2)$$

$$\Rightarrow [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0 \quad (\text{Übungsaufgabe!}) \quad (3.3)$$

$\Rightarrow \hat{S}^2$ und \hat{S}_z haben gemeinsames System von Eigenvektoren $\Rightarrow \hat{S}^2$ and \hat{S}_z have a set of joint eigenvectors

$$\hat{S}_z |l_s, m_s\rangle = \hbar m_s |l_s, m_s\rangle \quad \text{mit with } m_s = -l_s, -l_s + 1, \dots, l_s \quad (3.4)$$

$$\hat{S}^2 |l_s, m_s\rangle = \hbar^2 l_s(l_s + 1) |l_s, m_s\rangle \quad \text{mit with } l_s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (3.5)$$

Experiment: es gibt nur 2 Einstellmöglichkeiten Experiment: observe one of two possible values, either spin up or spin down

$$\Rightarrow l_s = \frac{1}{2}, \quad m_s \in \left\{ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\} \quad (3.6)$$

Da die QZ l_s fest ist, sind die Spin–EV eindeutig durch den Wert von von m_s bestimmt Since the qn l_s does not vary, the eigenvectors are completely determined by the value of m_s

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\chi_+\rangle \equiv |+\rangle \equiv |\varphi_\uparrow\rangle \quad (3.7)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\chi_-\rangle \equiv |-\rangle \equiv |\varphi_\downarrow\rangle \quad (3.8)$$

damit EW-Gleichungen [This leads to eigenvalue equations](#)

$$\hat{S}_z|\varphi_\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\varphi_\uparrow\rangle, \quad \hat{S}^2|\varphi_\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\varphi_\uparrow\rangle \quad (3.9)$$

$$\hat{S}_z|\varphi_\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\varphi_\downarrow\rangle, \quad \hat{S}^2|\varphi_\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\varphi_\downarrow\rangle \quad (3.10)$$

allg. Zustandsvektor $|\psi\rangle$ eines Elektrons muß sich als Linearkombination von $|\varphi_\uparrow\rangle$ und $|\varphi_\downarrow\rangle$ darstellen lassen [the general state vector \$|\psi\rangle\$ that describes an electron must be given as a linear combination of \$|\varphi_\uparrow\rangle\$ and \$|\varphi_\downarrow\rangle\$](#)

$$|\psi\rangle = \underbrace{|\psi_+\rangle}_{\swarrow}|\varphi_\uparrow\rangle + \underbrace{|\psi_-\rangle}_{\nearrow}|\varphi_\downarrow\rangle \quad (3.11)$$

Wahrscheinlichkeitsamplitude
 für das Auftreten der
 jeweiligen Spinorientierung +
 spinunabh. Information über
 e^- [probability amplitude of
 the respective spin orientation
 and spin independent
 information on \$e^-\$](#)

Können die Spin-EV (u.a.) durch zweidimensionale Vektoren darstellen [the state space corresponding to the spin observable is two-dimensional](#)

$$|\varphi_\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varphi_\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

damit Ortsdarstellung von [thus position representation of \$|\psi\rangle\$](#)

$$\psi(x) = \psi_+(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_-(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}}_{\text{“Spinoren” “spinors”}} \quad (3.13)$$

entsprechend dualer Vektor [the corresponding vector in dual space given as](#)

$$\langle\psi| \rightarrow \psi^+ = \underbrace{(\psi_+^*(x), \psi_-^*(x))}_{\text{“Spinoren” “spinors”}} \quad (3.14)$$

Interpretation? [interpretation?](#)

$$1 \stackrel{!}{=} \langle\psi|\psi\rangle \quad (3.15)$$

$$= (\langle\psi_+|\langle\varphi_\uparrow| + \langle\psi_-|\langle\varphi_\downarrow|) \cdot (|\psi_+\rangle|\varphi_\uparrow\rangle + |\psi_-\rangle|\varphi_\downarrow\rangle) \quad (3.16)$$

$$= \langle\psi_+|\psi_+\rangle\langle\varphi_\uparrow|\varphi_\uparrow\rangle + \langle\psi_-|\psi_+\rangle\langle\varphi_\downarrow|\varphi_\uparrow\rangle + \langle\psi_+|\psi_-\rangle\langle\varphi_\uparrow|\varphi_\downarrow\rangle + \langle\psi_-|\psi_-\rangle\langle\varphi_\downarrow|\varphi_\downarrow\rangle \quad (3.17)$$

$|\varphi_\uparrow\rangle, |\varphi_\downarrow\rangle$ sind EV zum hermiteschen Operator **are eigenvectors of the hermitian operator \hat{S}_z**

\Rightarrow sind orthogonal **and therefore orthogonal**

$$\langle\varphi_\uparrow|\varphi_\uparrow\rangle = \langle\varphi_\downarrow|\varphi_\downarrow\rangle = 1 \quad (3.18)$$

$$\langle\varphi_\uparrow|\varphi_\downarrow\rangle = 0 \quad (3.19)$$

(klar auch nach Darstellung mit **already clear from the representation using the vectors $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$**)

$$\Rightarrow \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi_+|\psi_+\rangle + \langle\psi_-|\psi_-\rangle \quad (3.20)$$

$$\downarrow \text{Ortsdarstellung} \quad \text{position representation} \quad \downarrow \quad (3.21)$$

$$\int d^3\vec{x} \psi^+(\vec{x})\psi(\vec{x}) = \int d^3\vec{x} |\psi_+(\vec{x})|^2 + \int d^3\vec{x} |\psi_-(\vec{x})|^2 \quad (3.22)$$

damit Interpretation von $|\psi_\pm(\vec{x})|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort \vec{x} ein Elektron mit Spin \uparrow / \downarrow zu finden **$|\psi_\pm(\vec{x})|^2$ is thus the probability to find an electron with spin \uparrow / \downarrow at the position \vec{x}**

3.2 Spinoperatoren, Paulimatrizen Spin operators, Pauli matrices

suchen Darstellung des Operators \hat{A} , der einen Spinzustand $|\chi\rangle$ in einen anderen Spinzustand $|\chi'\rangle$ überführt **in search for the operator \hat{A} that transforms the spin state $|\chi\rangle$ into another spin state $|\chi'\rangle$**

$$|\chi'\rangle = \hat{A}|\chi\rangle \quad | \langle\chi_i| \quad (3.23)$$

$$\langle\chi_i|\chi'\rangle = \langle\chi_i|\hat{A}|\chi\rangle \quad (3.24)$$

$$= \sum_{j=\pm} \underbrace{\langle\chi_i|\hat{A}|\chi_j\rangle}_{A_{ij}} \langle\chi_j|\chi\rangle \quad (3.25)$$

A_{ij} ...Matrixdarstellung von **matrix representation of \hat{A}**

damit Matrixgleichung **thus matrix equation**

$$\begin{pmatrix} \langle\chi_+|\chi'\rangle \\ \langle\chi_-|\chi'\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{++} & A_{+-} \\ A_{-+} & A_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\chi_+|\chi\rangle \\ \langle\chi_-|\chi\rangle \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

\nwarrow \nearrow
 Spindarstellung von $|\chi\rangle, |\chi'\rangle$

jetzt speziell Matrixdarstellung von **in particular matrix representation of $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$**

führen Leiteroperator ein (vgl. QM I) [introduce ladder operators](#) (cf. QM I)

$$\hat{S}^{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \quad (3.27)$$

diese erfüllen [which satisfy](#)

$$\hat{S}^{\pm}|l_s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{(l_s \mp m_s)(l_s \pm m_s + 1)}|l_s, m_s \pm 1\rangle \quad (3.28)$$

(Beweis: QM I [proof: QM I](#))

speziell [in particular](#) $l_s = \frac{1}{2}$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$

$$\left. \begin{aligned} \hat{S}^+|\chi_+\rangle &= 0 \\ \hat{S}^+|\chi_-\rangle &= \hbar|\chi_+\rangle \\ \hat{S}^-|\chi_+\rangle &= \hbar|\chi_-\rangle \\ \hat{S}^-|\chi_-\rangle &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.29)$$

damit Matrixdarstellung von [thus matrix representation of](#) \hat{S}^{\pm}

$$\hat{S}^{\pm} \longrightarrow \begin{pmatrix} \langle\chi_+|\hat{S}^{\pm}|\chi_+\rangle & \langle\chi_+|\hat{S}^{\pm}|\chi_-\rangle \\ \langle\chi_-|\hat{S}^{\pm}|\chi_+\rangle & \langle\chi_-|\hat{S}^{\pm}|\chi_-\rangle \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{S}^+ &\longrightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}^- &\longrightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \text{(Gl. (3.29) + Orthogonalität Eq.(3.29) + orthogonality)} \quad (3.31)$$

damit [thus](#)

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}^+ + \hat{S}^-) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

$$\hat{S}_y = -\frac{i}{2}(\hat{S}^+ - \hat{S}^-) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

für \hat{S}_z gilt [it holds](#)

$$\hat{S}_z|\chi_{\pm}\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\chi_{\pm}\rangle \quad (3.34)$$

wird mit [substituting](#) $|\chi_+\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\chi_-\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ erfüllt für [one finds](#)

$$\hat{S}_z \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

dimensionslose Darstellung des Spinoperators [dimensionless representation](#)

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \quad \text{mit with} \quad \hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z) \quad (3.35)$$

wobei die σ die sogenannten Pauli'schen Spinmatrizen sind [in terms of the so-called Pauli spin matrices](#) σ

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

gilt it holds

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{klar obviously}) \quad (3.37)$$

$$\Rightarrow \hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) \quad (3.38)$$

$$= \frac{3}{4} \hbar^2 \hat{I} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \hat{I} \quad (3.39)$$

D.h. Messung von \hat{S}^2 führt immer auf $l_s(l_s + 1)$, wie erwartet. [As expected, any measurement of \$\hat{S}^2\$ yields \$l_s\(l_s + 1\)\$.](#)

Bem.: Die Pauli-Matrizen bilden zusammen mit der Einheitsmatrix eine vollständige Basis im Raum aller komplexen 2x2-Matrizen [Remark: The Pauli matrices, along with the identity matrix, form a complete orthogonal basis for the complex Hilbert space of all 2x2 matrices](#)

3.3 Spin im Magnetfeld Spin in a magnetic field

Experiment: [experiment:](#)

$$\vec{\mu}_s = -g_s \mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \quad (3.40)$$

mit with $g_s = 2$, $\mu_B = \frac{e}{2mc} \hbar$
 d.h. i.e.

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \vec{S} \quad (3.41)$$

Energie eines mag. Moments im homogenen B-Feld gegeben durch [Magnetic moment in a homogenous B field has an energy](#)

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (3.42)$$

jetzt Übergang zu Spinoperatoren [consider now spin operators](#)

$$\hat{S}, \hat{H}_s = \frac{e}{mc} \vec{B} \cdot \hat{S}$$

⇒ stationäre SG

$$\frac{e}{mc} \vec{B} \cdot \hat{S} \varphi = E \varphi \quad (3.43)$$

bzw. zeitabhängige SG [or time-dependent SE, respectively](#)

$$\frac{e}{mc} \vec{B} \cdot \hat{S} \varphi = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (3.44)$$

mit [where](#)

$$\vec{B} = (B_x, B_y, B_z) \quad (3.45)$$

und [and](#)

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (3.46)$$

folgt [it follows](#)

$$\hat{H}_s = \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc}}_{\mu_B} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

jetzt Spindynamik im \vec{B} -Feld [now spin dynamics in magnetic field \(\$\vec{B}\$ \)](#)

speziell [consider](#) $\vec{B} = (0, 0, B_z)$

$$\Rightarrow \hat{H}_s = \frac{e\hbar}{2mc} \begin{pmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

damit SG [enter SE](#)

$$\mu_B B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \varphi = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (3.49)$$

allg. Lösung der SG gegeben durch Superposition der stationären Lösung mit Phasenfaktoren $e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t}$ (vgl. QM I) [general solution of the SE given by the superposition of the stationary solutions with the respective phase factors \$e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t}\$ \(cf. QM I\)](#)
 d.h. hier [i.e.](#)

$$\varphi(t) = a e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\uparrow} t} \varphi_{\uparrow} + b e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\downarrow} t} \varphi_{\downarrow} \quad (3.50)$$

bekannt: [known:](#)

$$E_{\uparrow} = \underbrace{\frac{g_s}{2}}_2 \underbrace{\mu_B}_{\frac{e}{2mc}\hbar} \underbrace{m_s^{\uparrow}}_{\frac{1}{2}} B_z = \frac{e\hbar}{2mc} B_z \quad (3.51)$$

mit Abkürzung [using abbreviation](#)

$\omega_0 = \frac{e}{mc} B_z$ (... Zyklotronfrequenz [cyclotron frequency](#)) folgt [it follows](#)

$$E_{\uparrow} = \frac{\hbar}{2} \omega_0, \quad \text{entsprechend} \quad (3.52)$$

$$E_{\downarrow} = -\frac{\hbar}{2} \omega_0 \quad (3.53)$$

damit allg. Lösung: [general solution thus reads](#)

$$\varphi(t) = ae^{-i\omega_0 t/2}\varphi_\uparrow + be^{i\omega_0 t/2}\varphi_\downarrow \quad (3.54)$$

“Messung” einer Spinkomponente entspricht Erwartungswertbildung mit dem entsprechenden Operator [Measured spin component corresponds to the expectation value of the respective parameter](#)

jetzt Erwartungswert von S_z [expectation value of \$S_z\$](#) :

$$\langle S_z \rangle = \langle \varphi | \hat{S}_z | \varphi \rangle \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} &= \underbrace{(a^* e^{i\omega_0 t/2}, b^* e^{-i\omega_0 t/2})}_{\langle \varphi |} \underbrace{\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\hat{S}_z} \underbrace{\begin{pmatrix} a e^{-i\omega_0 t/2} \\ b e^{i\omega_0 t/2} \end{pmatrix}}_{| \varphi \rangle} \\ &\text{(Vgl. Spinoren in 3.1)} \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$= \frac{\hbar}{2} (|a|^2 - |b|^2) \dots \text{zeitlich konstant} \quad (3.57)$$

analog [analogously](#)

$$\langle S_{x,y} \rangle \sim \cos \omega_0 t, \sin \omega_0 t \quad (\text{Übung}) \quad (3.58)$$

“Präzessionsbewegung” q.m. gerechtfertigt! [Describes spin precession in a magnetic field!](#)

3.4 Transformation von Spinoren [Spinor transformations](#)

Bei einer endlichen Drehung im \mathbb{R}^3 gilt für Vektorkomponenten die Transformationsvorschrift [A finite rotation in three dimensions transforms the vector components as](#)

$$x'_i = a_{ik} x_k \quad (3.59)$$

wobei die Drehmatrix orthogonal ist, d.h. [the rotation matrix is orthogonal, i.e.](#),

$$a_{ik} a_{ij} = \delta_{kj} \quad (3.60)$$

Für infinitesimale Drehung gilt [In case of infinitely small rotations it holds](#)

$$a_{ik} = \delta_{ik} + \epsilon_{ik} \quad (3.61)$$

wobei ϵ_{ik} eine infinitesimale kleine Größe ist. Eine endliche Drehung kann aus einer Aufeinanderfolge infinitesimaler Drehungen konstruiert werden [here \$\epsilon_{ik}\$ is an infinitely small quantity. A finite rotation may be seen as a succession of small rotations](#)

$$\underbrace{a_{ik} a_{ij}}_{\delta_{jk}} = (\delta_{ik} + \epsilon_{ik})(\delta_{ij} + \epsilon_{ij}) = \delta_{kj} + \epsilon_{kj} + \epsilon_{jk} + \epsilon_{ik} \epsilon_{ij} \quad (3.62)$$

Wegen Infinitesimalität kann der quadratische Term vernachlässigt werden und es folgt [The squared term may be neglected. Thus it holds](#)

$$\epsilon_{jk} = -\epsilon_{kj} \quad (3.63)$$

D.h. die 3x3 Matrix ϵ ist antisymmetrisch und ist durch 3 Größen bestimmt [The three-dimensional Matrix \$\epsilon\$ is antisymmetric and determined by three entries](#)

$$\epsilon_{12} = \alpha_z, \quad \epsilon_{23} = \alpha_x, \quad \epsilon_{31} = \alpha_y \quad (3.64)$$

wobei die Größen $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ die infinitesimalen Drehwinkel um die jeweiligen kartesischen Achsen sind (Beweis: Übung) [Here \$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z\$ are the infinitely small rotation angles about the respective axes \(proof: exercises\)](#)

Die Transformationseigenschaften von Spinoren $|\psi\rangle$ erhalten wir aus der Forderung, daß der Erwartungswert [The spinor \$|\psi\rangle\$ transformation properties are obtained from the assertion that](#)

$$\langle \vec{S} \rangle = \langle \psi | \hat{S} | \psi \rangle \quad (3.65)$$

ein Vektor ist, und sich wie ein Vektor transformiert. [transforms like a vector](#)
 vgl. cf. 3.2 $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$, d.h. Komponentenweise gilt für [for the components holds](#)

$$\langle \sigma \rangle_i = \langle \psi | \hat{\sigma}_i | \psi \rangle \quad (3.66)$$

unter einer infinitesimalen Rotation [upon an infinitesimal rotation](#)

$$\langle \sigma \rangle'_i = (\delta_{ik} + \epsilon_{ik}) \langle \sigma \rangle_k \quad (3.67)$$

$$= \langle \sigma \rangle_i + \epsilon_{ik} \langle \sigma \rangle_k \quad (3.68)$$

Diese Transformation kann auch durch unitäre Transformation der Zustandsvektoren beschrieben werden [The transformation may be described as well as an unitary transformation acting on the state vectors](#)

$$|\psi'\rangle = \hat{T} |\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{T}^\dagger \hat{T} = \hat{I} \quad (3.69)$$

\hat{T} ist infinitesimale Trafo, schreiben [is infinitesimal transformation, write](#)

$$\hat{T} = \hat{I} + \hat{t} \quad (3.70)$$

mit $\hat{t} \dots$ infinitesimaler Operator, Unitarität fordert [here \$\hat{t}\$ is infinitesimal operator, require unitarity](#)

$$(\hat{I} + \hat{t}^\dagger)(\hat{I} + \hat{t}) = \hat{I} + \hat{t}^\dagger + \hat{t} + \underbrace{\hat{t}^\dagger \hat{t}}_{\rightarrow 0} = \hat{I} \quad (3.71)$$

$\Rightarrow \hat{t}^+ = -\hat{t}$, d.h. \hat{t} ist antihermitesch i.e., d.h. \hat{t} is antihermitian
 damit thus

$$\langle \sigma \rangle'_i = \langle \psi' | \hat{\sigma}_i | \psi' \rangle \quad (3.72)$$

$$= \langle \psi | \hat{T}^+ \hat{\sigma}_i \hat{T} | \psi \rangle \quad (3.73)$$

$$= \langle \psi | (\hat{I} + \hat{t}^+) \hat{\sigma}_i (\hat{I} + \hat{t}) | \psi \rangle \quad (3.74)$$

nutzen $\hat{t}^+ = -\hat{t}$, vernachlässigen quadratischen Terme exploit that $\hat{t}^+ = -\hat{t}$, neglect squared terms

$$\langle \sigma \rangle'_i = \langle \sigma \rangle_i + \langle \psi | \hat{\sigma}_i \hat{t} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{t} \hat{\sigma}_i | \psi \rangle \quad (3.75)$$

$$\parallel$$

$$\langle \sigma \rangle_i + \epsilon_{ik} \langle \sigma \rangle_k$$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{\sigma}_i \hat{t} - \hat{t} \hat{\sigma}_i - \epsilon_{ik} \hat{\sigma}_k | \psi \rangle = 0 \quad (3.76)$$

muß für jeden Zustand $|\psi\rangle$ gelten, damit Operatorgleichung holds for any state vector $|\psi\rangle$, thus operator equation

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{t}] = \epsilon_{ik} \hat{\sigma}_k \quad (3.77)$$

Machen jetzt Ansatz using the ansatz

$$\hat{t} = \beta_k \hat{\sigma}_k \quad (3.78)$$

einsetzen in Operatorgleichung in the above operator equation

$$[\hat{\sigma}_i, \beta_k \hat{\sigma}_k] = \epsilon_{ik} \hat{\sigma}_k \quad (3.79)$$

$$\parallel$$

$$\beta_k [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_k]$$

$2i\epsilon_{ikj} \hat{\sigma}_j$ ← folgt aus Vertauschungsrelation für Spinoperatoren follows from commutation relation for spin operators

Koeffizientenvergleich liefert (Umbenennung links $k \leftrightarrow j$) rename indices $k \leftrightarrow j$, compare coefficients

$$\epsilon_{ik} = 2i\epsilon_{ijk} \beta_j \quad (3.80)$$

und damit and obtain

$$\beta_1 = \frac{i}{2} \epsilon_{23}, \quad \beta_2 = \frac{i}{2} \epsilon_{31}, \quad \beta_3 = \frac{i}{2} \epsilon_{12} \quad (3.81)$$

oder kompakt [or in more compact notation](#)

$$\hat{T} = \hat{I} + \frac{i}{2} \vec{\alpha} \hat{\sigma} \quad (3.82)$$

mit [here](#)

$$\vec{\alpha} \hat{\sigma} = \alpha_x \hat{\sigma}_x + \alpha_y \hat{\sigma}_y + \alpha_z \hat{\sigma}_z \quad (3.83)$$

Damit Transformation des Zustands $|\psi\rangle$ bei infinitesimaler Drehung gegeben durch
[Thus transformation of the state vector \$|\psi\rangle\$ upon infinitesimal rotation given by](#)

$$|\psi'\rangle = \left(\hat{I} + \frac{i}{2} \vec{\alpha} \hat{\sigma} \right) |\psi\rangle \quad (3.84)$$

Beispiel: Drehung um z-Achse [Example: rotation about the z axis](#)

Sei [Assume](#) $\alpha_x = \alpha_y = 0$, $\alpha_z = \alpha$

$$|\psi'\rangle = \begin{pmatrix} \psi'_+ \\ \psi'_- \end{pmatrix} = \left(\hat{I} + \frac{i}{2} \alpha \hat{\sigma}_z \right) \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} \quad (3.85)$$

mit [here](#) $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (vgl. [cf. 3.2](#)) folgt [thus](#)

$$\psi'_+ = \left(1 + \frac{i}{2} \alpha \right) \psi_+, \quad \psi'_- = \left(1 - \frac{i}{2} \alpha \right) \psi_- \quad (3.86)$$

Endliche Drehung durch wiederholte Anwendung der Transformation [Finite rotation as successive application of infinitely small transformation](#)

$$\psi'_+ = \left(1 + \frac{i}{2} \alpha \right)^N \psi_+, \quad \psi'_- = \left(1 - \frac{i}{2} \alpha \right)^N \psi_- \quad (3.87)$$

Jetzt [Now](#) $N \rightarrow \infty$, $\alpha = \frac{\Phi}{N}$, dann ausnutzen, daß [exploiting](#)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{i}{2} \frac{\Phi}{N} \right)^N = e^{i \frac{\Phi}{2}} \quad (3.88)$$

damit [thus](#)

$$\psi'_+ = e^{i \frac{\Phi}{2}} \psi_+ \quad (3.89)$$

$$\psi'_- = e^{-i \frac{\Phi}{2}} \psi_- \quad (3.90)$$

$$(3.91)$$

Bei Transformation von Spinoren geht nur der halbe Drehwinkel ein \Rightarrow Spinoren sind keine Vektoren! Allgemein ergibt sich für Teilchen mit halbzahligem Spin, die

Fermionen, bei einer vollen Drehung um 2π der Faktor -1 für die Wellenfunktion. D.h. diese Teilchen wechseln bei einer vollen Drehung das Vorzeichen ihrer quantenmechanischen Phase bzw. sie müssen zwei volle Drehungen durchführen, um wieder in ihren Ausgangszustand zu gelangen. **Thus the spinor rotation will rotate the spinor through an angle one-half the measure of the angle of the corresponding vector rotation. Spinors do not transform as vectors do!**

Betrachten **Consider** $\Phi = 2\pi$

$$\Rightarrow \psi'_+ = -\psi_+ \quad (3.92)$$

$$\psi'_- = -\psi_- \quad (3.93)$$

Übungsaufgabe: Welche Implikation hat eine Rotation um 2π für die Erwartungswerte? **Exercise: What implication for any expectation value result from a spinor rotation through an angle 2π**

3.5 Pauli-Gleichung Pauli equation

früher Hamiltonoperator für Elektronen im elektromagnetischen Feld (2.2) **Earlier we derived the Hamiltonian for electrons in an electromagnetic field (2.2)**

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\vec{r}, t) \quad (3.94)$$

kann in eine Form gebracht werden, die den Bahndrehimpuls enthält **may be transformed such that it contains the orbital angular momentum**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} \hat{L} \cdot \vec{B} + e\varphi + \mathcal{O}(\vec{A}^2) \quad (3.95)$$

Wenn wir jetzt auch die Wechselwirkung des el.mag. Feldes mit Spin berücksichtigen, ist eine Erweiterung um **Now we consider the interaction energy between spin and electromagnetic field and extend the Hamiltonian accordingly**

$$\hat{H}_{\text{Spin}} = -\frac{e}{mc} \hat{S} \cdot \vec{B} \quad (3.96)$$

erforderlich (anderer Vorfaktor als bei \hat{L} wegen $g_s = 2$, exp. Befund)

d.h. **From experiment we know that $g_s = 2$, therefore expression different from the one for the orbital angular momentum. Altogether we obtain**

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + e\varphi(\vec{r}, t) - \frac{e}{mc} \hat{S} \cdot \vec{B} \quad (3.97)$$

damit sogenannte Pauli-Gleichung, it results in the Pauli equation, also known as the Schrödinger-Pauli equation

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r}, t)\right)^2\psi + e\varphi(\vec{r}, t)\psi - \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\vec{B}\psi \quad (3.98)$$

Dabei ist ψ die Spinorwellenfunktion $\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$ Here ψ is the is the two-component spinor wavefunction $\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$

4 Relativistische Quantenmechanik Relativistic Quantum Mechanics

4.1 Die Dirac–Gleichung Dirac equation

Erinnerung QM I: Schrödingergleichung erhalten durch Identifizierung der Zeita-
 bleitung mit dem Energieoperator [Reminder QM I: Schrödinger equation motiva-
 ted by means of identifying the time derivative with the energy operator](#)

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (4.1)$$

und Übertragung der klassischen Relation [and using the relation from classical
 physics](#)

$$E = H \quad (4.2)$$

auf die Evolutionsgleichung [together with the equation of motion](#)

$$\hat{E}\psi = \hat{H}\psi \quad (4.3)$$

wobei der Hamiltonoperator aus der klass. Hamiltonfunktion konstruiert wird,
 z.B. durch die Ersetzung [Here the Hamiltonian operator is obtained from the
 Hamiltonian function by means of substitutions like](#)

$$\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (4.4)$$

in der Ortsdarstellung. [in the position representation.](#) Because relativity treats
 space and time as a whole, a relativistic generalization of the SE requires that
 space and time derivatives must enter symmetrically, as they do in the Maxwell
 equations that govern the behavior of light – the equations must be differentially
 of the same order in space and time.

Ausgehend von der Hamiltonfunktion eines freien relativistischen Teilchens hätte
 der Hamiltonoperator die Struktur [Assuming the Hamiltonian function of a free
 relativistic particle one expects a Hamiltonian operator of the following form](#)

$$\hat{H} = \sqrt{c^2 \hat{\vec{p}}^2 + m^2 c^4} \quad (4.5)$$

wegen $[\hat{E}, \hat{H}] = 0$ gilt [Because of \$\[\hat{E}, \hat{H}\] = 0\$ it holds](#)

$$\begin{array}{ccc} \hat{E}^2 \psi = \hat{E} \hat{H} \psi = \hat{H} \hat{E} \psi = \hat{H}^2 \psi & & (4.6) \\ \parallel & & \parallel \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi & & \{-\hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4\} \psi \end{array}$$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right\} \psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (4.7)$$

$$\text{Klein-Gordon-Gleichung Klein-Gordon equation} \quad (4.8)$$

Da Raum- und Zeitableitung jetzt in der gleichen Ordnung auftreten, ist diese Gleichung ein Kandidat, um das quantenmechanische Verhalten relativistischer Teilchen (und zwar mit Spin Null) zu beschreiben. *Because it is of the same order in time and position, the Klein-Gordon equation may be suitable to describe relativistic particles. In fact, the Klein-Gordon equation correctly describes spinless particles like the pion.*

Allerdings weicht die Zeitableitung in zweiter Ordnung von der sehr erfolgreichen Schrödingergleichung ab. Versuchen daher eine Gleichung zu konstruieren, die die Zeit- und Raumableitungen in erster Ordnung enthält. *However, the Klein-Gordon equation cannot be straightforwardly interpreted as a Schrödinger equation for a quantum state, because it is second order in time (and because it does not admit a positive definite conserved probability density).*

Machen den Ansatz *In order to restore a "Schrödinger'-like" equation, we start from the ansatz*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = c[\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z + \beta mc] \psi \quad (4.9)$$

$$= c \left[\sum_{\mu=1}^3 \alpha_{\mu} \hat{p}_{\mu} + \beta mc \right] \psi, \quad (4.10)$$

wobei die Matrizen α_{μ} und β noch zu bestimmen sind. Für die Wellenfunktion machen wir den Ansatz eines Spaltenvektors *where the matrices α_{μ} and β still need to be determined. For the wave function we assume a vector function*

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \\ \vdots \\ \psi_N(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

der noch unbekannt Dimension N . *of hitherto unknown dimension N .*

Um die Koeffizienten α zu bestimmen, bilden wir die zweite Zeitableitung *In order to determine the coefficients we calculate the second time derivative*

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = c^2 \left[\sum \alpha_{\mu} \hat{p}_{\mu} + \beta mc \right] \left[\sum \alpha_{\nu} \hat{p}_{\nu} + \beta mc \right] \psi \quad (4.12)$$

ersetzen Impulsoperator $\hat{p}_\mu \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ und multiplizieren aus, dabei ausnutzen, daß
 replace the momentum operator $\hat{p}_\mu \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu}$, expand the expression and exploit
 that

$$\sum_{\mu, \nu=1}^3 \alpha_\mu \alpha_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^3 \left(\alpha_\mu \alpha_\nu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} + \alpha_\nu \alpha_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right) \quad (4.13)$$

und erhalten hence

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} (\alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu) \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \psi + \frac{imc}{\hbar} \sum_{\mu} (\alpha_\mu \beta + \beta \alpha_\mu) \frac{\partial}{\partial x_\mu} \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \beta^2 \psi. \quad (4.14)$$

Fordern jetzt, daß jede Komponente von ψ der Klein–Gordon–Gleichung genügt.
 Das liefert folgende Bedingungen Next we require that each component of ψ satisfies the Klein-Gordon equation. This leads to the conditions

$$\left. \begin{aligned} \alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu &= 2\delta_{\mu\nu} \hat{I} & (*) \\ \alpha_\mu \beta + \beta \alpha_\mu &= 0 & (**) \\ \beta^2 &= \hat{I} & (***) \end{aligned} \right\} \text{für for } \nu, \mu = x, y, z$$

Weiter gilt, daß Furthermore,

$$\hat{H} = c \left\{ \sum_{\mu} \alpha_\mu \hat{p}_\mu + \beta mc \right\} \quad (4.15)$$

hermitesch sein muß, dann müssen auch α_μ und β hermitesch sein, d.h. sie haben
 reelle Eigenwerte. is a hermitian operator. Therefore also the matrices α_μ and β
 must be hermitian, i.e., they have real eigenvalues.

Das kann man noch weiter einschränken. Für $\mu = \nu$ folgt aus (*) $\alpha_\mu^2 = \hat{I}$, außerdem
 gilt (**), d.h. α_μ und β können als Eigenwerte nur ± 1 haben. Setting $\mu = \nu$ in (*)
 shows that $\alpha_\mu^2 = \hat{I}$. In addition, we see from (***) that ± 1 are the only possible
 eigen values for α_μ and β .

$$\beta(**) \Rightarrow \beta \alpha_\mu \beta + \beta^2 \alpha_\mu = 0 \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} &\parallel \\ &\hat{I} \\ \Rightarrow \alpha_\mu &= -\beta \alpha_\mu \beta \end{aligned} \quad (4.17)$$

Daraus folgt für die Spur der Matrizen α_μ
 Therefore it holds for the traces ($\text{Sp} \equiv \text{Tr}$) of the matrices

$$\text{Sp } \alpha_\mu = - \text{Sp } (\beta \alpha_\mu \beta) = - \text{Sp } (\beta^2 \alpha_\mu) \quad (4.18)$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ \text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA) \end{array} \quad \parallel \hat{I}$$

$$= - \text{Sp } \alpha_\mu \quad (4.19)$$

$$\Rightarrow \text{Sp } \alpha_\mu = 0 \quad (4.20)$$

Da nur Eigenwerte ± 1 zulässig sind, muß die Dimension N der Matrizen α_μ gerade sein. Since all eigenvalues are ± 1 , the dimension N of the matrices must be even.

Die kleinste Dimension, die alle Bedingungen $(^*)/(^{**})/(^{***})$ erfüllt, ist $N = 4$. Eine mögliche Lösung ist $N = 4$ is the smallest dimension N which satisfies $(^*)/(^{**})/(^{***})$. One possible solution is given by

$$\alpha_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und and} \quad \beta = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

die sich aus den drei Pauli-Matrizen (vgl. 3.2) where the α_μ are constructed from the Pauli matrices (cf. 3.2)

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

und der zweidimensionalen Einheitsmatrix \hat{I} zusammensetzen läßt. and the two-dimensional identity matrix.

Übung: Exercise: Zeigen, daß die obige Wahl tatsächlich die Bedingungen $(^*)$ $(^{**})$ $(^{***})$ erfüllt. Show that the above choice indeed satisfies $(^*)$ $(^{**})$ $(^{***})$.

Bringen jetzt unsere Gleichung Reformulate equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = c \left[\sum_{\mu=1}^3 \alpha_\mu \hat{p}_\mu + \beta mc \right] \psi \quad (4.23)$$

in eine kompaktere Form. Definieren 4 γ -Matrizen (Dirac-Matrizen) in a more compact manner. Define 4 γ matrices (Dirac matrices)

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^\mu = \beta \alpha_\mu \quad \text{für for } \mu = 1, 2, 3 \quad (4.24)$$

d.h. explizit gilt i. e. explicitly

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_\mu \\ -\hat{\sigma}_\mu & 0 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

Weil β und α_μ hermitesch sind, gilt γ^0 hermitesch sowie wegen γ^0 is hermitian, because β und α_μ hermitian. Because of

$$\gamma^{\mu+} = (\beta\alpha_\mu)^+ = \alpha_\mu^+ \beta^+ = \alpha_\mu \beta \quad (4.26)$$

$$\begin{array}{c} \parallel \leftarrow (**) \\ -\beta\alpha_\mu \\ \parallel \\ -\gamma^\mu \end{array}$$

γ^μ antihermitesch, also γ^μ is antihermitian, i.e.,

$$\gamma^{0+} = \gamma^0, \quad \gamma^{\mu+} = -\gamma^\mu. \quad (4.27)$$

Außerdem gilt Furthermore it holds

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = \beta\alpha_\mu \beta\alpha_\nu + \beta\alpha_\nu \beta\alpha_\mu \quad (4.28)$$

$$\stackrel{(**)}{=} -(\alpha_\mu \beta^2 \alpha_\nu + \alpha_\nu \beta^2 \alpha_\mu) \quad (4.29)$$

$$\stackrel{(***)}{=} -(\alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu) \quad (4.30)$$

$$\stackrel{(*)}{=} -2\delta_{\mu\nu} \hat{I}. \quad (4.31)$$

analog erhält man Similarly one obtains

$$\gamma^0 \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^0 = \beta^2 \alpha_\mu + \underbrace{\beta\alpha_\mu \beta}_{-\beta^2 \alpha_\mu} = 0 \quad (4.32)$$

und and

$$\gamma^0 \gamma^0 + \gamma^0 \gamma^0 = \beta^2 + \beta^2 \quad (4.33)$$

$$= 2\hat{I}. \quad (4.34)$$

Die 4 γ -Matrizen fassen wir jetzt zu einem Vierervektor zusammen Now we combine the 4 γ matrices to a 4-vector

$$(\gamma^i) = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3). \quad (4.35)$$

Die zu diesen kontravarianten Komponenten kovarianten Komponenten γ_i ($i = 0, 1, 2, 3$) erhält man durch Anwendung des metrischen Tensors g_{ij} , wobei The covariant components γ_i ($i = 0, 1, 2, 3$) are obtained from the contravariant components by applying the metric tensor g_{ij} given as

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{Begründung in Kap. 4.3 For explanation see chap. 4.3})$$

(4.36)

Es gilt **It holds**

$$\gamma_i = g_{ij}\gamma^j \quad (4.37)$$

(Einstein Konvention: über paarweise auftretende ko- und kontravariante Indizes wird summiert **Einstein summation convention: when an index variable appears twice in a single term it implies summation of that term over all the values of the index**)

Damit gilt offensichtlich **Thus obviously**

$$\gamma^0 = \gamma_0, \quad \gamma^\mu = -\gamma_\mu. \quad (4.38)$$

Die Antikommutationsregeln für γ -Matrizen können jetzt zusammengefaßt werden zu **The anticommutation relations for γ matrices may be summarized as**

$$\gamma^i\gamma^j + \gamma^j\gamma^i = 2g^{ij}\hat{I} \quad (4.39)$$

wobei g^{ij} der kontravariante metrische Tensor ist. **Here g^{ij} is the contravariant metric tensor.**

Bem: Note: Allgemein ergibt sich die kontravariante Form des metr. Tensors aus der Bedingung **Generally the contravariant and covariant metric tensor satisfy condition**

$$g^{ij}g_{jk} = \delta_k^i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

Für die spezielle Lorentz-Metrik sind der kovariante und der kontravariante metr. Tensor gleich, vgl. Gl. 4.153. **In case of the Lorentz metric contravariant and covariant metric tensors are equal, cf. Eq. 4.153.**

$$g^{ij} = g_{ij} \quad (4.41)$$

Zurück zu unserem Ansatz **Let's come back to our ansatz**

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = c\left[\sum_{\mu=1}^3\alpha_\mu\hat{p}_\mu + \beta mc\right]\psi. \quad (4.42)$$

Multiplizieren mit $\frac{\beta}{c}$ **Multiply by $\frac{\beta}{c}$**

$$i\hbar \underbrace{\beta \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial}{\partial t}}_{\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0}} \psi = \left[\underbrace{\sum_{\mu=1}^3 \beta \alpha_{\mu} \hat{p}_{\mu} + \beta^2 mc}_{-\sum_{\mu=1}^3 i\hbar \gamma^{\mu} \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} + mc} \right] \psi \quad (4.43)$$

wobei wir den Vierervektor der Raum–Zeit–Koordinaten **Where the position 4-vector**

$$(x^i) = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) \quad (4.44)$$

und den zugehörigen Differentialoperator **and the corresponding four-gradient (four-vector analogue of the gradient)**

$$(\partial_i) = \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \right) = \left(\frac{\partial}{c \partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (4.45)$$

eingeführt haben. **has been introduced.**

Damit erhalten (unter Beachtung der Einstein Konvention) die Standardform der **Altogether we thus obtain (observing the Einstein convention) the standard form of the**

Dirac–Gleichung **Dirac equation** $(i\hbar \gamma^k \partial_k - mc) \psi = 0$

(4.46)

Jede Komponente von ψ genügt (nach Konstruktion der Dirac–Gleichung) der Klein–Gordon–Gleichung. Die Umkehrung gilt aber nicht, vielmehr stellt die Dirac–Gleichung Abhängigkeiten zwischen den Lösungen der Klein–Gordon–Gleichung her. **All the components of the wave function ψ individually satisfy the relativistic energy–momentum relation, i.e., the Klein-Gordon equation. However, not all solutions of the Klein-Gordon equation are as well solutions to Dirac equation, because the latter asserts additional constraints on the individual components.**

Bem Note: Analogie zur Elektrodynamik: Wellengleichungen für \vec{E} und \vec{B} –Feld, aber diese Felder werden zusätzlich durch die grundlegenden Maxwell–Gleichung verknüpft. **The above situation is similar to electrodynamics, where wave equations hold for the electric and magnetic fields individually, but they are additionally related by Maxwells equations.**

Energie–Impuls–Relation **energy-momentum relation**

Nach de Broglie wird ein freies Teilchen der Energie E und mit Impuls \vec{p} durch eine Welle **According to the concept of matter waves or de Broglie waves a free**

particle of energy E and momentum p may be represented by wave function

$$\psi = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} \quad (4.47)$$

repräsentiert (QM I).

Setzen ψ jetzt in die Klein–Gordon–Gleichung ein [Insert \$\psi\$ in the Klein–Gordon equation](#)

$$\left\{ \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \right) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right\} A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} = 0 \quad (4.48)$$

$$\left\{ -\frac{E^2}{c^2 \hbar^2} + \frac{\vec{p}^2}{\hbar^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right\} A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} = 0 \quad (4.49)$$

für $A \neq 0$ folgt [for \$A \neq 0\$ it holds](#)

$$E^2 = c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4 \quad (4.50)$$

D.h. Klein–Gordon–Gleichung (und damit auch Dirac–Gleichung) führen zur relativistischen Energie–Impulsbeziehung [Obviously both the KGE and the DE comply with the relativistic energy-momentum relation](#)

Kontinuitätsgleichung [Continuity equation](#)

Erinnerung QM I, die Lsg. $\psi(\vec{r}, t)$ der Schrödingergleichung genügt einer Kontinuitätsgleichung der Form [As shown in QM I, the solution \$\psi\(\vec{r}, t\)\$ to the SE satisfies a continuity equation of the form](#)

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{S}(\vec{r}, t) = 0 \quad (4.51)$$

mit Wahrscheinlichkeitsdichte [with probability density function](#)

$$\omega(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (4.52)$$

und Wahrscheinlichkeitsstrom [and probability current \(aka probability flux\)](#)

$$\vec{S}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right\}. \quad (4.53)$$

Lässt sich eine derartige Kontinuitätsgleichung auch für die Lösung der Dirac–Gleichung aufstellen? [May such a continuity equation also be derived from the DE?](#)

Machen Ansatz für Wahrscheinlichkeitsdichte [make ansatz for probability density function](#)

$$w = \psi^+ \psi = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

betrachten Dirac-Gleichung [consider DE](#)

$$i\hbar \gamma^k \psi_{,k} - mc\psi = 0 \quad |\psi^+ \gamma^0. \quad (4.55)$$

und ihre adjungierte Darstellung [and its complex conjugate](#)

$$-i\hbar \psi_{,k}^+ \gamma^{k+} - mc\psi^+ = 0 \quad | \cdot \gamma^0 \psi \quad (4.56)$$

(Abkürzung für Ableitung [abbreviate](#) $A_{,k} = \frac{\partial A}{\partial x^k}$)

Multiplikation mit $\psi^+ \gamma^0$ von links bzw. $\gamma^0 \psi$ von rechts ergibt [multiplication by \$\psi^+ \gamma^0\$ from the left and \$\gamma^0 \psi\$ from the right, respectively, leads to](#)

$$i\hbar \psi^+ \gamma^0 \gamma^k \psi_{,k} - mc\psi^+ \gamma^0 \psi = 0 \quad (4.57)$$

$$-i\hbar \psi_{,k}^+ \gamma^{k+} \gamma^0 \psi - mc\psi^+ \gamma^0 \psi = 0 \quad (4.58)$$

Subtraktion ergibt [calculate difference](#)

$$\psi^+ \gamma^0 \gamma^k \psi_{,k} + \psi_{,k}^+ \underbrace{\gamma^{k+} \gamma^0}_{\gamma^0 \gamma^k} \psi = 0 \quad (4.59)$$

wegen [because of](#)

$$\left. \begin{array}{l} \gamma^{\mu+} = -\gamma^\mu \\ \gamma^{0+} = \gamma^0 \\ \gamma^0 \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^0 = 0 \end{array} \right\} \nearrow$$

damit [thus](#)

$$\psi^+ \gamma^0 \gamma^k \psi_{,k} + \psi_{,k}^+ \gamma^0 \gamma^k \psi = 0 \quad (4.60)$$

$$(\psi^+ \gamma^0 \gamma^k \psi)_{,k} = 0 \quad (4.61)$$

Definieren jetzt Viererstromdichte [Define 4-current density](#)

$$j^k = c\psi^+ \gamma^0 \gamma^k \psi \quad (4.62)$$

mit zeitartiger Komponente [where the zero \(time\) component](#)

$$j^0 = c\psi^+ \gamma^0 \gamma^0 \psi = c\psi^+ \psi = c\omega \quad (4.63)$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte und den drei raumartigen Komponenten [corresponds to the probability density function and the three spatial components](#)

$$j^\mu = c\psi^+ \gamma^0 \gamma^\mu \psi \quad (4.64)$$

als Wahrscheinlichkeitsstrom. Offensichtlich gilt dann die Kontinuitätsgleichung [correspond to the probability current. Obviously, the continuity equation holds](#)

$$j^k_{,k} = \frac{\partial j^0}{\partial x^0} + \sum_{\mu=1}^3 \frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} \quad (4.65)$$

$$= \frac{\partial \omega}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0. \quad (4.66)$$

4.2 Der Pauli'sche Fundamentalsatz Pauli's fundamental theorem

Die vierkomponentige Wellenfunktion ψ (Spinor) ist der Träger der quantenmechanischen Information, physikalisch meßbar ist aber erst die Wahrscheinlichkeitsdichte ω . Jede Transformation des Spinors $\psi \rightarrow \psi' = U \psi$ mit einem konstanten unitären U läßt die Wahrscheinlichkeitsdichte invariant: **The 4 component Dirac spinors ψ carry the quantum mechanical information, however, the probability density function ω is the measurable quantity. It is invariant under any unitary transformation $\psi \rightarrow \psi' = U \psi$:**

$$\omega' = \psi'^+ \psi' = \psi^+ U^+ U \psi = \psi^+ \psi. \quad (4.67)$$

Wegen **because of**

$$\psi = U^+ \psi' \quad (4.68)$$

erhalten wir aus der Dirac-Gleichung **from the DE**

$$(i\hbar \gamma^k \partial_k - mc)\psi = 0 \quad (4.69)$$

$$U(i\hbar \gamma^k \partial_k - mc)U^+ \psi' = 0 \quad (4.70)$$

$$(i\hbar \underbrace{U \gamma^k U^+}_{\gamma'^k} \partial_k - mc)\psi' = 0 \quad (4.71)$$

die transformierte Dirac-Gleichung **one obtains the transformed DE**

$$(i\hbar \gamma'^k \partial_k - mc)\psi' = 0. \quad (4.72)$$

Offensichtlich liefern γ^k und $\gamma'^k = U \gamma^k U^+$ unterschiedliche Spinoren ψ und ψ' , die aber physikalisch äquivalent sind. **Obviously, γ^k and $\gamma'^k = U \gamma^k U^+$ lead to different, but physically equivalent spinors ψ and ψ' , respectively.**

Gibt es Matrizen, die die Antikommutationsrelation **Are there matrices that fulfill the anticommutation relation**

$$\gamma^i \gamma^j + \gamma^j \gamma^i = 2g^{ij} \hat{I} \quad (4.73)$$

erfüllen, aber nicht zu unserer speziellen Wahl der Dirac-Matrizen **but are not related by a unitary transformation to our choice of Dirac matrices?**

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \quad \text{und and} \quad \gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_\mu \\ -\hat{\sigma}_\mu & 0 \end{pmatrix} \quad (4.74)$$

durch eine unitäre Trafo verbunden sind?

Falls nein → Können ohne Verlust an Allgemeinheit uns auf diese spezielle γ -Matrizen verschränken

Falls ja → Müssen physikalische Bedeutung der anderen Lösungen bzw. Gleichungen untersuchen.

If the answer is yes, we will need to explore the physical interpretation of the equations and solutions, respectively, that result from these matrices. Otherwise, we may restrict ourselves to the above special choice of Gamma matrices.

Die Antwort gibt der Pauli'sche Fundamentalsatz: The question is answered by Pauli's fundamental theorem:

Alle Darstellungen der Dirac-Algebra Given two sets of Dirac matrices which both satisfy

$$\gamma^i \gamma^j + \gamma^j \gamma^i = 2g^{ij} \hat{I} \quad (4.75)$$

sind unitär äquivalent. they are related by an unitary transformation.

⇒ Das empirische Konstruktionsverfahren, das uns zu den Dirac-Gleichungen führt ist eindeutig! The above empirical derivation of the DE led to a unique result!

Beweis Proof: (vgl. see R. H. Good, Jr Rev. Mod. Phys. 27, 187 (1955))

unterteilt sich in zwei Teile is done in two steps

- i) Zu zwei Darstellungen γ_i, γ'_i , der Dirac-Algebra existiert eine Matrix \hat{S} mit $\gamma'_i = \hat{S} \gamma_i \hat{S}^{-1}$ Two representations γ_i, γ'_i of the Dirac algebra are related by a transformation \hat{S} mit $\gamma'_i = \hat{S} \gamma_i \hat{S}^{-1}$
- ii) falls außerdem gilt if furthermore

$$\gamma_0 = \gamma_0^+, \quad \gamma^\mu = -\gamma^{\mu+} \quad (4.76)$$

$$\gamma'_0 = \gamma_0'^+, \quad \gamma'_\mu = -\gamma_\mu'^+ \quad (4.77)$$

so kann \hat{S} unitär gewählt werden then \hat{S} is unitary

Der Beweis arbeitet mit den 16 4x4 Matrizen The proof employs 16 4x4 matrices

$$\hat{\Gamma}_A \quad (A = 1, \dots, 16) \quad (4.78)$$

$$\hat{\Gamma}_A = \hat{I}, \gamma_0, i\gamma_1, i\gamma_2, i\gamma_3, i\gamma_2\gamma_3, i\gamma_3\gamma_1, i\gamma_1\gamma_2, \gamma_1\gamma_0, \gamma_2\gamma_0, \gamma_3\gamma_0, \gamma_1\gamma_2\gamma_3, i\gamma_1\gamma_2\gamma_0, i\gamma_3\gamma_1\gamma_0, i\gamma_2\gamma_3\gamma_0, i\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_0 \quad (4.79)$$

Nachrechnen zeigt, daß It can be shown that

$$\hat{\Gamma}_A^2 = \hat{I} \quad A = 1, \dots, 16 \quad (4.80)$$

Nun zum eigentlichen Beweis **Start**

- 1) Für alle **For all** $\hat{\Gamma}_A$ außer **apart from** \hat{I} existiert ein **exist a** $\hat{\Gamma}_B$ mit **where**

$$\hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_B = -\hat{\Gamma}_A \quad (4.81)$$

und zwar **specifically**

A	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
B	9	4	3	3	4	5	3	2	2	2	2	6	6	7	2

- 2) Die Spuren aller Γ_A ($A = 2, \dots, 16$) sind Null, denn **The traces of Γ_A ($A = 2, \dots, 16$) vanish, because of**

$$-\text{Sp}(\hat{\Gamma}_A) = \text{Sp}(\hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_B) = \text{Sp}(\hat{\Gamma}_B^2 \hat{\Gamma}_A) = \text{Sp}(\hat{\Gamma}_A) \quad (4.82)$$

||
 \hat{I}

$$\Rightarrow \text{Sp}(\hat{\Gamma}_A) = 0 \quad (4.83)$$

- 3) Die $\hat{\Gamma}_A$ sind linear unabhängig, d.h. **The Γ_A are linearly independent, i.e.**

$$\sum_{A=1}^{16} a_A \hat{\Gamma}_A = 0 \Rightarrow a_A = 0 \quad \forall A \quad (4.84)$$

Multiplizieren Summe mit **Multiply sum by** $\hat{\Gamma}_B$

$$a_B \underbrace{\hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_B}_{\hat{I}} + \sum_{A \neq B} a_A \hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_B = 0 \quad | \text{Sp} \quad (4.85)$$

$$4a_B + \sum_{A \neq B} a_A \text{Sp}(\hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_B) = 0 \quad (4.86)$$

$$\hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_B = \hat{\Gamma}_C \neq \hat{I} \text{ für } A \neq B \quad (4.87)$$

$$\Rightarrow \text{Sp}(\hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_B) = 0 \quad (4.88)$$

$$\Rightarrow a_B = 0 \quad (4.89)$$

Betrachtung kann für $B = 1, \dots, 16$ wiederholt werden. **The same considerations hold for $B = 1, \dots, 16$**

- 4) Jede 4x4 Matrix kann als Linearkombination der $\hat{\Gamma}_A$ geschrieben werden **Any 4x4 matrix may be expanded in a linear combination of the $\hat{\Gamma}_A$**

$$\hat{\chi} = \sum_{A=1}^{16} x_A \hat{\Gamma}_A \quad (4.90)$$

Klar, weil die 16 linear unabhängigen $\hat{\Gamma}_A$ einen 16-dimensionalen Raum, den Raum aller 4x4 Matrizen aufspannen. **For the simple reason that 16 linearly independent matrices $\hat{\Gamma}_A$ span a 16 dimensional space**

Dabei gilt für die Koeffizienten **Thereby the coefficients are given by**

$$x_B = \frac{1}{4} \text{Sp}(\hat{\Gamma}_B \hat{\chi}) \quad (4.91)$$

(klar nach Ableitung in **clear from derivation in 3**):

$$\hat{\Gamma}_B \hat{\chi} = x_B \hat{\Gamma}_B^2 + \sum_{A \neq B} x_A \hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_A \quad | \text{Sp} \quad (4.92)$$

- 5) Jede 4x4 Matrix, die mit allen $\hat{\Gamma}_A$ vertauscht, ist ein Vielfaches der Einheitsmatrix (Schursches Lemma) **Schur's lemma: any matrix that commutes with all $\hat{\Gamma}_A$ is proportional to the identity matrix**

Sei $\hat{\chi}$ die betreffende Matrix **Be $\hat{\chi}$ the matrix in question**

$$\hat{\chi} = x_B \hat{\Gamma}_B + \sum_{A \neq B} x_A \hat{\Gamma}_A \quad (4.93)$$

Wir zeigen, daß $x_B = 0$ für alle B außer der 1 **We show that $x_B = 0$ for all $B \neq 1$**

nach 1) gilt für alle $\hat{\Gamma}_B$ außer der \hat{I} , daß ein $\hat{\Gamma}_C$ existiert mit **according to 1) it holds for all $\hat{\Gamma}_B$ apart from \hat{I} that there is a $\hat{\Gamma}_C$ that fulfills**

$$\hat{\Gamma}_C \hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_C = -\hat{\Gamma}_B \quad (4.94)$$


$\hat{\chi}$ vertauscht mit allen $\hat{\Gamma}_A$, d.h. auch mit $\hat{\Gamma}_C$ **$\hat{\chi}$ commutes with all $\hat{\Gamma}_A$, in particular with $\hat{\Gamma}_C$**

$$\hat{\chi} \hat{\Gamma}_C = \hat{\Gamma}_C \hat{\chi} \quad (\hat{\Gamma}_C^2 = \hat{I}) \quad (4.95)$$

$$\hat{\chi} = \hat{\Gamma}_C \hat{\chi} \hat{\Gamma}_C^{-1} = \hat{\Gamma}_C \hat{\chi} \hat{\Gamma}_C \quad (4.96)$$

setzen jetzt $\hat{\chi}$ ein **use expression for $\hat{\chi} = x_B \hat{\Gamma}_B + x_1 \hat{I} + \sum_{A \neq 1, B} x_A \hat{\Gamma}_A$**

$$x_B \hat{\Gamma}_B + x_1 \hat{I} + \sum_{A \neq 1, B} x_A \hat{\Gamma}_A = x_B \underbrace{\hat{\Gamma}_C \hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_C}_{-\hat{\Gamma}_B} + x_1 \underbrace{\hat{\Gamma}_C \hat{I} \hat{\Gamma}_C}_{\hat{I}} + \sum_{A \neq 1, B} x_A \underbrace{\hat{\Gamma}_C \hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_C}_{\hat{\Gamma}_A} \quad (4.97)$$


 Produkt **product** $\hat{\Gamma}_C \hat{\Gamma}_A \hat{\Gamma}_C$
 ist wieder eine Basismatrix
 belongs to the base matrices

Multiplikation mit $\hat{\Gamma}_B$, Spurbildung und Ausnutzung, daß $\hat{\Gamma}_B^2 = \hat{I}$ liefert
 Multiply by $\hat{\Gamma}_B$, calculate trace, and exploit that $\hat{\Gamma}_B^2 = \hat{I}$

$$x_B = -x_B = 0 \quad (4.98)$$

D.h. alle Koeffizienten x_B mit $B \neq 1$ verschwinden. $\hat{\chi}$ ist ein Vielfaches der Einheitsmatrix. Obviously all coefficients x_B with $B \neq 1$ vanish. $\hat{\chi}$ is proportional to the identity matrix.

- 6) γ_i und γ'_i seien zwei Darstellungen der Dirac-Algebra, $\hat{\Gamma}_A$ und $\hat{\Gamma}'_A$ sei die jeweilige Basis von 4x4 Matrizen. Zeigen jetzt, daß dann gilt Suppose γ_i and γ'_i are two representations of the Dirac algebra, $\hat{\Gamma}_A$ and $\hat{\Gamma}'_A$ are the respective basis matrices. Then it holds

$$\hat{\Gamma}'_A \hat{S} = \hat{S} \hat{\Gamma}_A \quad (4.99)$$

wobei where

$$\hat{S} = \sum_{B=1}^{16} \hat{\Gamma}'_B \hat{F} \hat{\Gamma}_B \quad (4.100)$$

mit einer beliebigen 4x4-Matrix F. for any 4x4 matrix F.

Zum Beweis betrachten wir die Matrix This is proven by considering the matrix

$$\hat{\Gamma}'_A \hat{S} \hat{\Gamma}_A = \sum_{B=1}^{16} \hat{\Gamma}'_A \hat{\Gamma}'_B \hat{F} \hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_A \quad (4.101)$$

dabei gilt (nachzurechnen) thereby the actual calculation shows

$$\hat{\Gamma}_B \hat{\Gamma}_A = \epsilon_C \hat{\Gamma}_C \quad \text{mit } \epsilon_C \in \{\pm 1, \pm i\} \quad (4.102)$$

\uparrow
 $(\gamma^i \gamma^j + \gamma^j \gamma^i = 2g^{ij} \hat{I})$

und analog and similarly

$$\hat{\Gamma}'_B \hat{\Gamma}'_A = \epsilon_C \hat{\Gamma}'_C \quad (4.103)$$

vorhin shown above

$$\hat{\Gamma}_A^{-1} = \hat{\Gamma}_A \quad \forall A \quad (4.104)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{\Gamma}'_A \hat{\Gamma}'_B &= \hat{\Gamma}'_A^{-1} \hat{\Gamma}'_B^{-1} = (\hat{\Gamma}'_B \hat{\Gamma}'_A)^{-1} & (4.105) \\ &\parallel \\ &\epsilon_C^{-1} \hat{\Gamma}'_C^{-1} \\ &\parallel \\ &\frac{1}{\epsilon_C} \hat{\Gamma}'_C \end{aligned}$$

können damit schreiben [may thus write](#)

$$\hat{\Gamma}'_A \hat{S} \hat{\Gamma}_A = \sum_{C=1}^{16} \frac{1}{\epsilon_C} \hat{\Gamma}'_C \hat{F} \epsilon_C \hat{\Gamma}_C = \sum_{C=1}^{16} \hat{\Gamma}'_C \hat{F} \hat{\Gamma}_C = \hat{S} \quad (4.106)$$

↑
nach Definition

Multiplikation mit $\hat{\Gamma}_A = \hat{\Gamma}_A^{-1}$ von rechts ergibt die Behauptung [Multiplication by \$\hat{\Gamma}_A = \hat{\Gamma}_A^{-1}\$ from the rhs proves the statement true](#)

$$\hat{\Gamma}'_A \hat{S} = \hat{S} \hat{\Gamma}_A \quad (4.107)$$

Damit Teil (i) des Beweises abgeschlossen, fehlt noch Teil (ii), müssen zeigen, daß \hat{S} unitär gewählt werden kann, falls [This concludes part \(i\) of the proof. Still need to show \(ii\), i.e., that \$\hat{S}\$ can be chosen unitary, provided](#)

$$\gamma_i^+ = g_{ii} \gamma_i \quad (4.108)$$

$$\gamma_i'^+ = g_{ii} \gamma_i' \quad (4.109)$$

Definieren zunächst [Start by defining](#)

$$\hat{V} = (\det \hat{S})^{-1} \hat{S} \quad (4.110)$$

Dann gilt offensichtlich [Obviously it holds](#)

$$\gamma_i' = \hat{V} \gamma_i \hat{V}^{-1}, \quad \det \hat{V} = 1 \quad (4.111)$$

\hat{V} enthält noch einen freien Faktor $\pm 1, \pm i$, denn [Still free to choose a factor \$\pm 1, \pm i\$, because of](#)

$$\det(\alpha \hat{V}) = \alpha^4 \underbrace{\det(\hat{V})}_{=1} = 1 \quad (4.112)$$

$$\Rightarrow \alpha = e^{\frac{i\pi n}{2}} \quad (4.113)$$

Mit anderen Worten [This means that](#)

$$\det(\hat{V}) = \det(\pm \hat{V}) = \det(\pm i \hat{V}) = 1. \quad (4.114)$$

Ansonsten ist \hat{V} eindeutig bestimmt, denn wenn wir annehmen es gäbe ein $\hat{V}_1 \neq \hat{V}_2$ dann gälte [Otherwise \$\hat{V}\$ is uniquely determined, because of](#)

$$\gamma_i' = \hat{V}_1 \gamma_i \hat{V}_1^{-1} = \hat{V}_2 \gamma_i \hat{V}_2^{-1} \quad (4.115)$$

so folgt

$$\hat{V}_2^{-1}\hat{V}_1\gamma_i = \gamma_i\hat{V}_2^{-1}\hat{V}_1 \quad (4.116)$$

Nach Schritt 5) in Teil (i) des Beweises ist jede 4x4-Matrix, die mit allen $\hat{\Gamma}_A$ vertauscht, ein Vielfaches der Einheitsmatrix, d.h. [According to 5\) in part \(i\) any 4x4 matrix that commutes with all \$\hat{\Gamma}_A\$ is proportional to the identity matrix, i.e.,](#)

$$\hat{V}_2^{-1}\hat{V}_1 = k\hat{I} \quad (4.117)$$

also

$$\hat{V}_1 = k\hat{V}_2 \quad \text{mit } k = \pm 1, \pm i \quad (4.118)$$

d.h. \hat{V} in der Tat bis auf Vorfaktor eindeutig. Bilden jetzt das adjungierte der Gleichung [take the adjoint equation](#)

$$\gamma'_i = \hat{V}\gamma_i\hat{V}^{-1} \quad (4.119)$$

$$\gamma'_i{}^+ = (\hat{V}\hat{\gamma}_i\hat{V}^{-1})^+ = (\hat{V}^{-1})^+\gamma_i^+\hat{V}^+ \quad (4.120)$$

$$\begin{array}{ccc} \parallel & & \parallel \\ g_{ii}\gamma'_i & & g_{ii}\gamma_i \\ \Rightarrow \gamma'_i = (\hat{V}^{-1})^+\gamma_i\hat{V}^+ = (\hat{V}^+)^{-1}\gamma_i\hat{V}^+ & & \end{array} \quad (4.121)$$

Im letzten Schritt haben wir ausgenutzt daß $(\hat{V}^{-1})^+ = (\hat{V}^+)^{-1}$. Vgl. der Gleichungen 4.119 und 4.121 liefert (da \hat{V} bis auf Faktor eindeutig bestimmt) [comparing eqns. 4.119 and 4.121 and remembering that \$\hat{V}\$ is apart from a factor uniquely determined shows](#)

$$(\hat{V}^+)^{-1} = e^{im\frac{\pi}{2}}\hat{V} \quad (4.122)$$

$$\hat{V}^+ = e^{-im\frac{\pi}{2}}\hat{V}^{-1} \quad |\hat{V} \quad (4.123)$$

$$\hat{V}^+\hat{V} = e^{-im\frac{\pi}{2}}\hat{I} \quad (4.124)$$

für die Diagonalelemente von $\hat{V}^+\hat{V}$ gilt [for the diagonal elements of \$\hat{V}^+\hat{V}\$ it holds](#)

$$(\hat{V}^+\hat{V})_{ii} = \sum_j (\hat{V}^+)_{ij}(\hat{V})_{ji} = \sum_j \underbrace{V_{ji}^* V_{ji}}_{\in \mathbb{R}, > 0} \quad (4.125)$$

$$\Rightarrow e^{-im\frac{\pi}{2}} \in \mathbb{R}, > 0 \quad (4.126)$$

$$\Rightarrow m = 0 \quad (4.127)$$

$$\Rightarrow \hat{V}\hat{V}^+ = \hat{I} \quad (4.128)$$

D.h. zwischen zwei Sätzen von Dirac-Matrizen vermittelt eine unitäre Transformation. [In other words, two sets of Dirac matrices are related by an unitary transformation.](#)

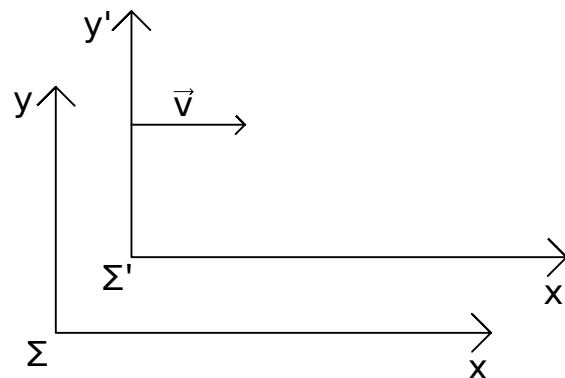
⇒ Alle Sätze von Dirac–Matrizen sind unitär äquivalent **All representations of Dirac matrices are unitarily equivalent.**

Damit sind alle Dirac–Gleichungen, die nach dem in Kapitel 4.1 beschriebenen Verfahren konstruiert werden können, unitär äquivalent und folglich physikalisch identisch. Daher können wir eine besonders einfache Darstellung der Dirac–Matrizen verwenden. **Thus it has been shown that all Dirac equations derived as shown in Chapter 4.1 are unitarily equivalent and thus describe the identical physics. For this reason we may use a particular convenient representation of the Dirac matrices.**

4.3 Lorentz–Invarianz der Dirac–Gleichung Lorentz Invariance of the Dirac Equation

Erinnerung: Spezielle Relativitätstheorie **Reminder: special theory of relativity**

betrachten 2 Koordinatensysteme **consider two reference frames Σ, Σ' mit der Relativgeschwindigkeit $\vec{v} = v\vec{e}_x$ where the primed system is in motion relative to the unprimed system with constant speed $\vec{v} = v\vec{e}_x$ along the x-axis, from the perspective of an observer stationary in the unprimed system**



In der klassischen Mechanik wird der Übergang von Σ' zu Σ durch Galilei–Transformation beschrieben. **The Galilean transformation is used to transform between the coordinates of two reference frames within the Newtonian physics.**

$$x = x' + vt, \quad y = y', \quad z = z', \quad t = t' \quad (4.129)$$

Dies genügt nicht dem Relativitätsprinzip, das die Invarianz des vierdimensionalen Abstands verlangt. **The Galilean transformation does not comply with the principle of relativity that requires that the spacetime interval is invariant**

$$ds^2 = c^2 dt^2 - d\vec{x}^2 = c^2 dt'^2 - d\vec{x}'^2 \quad (4.130)$$

||
 ds'^2

Die lineare Transformation, die dem Relativitätsprinzip genügt, ist die Lorentz-Transformation [The Lorentz transformation is a linear transformation that preserves the spacetime interval](#)

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \psi & -\sinh \psi & 0 & 0 \\ -\sinh \psi & \cosh \psi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (4.131)$$

$$\text{mit where } \cosh \psi = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad \sinh \psi = \frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (4.132)$$

Bem Note: mit dem imaginären Drehwinkel $\phi = -i\psi$ kann die Lorentz-Trafo in der Form [By introducing the imaginary rotation angle \$\phi = -i\psi\$ the Lorentz transformation assumes the form](#)

$$\begin{pmatrix} ict' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ict \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (4.133)$$

geschrieben werden. D.h. können die Transformation als Drehung des komplexen Vektors (ict, \vec{x}) im Minkowski-Raum verstehen. [, i.e. the Lorentz transformation may be interpreted as a rotation of the complex vector \$\(ict, \vec{x}\)\$ in a four-dimensional spacetime.](#)

Übung Exercise: Zeitdilatation, Längenkontraktion, Geschwindigkeitsaddition aus Lorentz-Transformation ableiten [derive time dilation, length contraction, and the special relativity velocity addition formula from the Lorentz transformation](#)

Führen für die weiteren Betrachtungen jetzt den Vierervektor [In the following we use the four-vector or 4-vector](#)

$$\vec{x} = (ct, \vec{x}) = (ct, x, y, z) \quad (4.134)$$

des Minkowski-Raumes ein. [in the four-dimensional real vector space, called Minkowski space](#)

Allgemein schreiben wir den Vierervektor als [In general we write](#)

$$\vec{A} = A^i \vec{e}_i = A^0 \vec{e}_0 + A^1 \vec{e}_1 + A^2 \vec{e}_2 + A^3 \vec{e}_3 \quad (4.135)$$

wobei die Basisvektoren \vec{e}_i nicht notwendigerweise orthogonal und normiert sein müssen. [where the basis vectors \$\vec{e}_i\$ are not necessarily orthogonal and normalized.](#) Sinnvoll ist aber die Einführung eines zweiten Koordinatensystems mit der Basis

$\{\vec{e}^0, \vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3\}$. It is helpful to introduce a second coordinate system with the basis vectors $\{\vec{e}^0, \vec{e}^1, \vec{e}^2, \vec{e}^3\}$.

Die Basis $\{\vec{e}_i\}$ wird als kovariant bezeichnet, die Basis $\{\vec{e}^i\}$ als kontravariant. The basis vectors $\{\vec{e}_i\}$ and $\{\vec{e}^i\}$ are known as covariant and contravariant, respectively

Zwischen kontra- und kovarianten Basisvektoren gilt die Relation They are related to each other by

$$\vec{e}^i \vec{e}_j = \delta_j^i = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j. \end{cases} \quad (4.136)$$

Können damit aus einem gegebenen Vektor \vec{A} sofort die kontravarianten Komponenten A^i erzeugen The contravariant components of a given vector \vec{A} are immediately obtained as

$$\vec{A} \cdot \vec{e}^i = A^j \vec{e}_j \vec{e}^i = A^j \delta_j^i = A^i \quad (4.137)$$

Können auch kovariante Vektorkomponenten definieren May define covariants vector compents

$$A_i = \vec{A} \cdot \vec{e}_i \quad (4.138)$$

und eine Darstellung aus kontravarianter Basis und kovarianten Komponenten as well as introduce a representation using contravariant basis and covariant components

$$\vec{A} = A_i \vec{e}^i. \quad (4.139)$$

In gemischter Darstellung ist das Skalarprodukt gegeben als The scalar product of an arbitrary vector A with a vector B in contravariant and covariant representation, respectively, is given as

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = (A^i \vec{e}_i)(B_k \vec{e}^k) = A^i B_k \underbrace{\vec{e}_i \cdot \vec{e}^k}_{\delta_i^k} = A^i B_i, \quad (4.140)$$

in einheitlicher kontravarianter Darstellung in contravariant representation

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = (A^i \vec{e}_i)(B^k \vec{e}_k) = A^i B^k \underbrace{\vec{e}_i \cdot \vec{e}_k}_{g_{ik}} = A^i B^k g_{ik}, \quad (4.141)$$

oder in kovarianter Darstellung in covariant representation

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = (A_i \vec{e}^i)(B_k \vec{e}^k) = A_i B_k \underbrace{\vec{e}^i \cdot \vec{e}^k}_{g^{ik}} = A_i B_k g^{ik}, \quad (4.142)$$

wobei wir die kovariante Metrik where the covariant metric

$$g_{ik} = \vec{e}_i \cdot \vec{e}_k \quad (4.143)$$

und die kontravariante Metrik [where the contravariant metric](#)

$$g^{ik} = \vec{e}^i \cdot \vec{e}^k \quad (4.144)$$

eingeführt haben. Aus der Definition folgt [have been used. It follows from the definition that](#)

$$g_{ik} = g_{ki} \quad \text{und} \quad g^{ik} = g^{ki}. \quad (4.145)$$

Vorhin [Furthermore](#)

$$\overset{\Rightarrow}{\overset{\Rightarrow}{A}} \overset{\Rightarrow}{B} = A^i B_i \quad (4.146)$$

$$\begin{array}{c} \parallel \\ A^i \cdot B^k g_{ik} \\ \Rightarrow A^i [B_i - B^k g_{ik}] = 0 \end{array} \quad (4.147)$$

gilt für beliebige Vektoren, d.h. können mit der Metrik zwischen ko- und kontravarianten Darstellungen transformieren. [holds for arbitrary vectors. Metric may thus be used to transform between the covariant and contravariant representations.](#)

$$B_i = g_{ik} B^k \quad (4.148)$$

Analog folgt aus [Similarly it follows from](#)

$$\overset{\Rightarrow}{\overset{\Rightarrow}{A}} \overset{\Rightarrow}{B} = A^k B_k \quad (4.149)$$

$$\begin{array}{c} \parallel \\ A_i \cdot B_k g^{ik} \\ [A^k - A_i g^{ik}] B_k = 0 \end{array} \quad (4.150)$$

$$\Rightarrow A^k = g^{ki} A_i. \quad (4.151)$$

Die Metrik kann also zum Verschieben der Indizes verwendet werden. [The indices are thus raised and lowered using the metric.](#)

Weiter folgt aus [Furthermore we see from](#)

$$A^k = g^{ki} A_i = g^{ki} g_{im} A^m, \quad (4.152)$$

dass [that](#)

$$g^{ki} g_{im} = \delta_m^k. \quad (4.153)$$

Jetzt wieder zurück zur Raum-Zeit, dort sind Ereignisse durch Vektoren (ct, \vec{x}) charakterisiert, infinitesimal benachbarte Ereignisse durch die Koordinatendifferenzen [In the four-dimensional spacetime events are described by vectors \$\(ct, \vec{x}\)\$. The measure of separation between infinitesimally close events is](#)

$$(c dt, d\vec{x}) = (dx^0, dx^1, dx^2, dx^3) \quad (4.154)$$

$$= (c dt, dx, dy, dz) \quad (4.155)$$

$$= d\vec{x}. \quad (4.156)$$

Offensichtlich gilt dann **Obviously it holds**

$$\begin{aligned}
 d\vec{x} d\vec{x} &= g_{ij} dx^i dx^j & (4.157) \\
 \parallel & \\
 ds^2 & \\
 \parallel & \longleftarrow \text{Abstand im Minkowski-Raum} \\
 c^2 dt^2 - d\vec{x}^2 & \text{separation in spacetime}
 \end{aligned}$$

D.h. die Metrik des Minkowski-Raumes ist gegeben durch **The Minkowski metric is usually denoted by g and can be written as a four-by-four matrix**

$$(g_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.158)$$

Aus $g^{ki} g_{im} = \delta_m^k$ ergibt sich durch Inversion dann die kontravariante Metrik. **The contravariant metric is obtained by inverting, i.e., exploiting that $g^{ki} g_{im} = \delta_m^k$.**

$$(g^{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.159)$$

Jetzt zur Lorentz-Trafo zwischen Σ und Σ' , funktionaler Zusammenhang in der Form **Now we want to Lorentz transform between the reference frames Σ and Σ' , it holds**

$$x^i = x^i(x^{i'}) \quad (4.160)$$

$$\Rightarrow dx^i = \frac{\partial x^i}{\partial x^{i'}} dx^{i'} \quad (4.161)$$

$\Lambda_{i'}^i = \frac{\partial x^i}{\partial x^{i'}}$ ist die Transformationsmatrix, die zwischen den Koordinatendifferentialen vermittelt. **The transformation matrix $\Lambda_{i'}^i = \frac{\partial x^i}{\partial x^{i'}}$ relates the coordinates in the two reference frames.**

Allgemein transformieren sich kontravariante Vektoren zwischen Σ und Σ' wie **Generally it holds for transformations of contravariant Vektors between Σ and Σ'**

$$A^i = \Lambda_{i'}^i A^{i'} \quad (4.162)$$

für Umkehrtrafo gilt **The inverse transformation is given by**

$$A^{i'} = \Lambda_i^{i'} A^i \quad (4.163)$$

mit Trafo-Matrix für die Rücktrafo [where the corresponding matrix elements](#)

$$\Lambda_i^{i'} = \frac{\partial x^{i'}}{\partial x^i} \quad (4.164)$$

$$\Rightarrow \Lambda_i^{i'} \Lambda_{k'}^i = \frac{\partial x^{i'}}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial x^{k'}} = \delta_{k'}^{i'} \quad (4.165)$$

Brauchen jetzt noch Trafo für kovariante Vektoren. Nutzen dabei aus, daß das Skalarprodukt zweier Vektoren ein Skalar und damit invariant gegenüber Transformationen ist, d.h. [In order to determine the transformation matrix for covariant vectors we exploit the fact that the scalar product is Lorentz invariant, i.e.,](#)

$$A^i B_i = A^{i'} B_{i'} = \Lambda_i^{i'} A^i B_{i'} = A^i (\Lambda_i^{i'} B_{i'}) \quad (4.166)$$

Koeffizientenvergleich liefert [the comparison of the coefficients shows that](#)

$$B_i = \Lambda_i^{i'} B_{i'} \quad , \quad (4.167)$$

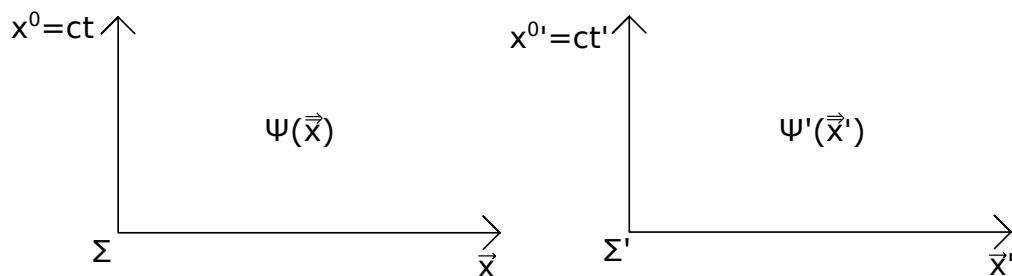
analog gilt für Umkehrtrafo [similarly it holds for the inverse transformation](#)

$$B_{i'} = \Lambda_{i'}^i B_i \quad . \quad (4.168)$$

Für den Spezialfall einer Translation von Σ' bez. Σ entlang x ist [In the special case of a translation of \$\Sigma'\$ with respect to \$\Sigma\$ along the \$x\$ direction one obtains](#)

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cosh \psi & -\sinh \psi & 0 & 0 \\ -\sinh \psi & \cosh \psi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.169)$$

Betrachten jetzt quantenmechanischen Zustand in 2 Inertialsystemen [Consider now the same quantum mechanical state in two inertial frames of reference](#)



wobei gilt [that are related by](#)

$$x^{i'} = \Lambda_i^{i'} x^i \quad , \quad x^i = \Lambda_{i'}^i x^{i'} \quad , \quad (4.170)$$

sowie

$$\partial_{i'} = \Lambda_{i'}^i \partial_i \quad , \quad \partial_i = \Lambda_i^{i'} \partial_{i'} \quad . \quad (4.171)$$

Das Relativitätsprinzip fordert die Lorentz-Invarianz der Dirac-Gleichung, d.h. die Beschreibung eines quantenmechanischen Teilchens in Σ und Σ' erfolgt durch formäquivalente Gleichungen [The principle of special relativity requires that the form of the laws of physics remain invariant, i.e, the Lorentz invariance of the Dirac equation in \$\Sigma\$ und \$\Sigma'\$](#)

$$(i\hbar \gamma^k \partial_k - mc) \psi(\vec{x}) = 0 \quad (4.172)$$

$$(i\hbar \gamma^{k'} \partial_{k'} - mc) \psi'(\vec{x}') = 0 \quad (4.173)$$

$$\text{mit } \vec{x} = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \vec{x}) \quad (4.174)$$

Die Diracmatrizen $\gamma^{k'}$ in Σ' haben die gleichen Eigenschaften und Antikommutationsrelationen wie die γ^k in Σ . Da nach dem Pauli'schen Fundamentalsatz alle Dirac-Gleichungen unitär äquivalent sind, kann der Beobachter in Σ' dieselben Matrizen zugrunde legen wie der Beobachter in Σ . [The Dirac matrices \$\gamma^{k'}\$ in \$\Sigma'\$ have the same properties and fulfill the same anticommutation relations as fulfilled by \$\gamma^k\$ in \$\Sigma\$. According to Pauli's fundamental theorem all formulations of the DE are related by unitary transformations. Therefore we may use the same matrices in \$\Sigma\$ and \$\Sigma'\$.](#)

Neben der Forminvarianz der Gleichungen muß auch garantiert sein, daß der Spinor $\psi'(\vec{x}')$ in Σ' den gleichen q.m. Zustand beschreibt wie $\psi(\vec{x})$ in Σ . [Not only must the same equations hold, also the spinor \$\psi'\(\vec{x}'\)\$ in \$\Sigma'\$ must describe the same state as \$\psi\(\vec{x}\)\$ in \$\Sigma\$.](#)

Deshalb muß zwischen den Spinoren eine Transformation R vermitteln, mit [Therefore there must be a transformation \$R\$ that relates the two spinors in such as way as](#)

$$\psi'(\vec{x}') = R(\Lambda) \psi(\vec{x}), \quad \text{d.h. hence} \quad (4.175)$$

$$\psi(\vec{x}) = R^{-1}(\Lambda) \psi'(\vec{x}') \quad (4.176)$$

Und für die inverse Trafo von Σ' nach Σ gilt entsprechend [On the other hand, for the inverse transformation from \$\Sigma'\$ to \$\Sigma\$ it holds](#)

$$\psi(\vec{x}) = R(\Lambda^{-1}) \psi'(\vec{x}'), \quad \text{d.h.} \quad (4.177)$$

$$\psi'(\vec{x}') = R^{-1}(\Lambda^{-1}) \psi(\vec{x}). \quad (4.178)$$

Der Vergleich zeigt, daß [The comparison shows that](#)

$$R(\Lambda^{-1}) = R^{-1}(\Lambda). \quad (4.179)$$

Mit [Insert now](#)

$$\psi(\vec{x}) = R^{-1}(\Lambda) \psi'(\vec{x}') \quad (4.180)$$

jetzt in die Dirac-Gleichung [in the DE](#)

$$(i\hbar\gamma^k\partial_k - mc)\psi(\vec{x}) = 0 \quad (4.181)$$

$$\Rightarrow (i\hbar\gamma^k\partial_k - mc)R^{-1}(\Lambda)\psi'(\vec{x}') = 0. \quad (4.182)$$

Anwendung von $R(\Lambda)$ liefert [Application of \$R\(\Lambda\)\$ results in](#)

$$(i\hbar R(\Lambda)\gamma^k R^{-1}(\Lambda)\partial_k - mc)\psi'(\vec{x}') = 0 \quad (4.183)$$

$$\begin{array}{c} \parallel \\ \Lambda_k^{k'}\partial_{k'} \end{array}$$

$$\left(i\hbar R(\Lambda)\gamma^k R^{-1}(\Lambda)\Lambda_k^{k'}\partial_{k'} - mc\right)\psi'(\vec{x}') = 0 \quad (4.184)$$

Vergleich mit [Comparison with](#)

$$\left(i\hbar\gamma^{k'}\partial_{k'} - mc\right)\psi'(\vec{x}') = 0 \quad (4.185)$$

liefert die Bestimmungsgleichung für die Transformatoren $R(\Lambda)$ [provides an equation for the transformation \$R\(\Lambda\)\$](#)

$$R(\Lambda)\gamma^k R^{-1}(\Lambda)\Lambda_k^{k'} = \gamma^{k'} \quad (4.186)$$

Um diese Gleichung zu lösen werden wir zunächst die Matrix $R(\Lambda)$ für infinitesimale Lorentz-Transformationen bestimmen und anschließend die endlichen Trafos untersuchen. Infinitesimale Lorentz-Trafos sind kleine Abweichungen von der identischen Abbildung $\Lambda = \hat{I}$. [In order to solve that equation we first determine the matrix \$R\(\Lambda\)\$ for infinitesimal Lorentz transformation. Later we investigate finite transformation. Infinitesimal Lorentz transformations are small deviations from the identify operator \$\Lambda = \hat{I}\$.](#)

Schreiben [Start from](#)

$$\Lambda_k^{k'} = \delta_k^{k'} + g^{k'l} d\omega_{l'k} \quad (4.187)$$

und

$$\Lambda_{k'}^k = \delta_{k'}^k + g^{kl} d\omega_{k'l} \quad (4.188)$$

mit den zunächst noch offenen infinitesimalen Parametern $d\omega_{lk}$. [where the infinitesimal parameters \$d\omega_{lk}\$ are still unknown.](#)

Einsetzen in Orthogonalitätsrelation 4.165 [Insert in orthogonality relation 4.165](#)

$$\Lambda_{j'}^i \Lambda_k^{j'} = \delta_k^i = (\delta_{j'}^i + g^{il} d\omega_{j'l}) \left(\delta_k^{j'} + g^{j'l'} d\omega_{l'k} \right) \quad (4.189)$$

$$= \delta_{j'}^i \delta_k^{j'} + \delta_{j'}^i g^{j'l'} d\omega_{l'k} + \delta_k^{j'} g^{il} d\omega_{j'l} + \mathcal{O}(d\omega^2) \quad (4.190)$$

$$\approx \delta_k^i + g^{il'} d\omega_{l'k} + g^{il} d\omega_{kl} \quad (4.191)$$

$$\approx \delta_k^i + g^{il} (d\omega_{lk} + d\omega_{kl}) \quad (4.192)$$

$$\Rightarrow d\omega_{lk} = -d\omega_{kl} \quad (4.193)$$

Machen jetzt im Sinne einer Taylor-Entwicklung den Ansatz [Now ansatz of a Taylor-like series](#)

$$R(\Lambda) = \hat{I} - \frac{i}{4} \hat{U}_{ij} d\omega^{ij} \quad (4.194)$$

\nwarrow
 4x4 Matrizen

mit den noch zu bestimmenden Koeffizienten \hat{U}_{ij} und setzen diesen Ansatz in unsere Bestimmungsgleichung für die $R(\Lambda)$ ein: [where the coefficients \$\hat{U}_{ij}\$ need to be determined. Use the ansatz in the equation that determines the \$R\(\Lambda\)\$:](#)

$$R(\Lambda) \gamma^k R^{-1}(\Lambda) \Lambda_k^{k'} = \gamma^{k'} \quad (4.195)$$

$$\rightarrow \left(\hat{I} - \frac{i}{4} U_{ij} d\omega^{ij} \right) \gamma^k \left(\hat{I} + \frac{i}{4} U_{mn} d\omega^{mn} \right) \left(\delta_k^{k'} + g^{k'l'} d\omega_{l'k} \right) = \gamma^{k'} \quad (4.196)$$

Ausmultiplikation und Beschränkung auf Terme erster Ordnung liefert [Expanding and considering first-order terms](#)

$$\gamma^k \underbrace{g^{k'l'}}_{d\omega_{l'k}} = \frac{i}{4} d\omega^{ij} \hat{U}_{ij} \gamma^{k'} - \frac{i}{4} \gamma^{k'} \hat{U}_{mn} d\omega^{mn} \quad (4.197)$$

$$\gamma_k d\omega^{k'k} = \frac{i}{4} d\omega^{ij} \left(\hat{U}_{ij} \gamma^{k'} - \gamma^{k'} \hat{U}_{ij} \right) \quad (4.198)$$

$\parallel \leftarrow d\omega^{ij} = -d\omega^{ji}$

$$\frac{1}{2} d\omega^{ij} (\gamma_j \delta_i^{k'} - \gamma_i \delta_j^{k'})$$

$$\Rightarrow 2i \left(\gamma_i \delta_j^{k'} - \gamma_j \delta_i^{k'} \right) = \left(\hat{U}_{ij} \gamma^{k'} - \gamma^{k'} \hat{U}_{ij} \right) = \left[\hat{U}_{ij}, \gamma^{k'} \right] \quad (4.199)$$

lineares Gleichungssystem in den Matrizen \hat{U}_{ij} [leads to a system of linear equations for the \$\hat{U}_{ij}\$](#)

Wird gelöst durch [Solution given by](#)

$$\hat{U}_{ij} = \frac{i}{2} [\gamma_i, \gamma_j] \quad (4.200)$$

Beweis: Übung [Proof: Exercise](#)

Damit haben wir die gesuchte Transformationsmatrix [Transformation matrix thus given by](#)

$$R(\Lambda) = \hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega^{ij} \quad (4.201)$$

für eine infinitesimale Lorentz-Trafo Λ erhalten. Da jede endliche Lorentz-Transformation als Hintereinanderausführung unendlich vieler infinitesimaler

Lorentz-Trafos geschrieben werden kann, ist somit auch die Lorentz-Invarianz der Dirac-Gleichung gezeigt. [for an infinitesimal Lorentz transformation. Since any finite transformation can be obtained from the successive application of an infinite number of infinitesimal transformations, this proves the Lorentz invariance of the DE.](#)

4.4 Lorentztransformation der Viererstromdichte Lorentz transformation of 4-current density

In 4.1 haben wir die Viererstromdichte [In 4.1 the 4-current density](#)

$$j^k = c \psi^+ \gamma^0 \gamma^k \psi \quad (4.202)$$

eingeführt. Wir transformiert sie sich von Σ zu Σ' ? [has been introduced. How does it transform from \$\Sigma\$ to \$\Sigma'\$?](#)

$$j^{k'}(\vec{x}') = c \underbrace{\psi'^+(\vec{x}')}_{\psi^+(\vec{x})R^+(\Lambda)} \gamma^0 \gamma^{k'} \underbrace{\psi'(\vec{x}')}_{R(\Lambda)\psi(\vec{x})} \quad (4.203)$$

Brauchen R^+ für die weitere Rechnung. [Need to know \$R^+\$ in the following.](#)

Für infinitesimale Lorentz-Trafo ergab sich [For the infinitesimal Lorentz transformation we have just obtained](#)

$$R(\Lambda) = \hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega^{ij}. \quad (4.204)$$

Jetzt N Rotationen hintereinander ausführen. [Consider now \$N\$ successive rotations](#)

$$R = \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega_{(1)}^{ij} \right) \dots \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega_{(N)}^{ij} \right) \quad (4.205)$$

$$\Rightarrow R^+ = \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j]^+ d\omega_{(N)}^{ij} \right) \dots \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j]^+ d\omega_{(1)}^{ij} \right) \quad (4.206)$$

sowie [as well as](#)

$$R^{-1} = \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega_{(N)}^{ij} \right)^{-1} \dots \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega_{(1)}^{ij} \right)^{-1} \quad (4.207)$$

multiplizieren von links und rechts mit γ_0 und nutzen aus, daß $(\gamma^0)^2 = \hat{I}$ [pre-multiply \(left multiply\) and post-multiply \(right multiply\) by \$\gamma_0\$](#)

$$\gamma_0 R^{-1} \gamma_0 = \gamma^0 \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega_{(N)}^{ij} \right)^{-1} \gamma_0 \dots \gamma_0 \left(\hat{I} + \frac{1}{8} [\gamma_i, \gamma_j] d\omega_{(1)}^{ij} \right)^{-1} \gamma_0 \quad (4.208)$$

$$= \left(\hat{I} - \frac{1}{8} \gamma^0 [\gamma_i, \gamma_j] \gamma^0 d\omega_{(N)}^{ij} \right) \dots \left(\hat{I} - \frac{1}{8} \gamma_0 [\gamma_i, \gamma_j] \gamma_0 d\omega_{(1)}^{ij} \right) \quad (4.209)$$

(der letzte Schritt folgt aus der infinitesimalen Kleinheit der Elemente der Lorentztransformation [in the last step the infinitesimal smallness of the Lorentz transformation was exploited](#))

Für die γ -Matrizen gilt [For the \$\gamma\$ matrices it holds](#)

$$[\gamma_i, \gamma_j]^+ = -\gamma^0 [\gamma_i, \gamma_j] \gamma^0 \quad (4.210)$$

und aus dem Vgl. der Gleichungen für R^+ und $\gamma^0 R^{-1} \gamma^0$ folgt [and from the comparison of the equations for \$R^+\$ and \$\gamma^0 R^{-1} \gamma^0\$ it follows that](#)

$$\gamma^0 R^{-1} \gamma^0 = R^+. \quad (4.211)$$

Damit [Thus](#)

$$j^{k'}(\vec{x}') = c \psi^+(\vec{x}) \gamma^0 R^{-1} \underbrace{\gamma^0 \gamma^0}_{\hat{i}} \gamma^{k'} R \psi(\vec{x}) \quad (4.212)$$

$$= c \psi^+(\vec{x}) \gamma^0 \underbrace{R^{-1} \gamma^{k'} R}_{\gamma^k \Lambda_k^{k'}} \psi(\vec{x}) \quad (4.213)$$

(vgl. cf. Eq. 4.186)

$$= c \psi^+(\vec{x}) \gamma^0 \gamma^k \Lambda_k^{k'} \psi(\vec{x}) \quad (4.214)$$

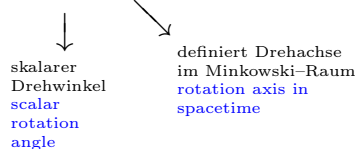
$$= \Lambda_k^{k'} j^k(\vec{x}) \quad (4.215)$$

D.h. die Stromdichte wird wie ein Vierervektor Lorentz-transformiert! [Obviously, the 4-current density transforms like a 4-vector!](#)

Bem: Bisher nur Transformationen unter infinitesimaler Lorentz-Transformation betrachtet. Wie kommen wir zu endlichen Transformationen? [By now we have only considered infinitesimal Lorentz transformation. Now we move on to finite transformations.](#)

Betrachten Hintereinanderausführung von N gleichartigen infinitesimalen Transformationen, dann ist [Consider the \$N\$ successive infinitesimal transformations. It holds](#)

$$d\omega_{ij} = \frac{\omega}{N} n_{ij} \quad (4.216)$$



damit [thus](#)

$$\Lambda_k^{k'} = \delta_k^{k'} + g^{k'l} d\omega_{lk} \quad (4.217)$$

$$= \delta_k^{k'} + \frac{\omega}{N} g^{k'l} n_{lk} \quad (4.218)$$

$$= \delta_k^{k'} + \frac{\omega}{N} n_k^{k'} \quad (4.219)$$

$$= \hat{I} + \frac{\omega}{N} \hat{n} \quad (4.220)$$

damit endliche Lorentz-Transformation eines Vierervektor \vec{x} als [Finite Lorentz transformation of a 4-vector thus given as](#)

$$\vec{x}' = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^N \vec{x} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{I} + \frac{\omega}{N} \hat{n} \right)^N \vec{x} = e^{\omega \hat{n}} \vec{x} \quad (4.221)$$

\uparrow
 $(e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + \frac{x}{n})^n)$

betrachten speziell die Matrix [Consider in particular the matrix](#)

$$\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.222)$$

Dann gilt für $m \in \mathbb{N}$ [It holds for \$m \in \mathbb{N}\$](#)

$$\hat{n}^{2m+1} = \hat{n}, \quad \hat{n}^{2m} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{r}. \quad (4.223)$$

Damit ergibt sich [Hence we obtain](#)

$$e^{\omega \hat{n}} = \hat{I} + \underbrace{\left(\omega + \frac{\omega^3}{3!} + \dots \right)}_{\sinh(\omega)} \hat{n} + \underbrace{\left(\frac{\omega^2}{2!} + \frac{\omega^4}{4!} + \dots \right)}_{\cosh(\omega)-1} \hat{r} \quad (4.224)$$

$$= \begin{pmatrix} \cosh \omega & -\sinh \omega & 0 & 0 \\ -\sinh \omega & \cosh \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.225)$$

Vgl. mit Kapitel 4.3 zeigt, daß wir hiermit die Lorentztransformation für die Bewegung von Σ' entlang \vec{e}_x bezüglich Σ mit der Geschwindigkeit v gefunden haben,

wobei $\tanh \omega = \frac{v}{c}$. The comparison with chapter 4.3 shows that we have arrived at the Lorentz transformation that describes the translations of Σ' along the x direction with respect to Σ with the velocity v . Here $\tanh \omega = \frac{v}{c}$.

Die zu Λ zugehörige Matrix $R(\Lambda)$ ergibt sich aus The matrix $R(\Lambda)$ corresponding to Λ is obtained as

$$R(\Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{I} + \frac{\omega}{8N} [\gamma_i, \gamma_j] n^{ij} \right)^N \quad (4.226)$$

mit $\hat{n} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ ergibt sich one obtains (4.227)

$$R(\Lambda) = \cosh \frac{\omega}{2} \hat{I} + \sinh \frac{\omega}{2} \hat{\alpha}_1. \quad (4.228)$$

(dabei Reihenentwicklung, wie oben ausgenutzt Here Taylor series exploited, as shown above)

$$\text{mit } \hat{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.229)$$

Im Auftreten des halben Drehwinkels in der Transformation $R(\Lambda)$ kommt die Doppeldeutigkeit der Spinor–Drehgesetze zum Ausdruck: Ein Spinor geht erst bei einer Drehung um 4π wieder in sich selbst über (vgl. Abschnitt 3.4). Deshalb müssen physikalisch beobachtbare Größen in der Spinor–Theorie immer bilinear in den Spinoren $\psi(\vec{x})$ sein. Nur so gehen Observablen bei Raumdrehung um 2π in sich selbst über. The appearance of the one-half angle in the transform $R(\Lambda)$ is due to the transformation properties of spinors: The spinor rotation will rotate the spinor through an angle one-half the measure of the angle of the corresponding vector rotation, cf. 3.4. For this reason observables need to be bilinear in the spinors $\psi(\vec{x})$.

4.5 Lösungen der freien Dirac–Gleichung Free particle solutions of the Dirac equation

bringen zunächst Dirac–Gleichung start by transforming the DE

$$(i\hbar \gamma^k \partial_k - mc)\psi = 0 \quad (4.230)$$

in eine der Schrödinger–Gleichung verwandte Form. Multiplikation mit $c\gamma^0 = c\beta$ ergibt

in a SE-like form. Multiplication by $c\gamma^0 = c\beta$ results in

$$\left(i\hbar c \underbrace{\gamma^0 \gamma^0}_{\hat{I}} \frac{\partial}{c \partial t} + \sum_{\mu=1}^3 i\hbar c \gamma^0 \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc^2 \beta \right) \psi = 0 \quad (4.231)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (4.232)$$

mit [where](#)

$$\hat{H} = - \sum_{\mu=1}^3 i\hbar c \alpha_\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + mc^2 \beta = c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2 \beta \quad (4.233)$$

Ansatz [ansatz](#)

$$\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (4.234)$$

führt auf Eigenwertgleichung [leads to the eigenvalue equation](#)

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (4.235)$$

\hat{H} hängt nicht vom Ort \vec{x} ab, daher vertauschen \hat{H} und \hat{p} und haben die gleichen Eigenfunktionen. Eigenfunktionen des Impulsoperators sind bekanntlich ebene Wellen, daher [\hat{H} has no spatial dependence, therefore \hat{H} and \hat{p} commute and have a common set of eigenvectors. Plane waves are eigenfunctions of the momentum operator, hence](#)

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)} \quad (4.236)$$

Für die Amplitude $\psi(\vec{p})$ setzen wir einen Bispinor an [Assume a bispinor to describe the amplitude \psi\(\vec{p}\)](#)

$$\psi(p) = \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} \quad (4.237)$$

(Begründung dafür wird gleich offensichtlich [for reasons that will become obvious soon](#))

und gehen damit in [and enter](#)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi \quad (4.238)$$

unter Beachtung von [observing that](#)

$$\alpha_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_\mu \\ \hat{\sigma}_\mu & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \quad (4.239)$$

ergibt sich die Matrix-Gleichung [leads to the matrix equation](#)

$$\begin{pmatrix} mc^2 \hat{I} & c\hat{\sigma}\vec{p} \\ c\hat{\sigma}\vec{p} & -mc^2 \hat{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} \quad (4.240)$$

Das entsprechende homogene Gleichungssystem [The corresponding homogenous system of equations](#)

$$\begin{pmatrix} (mc^2 - E)\hat{I} & c\hat{\vec{\sigma}}\vec{p} \\ c\hat{\vec{\sigma}}\vec{p} & -\hat{I}(mc^2 + E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \varphi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.241)$$

kann in zwei Gleichungssysteme aufgespalten werden [may be split into two system of equations](#)

$$(mc^2 - E)\hat{I}\chi_0 + c\hat{\vec{\sigma}}\vec{p}\varphi_0 = 0 \quad (4.242)$$

und [and](#)

$$c\hat{\vec{\sigma}}\vec{p}\chi_0 - (mc^2 + E)\hat{I}\varphi_0 = 0. \quad (4.243)$$

Gl. 4.243 ergibt [Eq. 4.243 yields](#)

$$\varphi_0 = \frac{c\hat{\vec{\sigma}}\vec{p}}{mc^2 + E}\chi_0. \quad (4.244)$$

Damit gehen wir in Gl. 4.242 ein und erhalten [inserting this in Eq. 4.242 one obtains](#)

$$(mc^2 - E)(mc^2 + E)\hat{I}\chi_0 + c^2(\hat{\vec{\sigma}}\vec{p})^2\chi_0 = 0. \quad (4.245)$$

Da dies für alle χ_0 gilt, folgt unter Ausnutzen der Identität [Since this holds for any \$\chi_0\$ one obtains by exploiting the identity](#)

$$(\vec{A}\hat{\vec{\sigma}})(\vec{B}\hat{\vec{\sigma}}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i(\vec{A} \times \vec{B})\hat{\vec{\sigma}} \quad (4.246)$$

(Beweis: Übung [Proof: Exercise](#))

$$\text{mit } \text{where } \vec{A} = \vec{B} = \vec{p} \quad (4.247)$$

die Energiedispersion [the energy dispersion](#)

$$E^2 - m^2c^4 - c^2p^2 = 0 \quad (4.248)$$

$$\Rightarrow E_{\pm}(p) = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}. \quad (4.249)$$

und damit (Energien E sind jetzt „physikalisch“ positiv) [and hence \(with positive energies \$E\$ \)](#)

$$\psi_{\pm}(p) = N_{\pm} \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \frac{c\hat{\vec{\sigma}}\vec{p}}{mc^2 \pm E}\chi_0 \end{pmatrix} \quad (4.250)$$

mit Normierungsfaktor N_{\pm} [where \$N_{\pm}\$ is a normalization constant.](#)

χ_0 kann offensichtlich beliebig gewählt werden und als Linearkombination zweier Basisvektoren χ_0 may be arbitrarily chosen and can be represented as linear combination of two basis vectors

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.251)$$

dargestellt werden.

Damit ergibt sich der Amplitudenvektor **Thus the vector amplitude is given as**

$$\psi^{(\mu,\lambda)}(\vec{p}) = N_\lambda \begin{pmatrix} \chi_\mu \\ \frac{c\vec{\sigma}\vec{p}}{mc^2 + \lambda E(p)} \chi_\mu \end{pmatrix} \quad (4.252)$$

$$\text{mit } \mu = \pm 1 \quad (4.253)$$

$$\lambda = \pm 1. \quad (4.254)$$

Die vier durch μ und λ bestimmten Bispinoren $\psi^{(\mu,\lambda)}$ bilden eine Orthogonalbasis, wenn **The four bispinors $\psi^{(\mu,\lambda)}$ determined by μ and λ form an orthonormal basis provided it is chosen**

$$N_\lambda = \sqrt{\frac{E(p) + \lambda mc^2}{2E(p)}} \quad (4.255)$$

gewählt wird

Beliebige Wellenpakete lassen sich dann durch eine Superposition der Form **Arbitrary wave packets can then be represented by superpositions**

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3\vec{p} \sum_{\lambda,\mu}^{\pm 1} C_{\lambda,\mu}(\vec{p}, t) \psi^{(\mu,\lambda)}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x}\cdot\vec{p} - \lambda E(p)t)} \quad (4.256)$$

darstellen.

Nichtrelativistischer Grenzfall **non-relativistic limit**

$E(p) \approx mc^2 \dots$ Ruheenergie **rest energy**

$$\Rightarrow \frac{|\vec{p}|}{mc} \ll 1 \quad (4.257)$$

$$\psi^{(\mu,+)}(p) = \begin{pmatrix} \chi_\mu \\ \frac{c\vec{\sigma}\vec{p}}{mc^2 + E(p)} \chi_\mu \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \chi_\mu \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.258)$$

(weil **because** $N_+ \approx 1$)

D.h. für Lösungen mit positiver Energie ist dann nur der obere Spinor des Bispinors relevant. **Need to consider only the upper spinor of the bispinor for positive energy solutions**

$$\psi^{(\mu,-)}(p) = \begin{pmatrix} \chi_\mu \\ \frac{c\hat{\sigma}\vec{p}}{mc^2 - E(p)}\chi_\mu \end{pmatrix} \cdot N_- \approx -\frac{1}{p} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\sigma}\vec{p}\chi_\mu \end{pmatrix} \quad (4.259)$$

\nearrow
 $E - mc^2 \approx \frac{p^2}{2m}$
 sowie
 $N_- \approx \frac{p}{2mc}$

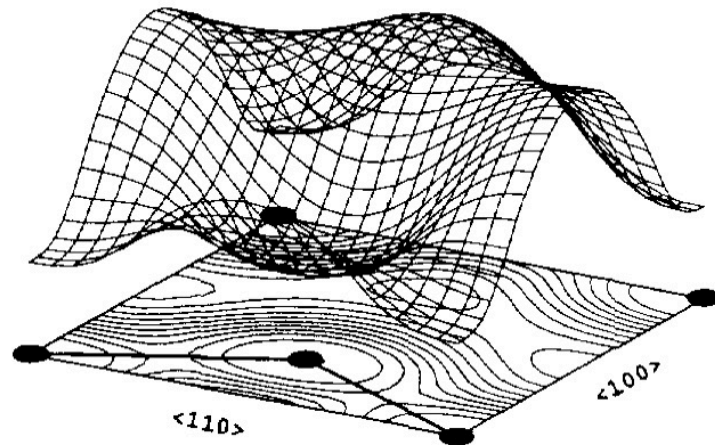
Für negative Energieeigenwerte $E(p)$ ist nur der untere Spinor relevant. **The lower spinor of the bispinor is relevant for negative energy solutions**

Bem: Um die Zustände mit negativer Energie physikalisch interpretieren zu können, nahm Dirac an, daß alle Zustände negativer Energie vollständig besetzt seien. Nach dem Pauli'schen Ausschließungsprinzip finden damit in dem sogenannten "Dirac-See" keine weiteren Teilchen Platz, und es ist ausgeschlossen, daß ein Elektron durch das Fallen in immer tiefere Zustände unendlich viel Strahlung emittiert. Anregung eines Teilchens aus dem Dirac-See erzeugt ein reales Elektron mit negativer Ladung, dem ein effektiv positiv geladenes Loch im Dirac-See gegenübersteht. Dieses Loch wird "Positron" genannt und stellt das Antiteilchen zum Elektron dar. Durch Paarvernichtung können Elektronen und Positronen annihilieren.

Note: The DE is extremely successful in describing electron dynamics. However, it possesses a peculiar feature: for each quantum state possessing a positive energy E , there is a corresponding state with energy $-E$. This is not a big difficulty when an isolated electron is considered, because its energy is conserved and negative-energy electrons may be left out. However, difficulties arise when effects of the electromagnetic field are considered, because a positive-energy electron would be able to shed energy by continuously emitting photons, a process that could continue without limit as the electron descends into lower and lower energy states. Real electrons clearly do not behave in this way. Dirac's solution to this was to turn to the Pauli exclusion principle. Electrons are fermions, and obey the exclusion principle, which means that no two electrons can share a single energy state within an atom (if spin is ignored). Dirac hypothesized that what we think of as the "vacuum" is actually the state in which all the negative-energy states are filled, and none of the positive-energy states. Therefore, if we want to introduce a single electron we would have to put it in a positive-energy state, as all the negative-energy states are occupied. Furthermore, even if the electron loses energy by emitting photons it would be forbidden from dropping below zero energy. Dirac also pointed out that a situation might exist in which all the negative-energy states are occupied except one. This "hole" in the "Dirac sea" of negative-energy electrons would respond to electric fields as though

it were a positively-charged particle. Initially, Dirac identified this hole as a proton. However, Robert Oppenheimer pointed out that an electron and its hole would be able to annihilate each other, releasing energy on the order of the electron's rest energy in the form of energetic photons; if holes were protons, stable atoms would not exist. Hermann Weyl also noted that a hole should act as though it has the same mass as an electron, whereas the proton is about two thousand times heavier. The issue was finally resolved in 1932 when the positron was discovered by Carl Anderson, with all the physical properties predicted for the Dirac hole.

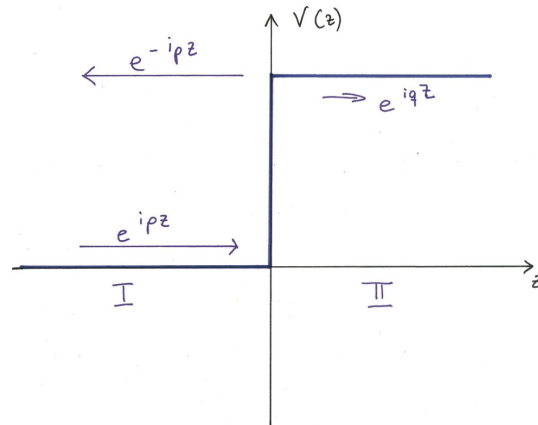
Interestingly, while the existence of the positron has been concluded from the Dirac equation, in the non-relativistic limit it can be well described using the Schrödinger equation. Due to the opposite charge sign, it behaves differently of course. While electrons are attracted by the positively charged ions in a solid, the positron senses a repulsive interaction and tries to avoid the ions. Shown below is the calculated ground-state wave function of a delocalized positron in diamond in the (110) plane. The positron is mainly localized in the interstitial region and the probability density is essentially zero around the nuclei. The maximum probability is located at the tetrahedral site, which is farthest from the nearest atomic positions. The positron lifetime calculated within two-component density functional theory as well as the calculated momentum distribution of the annihilating electron-positron pairs agree very well with experiment, cf. W.G. Schmidt and W.S. Verwoerd, *Phys. Lett. A* **222**, 275 (1996); R.W.N. Nilen, S.H. Connell, W.G. Schmidt, *et al.* *Appl. Surf. Sci.* **116**, 330 (1997).



[W.G. Schmidt and W.S. Verwoerd, *Phys. Lett. A* **222**, 275 (1996)]

4.6 Klein-Paradox Klein Paradox

Eines der einfachsten exakt lösbaren Probleme der nichtrelativistischen Quantenmechanik ist die Bewegung in Gegenwart einer Potentialschwelle [Particle scattering by potential barrier is one of the most simple problems in nonrelativistic quantum mechanics](#)



Erinnerung QMI: Streuung an Potentialstufe im Rahmen der Schrödingergleichung
 Reminder QM I: [Scattering by potential barrier within the Schrödinger equation](#)

$$\left\{-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right\} \psi(z) = E \psi(z) \quad (4.260)$$

Machen für die Bewegung in I den Ansatz eines freien Teilchens mit Energie E
 Ansatz for particle movement in range I for a free particle with energy E

$$\psi^I(z) = Ae^{ipz} + Be^{-ipz} \quad (4.261)$$

mit where $p = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

entsprechend in II [similarly in II](#)

$$\psi^{II}(z) = Ce^{iqz} + De^{-iqz} \quad (4.262)$$

mit where $q = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

Annahme spezieller Randbedingungen: von links einfallender Teilchenstrom [Assume specific boundary condition: particle current from the left](#)

$$\Rightarrow D = 0$$

Fordern Stetigkeit von ψ bei $z = 0$ [Require continuity of \$\psi\$ at \$z = 0\$](#)

$$\psi^I(0) = \psi^{II}(0) \Rightarrow A + B = C \quad (4.263)$$

Außerdem Stetigkeit von ψ' bei $z = 0$ [Additionally continuity of \$\psi'\$ at \$z = 0\$](#)

$$\psi^{I'}(0) = \psi^{II'}(0) \quad (4.264)$$

$$ip(A - B) = iqC \quad (4.265)$$

Aus 4.263 und 4.264 folgt [From 4.324 and 4.264 it follows](#)

$$A + B = \frac{p}{q}(A - B) \quad (4.266)$$

$$A\left(1 - \frac{p}{q}\right) = -B\left(1 + \frac{p}{q}\right)$$

$$\frac{B}{A} = \frac{p - q}{p + q} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \quad (4.267)$$

Mit 4.263 wir erhalten [In combination with 4.324 one finds](#)

$$\frac{C}{A} = \frac{B}{A} + 1 = \frac{p + q + p - q}{p + q} = \frac{2p}{p + q} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \quad (4.268)$$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte der Schrödinger-Gleichung [Probability current of Schrödinger equation](#)

$$\bar{j} = \frac{i\hbar}{2m} \{\psi \bar{\nabla} \psi^* - \psi^* \bar{\nabla} \psi\} \quad (4.269)$$

Untersuchung speziell einlaufenden Welle von links im obigen Beispiel [In particular incoming flux for the above example](#)

$$j_e = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ A e^{ipz} \frac{d}{dz} A^* e^{-ipz} - A^* e^{-ipz} \frac{d}{dz} A e^{ipz} \right\} = \frac{\hbar p}{m} |A|^2 \quad (4.270)$$

analog ergibt sich für den reflektierten und den transmittierten Strom [analogously we obtain for the reflected and transmitted flux](#)

$$j_r = -\frac{\hbar p}{m} |B|^2, \quad j_t = \frac{\hbar q}{m} |C|^2 \quad (4.271)$$

damit ergibt sich eine Reflexionswahrscheinlichkeit [thus reflection probability](#)

$$R = \frac{|j_r|}{|j_e|} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{p-q}{p+q} \right|^2 \quad (4.272)$$

und eine Transmissionswahrscheinlichkeit [and transmittance](#)

$$T = \frac{|j_t|}{|j_e|} = \frac{q}{p} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{q}{p} \left| \frac{2p}{p+q} \right|^2 = 1 - R \quad (4.273)$$

Für $E < V_0$ ist q imaginär, d.h. im Bereich II gibt es keine oszillierende Welle mehr, sondern eine exponentiell abfallende Funktion, $R = 1$. Das heißt wie im klassischen Fall liegt Totalreflexion vor. Im Gegensatz dazu ergibt die relativistische Rechnung ein überraschendes Ergebnis. Betrachten wir dazu jetzt das Streuproblem für Lösungen der Dirac-Gleichung: [q imaginary for \$E < V_0\$, i.e., in range II there is no oscillating wave anymore, but an exponential decay, i.e., \$R = 1\$. Similarly to the classical case we have total reflection. The corresponding result for the relativistic case, in contrast, is surprising. Consider scattering within the Dirac equation:](#)

Erinnerung: Lösung der Dirac-Gleichung für freies Teilchen gegeben durch [Reminder: Free-particle solution of the Dirac equation reads](#)

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{x} - \omega t)} \quad (4.274)$$

wobei [where](#)

$$\psi(\vec{p}) = N \begin{pmatrix} \chi_0 \\ \frac{c\hat{\sigma}\hbar\vec{p}}{mc^2 \pm E} \chi_0 \end{pmatrix} \quad (4.275)$$

mit N... Normierung [N ... normalization](#)

Betrachten wir jetzt ein von links ein einlaufendes Teilchen positiver Energie mit spin up und Wellenzahl $\vec{p} = (0, 0, p)$ [Consider particle that is incident from the lhs with spin up and wave vector \$\vec{p} = \(0, 0, p\)\$](#)

Ausnutzung von [exploit that](#)

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und wählen } N = A \quad (4.276)$$

führt auf [leads to](#)

$$\psi(\vec{p}) = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{chp}{mc^2+E} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.277)$$

Das heißt nach Abseparation der Zeitabhängigkeit ergibt sich für die von links einlaufende Welle in I [For the stationary solution of the particle flux from the lhs we obtain](#)

$$\psi_e^I(z) = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{chp}{mc^2+E} \\ 0 \end{pmatrix} e^{ipz} \quad (4.278)$$

und für die reflektierte Lösung in I setzen wir an [similar ansatz for the reflected wave function](#)

$$\psi_r^I(z) = B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{chp}{mc^2+E} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ipz} + C \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{chp}{mc^2+E} \end{pmatrix} e^{-ipz} \quad (4.279)$$

wobei der zweite Term der Möglichkeit der Spinumkehr Rechnung trägt. Für die nach II transmittierte Welle folgt entsprechend [Here the second terms accounts for the possibility of a spin flip. The ansatz for the transmitted wave function is](#)

$$\psi_t^II(z) = D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{chq}{mc^2+E-V_0} \\ 0 \end{pmatrix} e^{iqz} + E \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{chq}{mc^2+E-V_0} \end{pmatrix} e^{iqz} \quad (4.280)$$

Dabei ist der Impuls q im Bereich II durch die relativistische Energie-Impuls-Beziehung gegeben [Here the momentum \$q\$ in region II is given by the relativistic energy-momentum relation](#)

$$c\hbar q = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 c^4} \quad (4.281)$$

Die Koeffizienten A, B, C, D, E sind aus der Stetigkeit von ψ an der Potentialschwelle zu bestimmen. Aus [The continuity of \$\psi\$ at \$z = 0\$ yields A, B, C, D, E.](#) [From](#)

$$\psi_e^I(0) + \psi_r^I(0) = \psi_t^{II}(0) \quad (4.282)$$

folgt aus den Komponenten 2 und 4 [it follows by considering the bispinor components 2 and 4 that](#)

$$C = E = 0, \quad (4.283)$$

d.h. es findet keine Spinumkehr statt. Auswertung der Komponente 1 ergibt [i.e., there is no spin flip. From the first bispinor component we get](#)

$$A + B = D \Rightarrow \frac{A}{B} + 1 = \frac{D}{B} \quad (4.284)$$

und aus der dritten Komponente folgt [and the third bispinor component shows that](#)

$$(A - B) \frac{c\hbar p}{mc^2 + E} = D \frac{c\hbar q}{mc^2 + E - V_0} \quad (4.285)$$

$$\frac{A}{B} - 1 = \frac{D}{B} \underbrace{\frac{q(mc^2 + E)}{p(mc^2 + E - V_0)}}_{\kappa} = \frac{D}{B} \kappa \quad (4.286)$$

Aus 4.284 und 4.286 ergibt sich [from 4.284 and 4.286 one obtains](#)

$$\begin{aligned} \frac{A}{B} - 1 &= \left(\frac{A}{B} + 1\right) \kappa \\ \frac{A}{B} (1 - \kappa) &= 1 + \kappa \Rightarrow \frac{A}{B} = \frac{\kappa + 1}{1 - \kappa} \end{aligned} \quad (4.287)$$

Mit 4.284 [With 4.284](#)

$$\frac{D}{A} = \frac{B}{A} + 1 = \frac{1 - \kappa}{1 + \kappa} + 1 = \frac{2}{1 + \kappa} \quad (4.288)$$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte der Dirac-Gleichung gegeben durch [Probability current of Dirac equation given by](#)

$$j^k = c\psi^+\gamma^0\gamma^k\psi \quad (4.289)$$

Damit ergibt sich für die z-Komponente [In particular for the z component we obtain](#)

$$j^z = c\psi^+\gamma^0\gamma^3\psi \quad (4.290)$$

Mit [With](#)

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.291)$$

ergibt sich [one finds](#)

$$\gamma^0\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.292)$$

ergibt sich [and thus](#)

$$j^z = c(\psi_1^*\psi_3 - \psi_2^*\psi_4 + \psi_3^*\psi_1 - \psi_4^*\psi_2) \quad (4.293)$$

D.h. speziell für einfallende Lösung in I folgt [Hence incoming flux in I](#)

$$j_e^z = 2c|A|^2 \frac{chp}{mc^2+E} \quad (4.294)$$

und analog für reflektierte Welle in I und transmittierte Welle in II [and reflected flux in I as well as transmitted flux in II](#)

$$j_r^z = -2c|B|^2 \frac{chp}{mc^2+E} \quad (4.295)$$

$$j_t^z = 2c|D|^2 \frac{chq}{mc^2+E-V_0} \quad (4.296)$$

Damit Reflexionswahrscheinlichkeit [Thus reflectance](#)

$$R = \frac{|j_r^z|}{|j_e^z|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[\frac{1-\kappa}{1+\kappa} \right]^2 \quad (4.297)$$

und Transmissionswahrscheinlichkeit **and transmittance**

$$T = \frac{|j_t^z|}{|j_e^z|} = \frac{|D|^2}{|A|^2} \cdot \frac{q(mc^2 + E)}{p(mc^2 + E - V_0)} = \frac{4\kappa}{(1+\kappa)^2} \quad (4.298)$$

Offensichtlich gilt wieder **Obviously it holds** $R + T = 1$

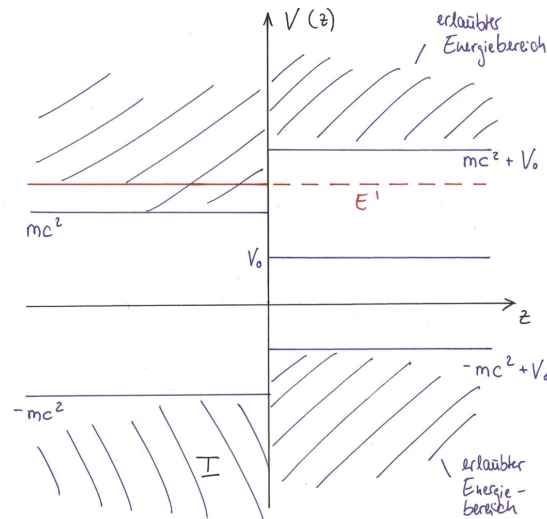
Der Impuls $\hbar q = \frac{1}{c} \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 c^4}$ ist imaginär für $|E - V_0| < mc^2$, d.h. für Momentum $\hbar q = \frac{1}{c} \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 c^4}$ imaginary for $|E - V_0| < mc^2$, i.e., for

$$-mc^2 + V_0 < E < mc^2 + V_0 \quad (4.299)$$

Für solche Energien fällt die Lösung im Bereich II exponentiell ab. Insbesondere für $E, V_0 \ll mc^2$ ist die Lösung **In this case the wave function decays exponentially in region II. The solution for $E, V_0 \ll mc^2$**

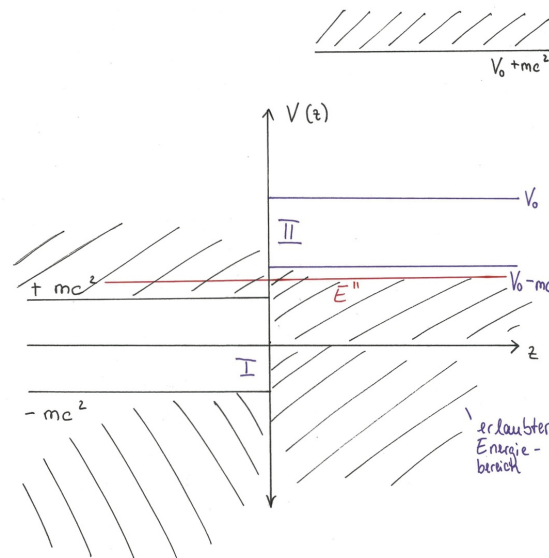
$$\psi_t^{II}(z) \sim e^{|q|z} \sim e^{-mcz/\hbar} \quad (4.300)$$

schnell abfallend. **decaying particularly rapidly.**



E' entspricht in I einem Teilchen mit positiver Energie, Lösung mit II mit E' liegt im verbotenen Gebiet \Rightarrow exponentieller Abfall der Funktion. **Particles in region I with energy E' are particles with positive energy. In region II, however, solutions with E' are not allowed. Therefore they decay exponentially**

Für $V_0 > E + mc^2$, d.h. für genügend große Potentialbarrieren, wird q wieder reell und man erhält eine oszillierende durchgehende Welle! **If, however, the potential is sufficiently high, $V_0 > E + mc^2$, q is real wave vector and we obtain an oscillating solution again!**



Die Energie E'' liegt sowohl links als auch rechts im Gebiet erlaubter Energie \Rightarrow durchgehende Stromdichte! **The energy E'' , in contrast, is allowed for both the regions I and II, therefore transmittance possible!**

Untersuchen Reflexionswahrscheinlichkeit **Reflectance**

$$R = \left[\frac{1-\kappa}{1+\kappa} \right]^2 \quad (4.301)$$

für $V_0 > mc^2 + E$

$$\kappa = \frac{q}{p} \frac{mc^2 + E}{mc^2 + E - V_0} < 0 \Rightarrow R > 1!! \quad (4.302)$$

Kleinsches Paradox **Klein Paradox**

Für $V_0 > E + mc^2 > 2mc^2$

- Transmission in klassisch verbotene Region! [transmission in classically forbidden region!](#)
- $R > 1$, d.h. mehr Teilchen reflektiert als eingestrahlt! [More particles are reflected than were incident!!](#)

Ursache des paradoxen Verhältnisses:

Die Dirac-Gleichung ist keine Einteilchengleichung, sondern eine relativistische Feldgleichung, die auch Teilchen-Antiteilchen-Paarerezeugungen beschreibt. Experimentell verifizierbar? Elektronen in der Nähe der Fermikante von Graphen verhalten sich annähernd wie masselose Dirac-Teilchen. Es gibt experimentelle Bemühungen, das zum Nachweis des Kleinschen Paradoxons auszunutzen!

[reason for paradoxical behavior:](#)

[Dirac equation is not a single-particle equation, but rather a relativistic field equation that also describes the creation of particle-antiparticle pairs!](#)

4.7 Pauli-Gleichung als nichtrel. Grenzfall der Dirac-Gleichung [Pauli equation, as the non-relativistic limit of the Dirac equation](#)

Starten wieder von der freien Dirac-Gleichung [Start again from the Dirac equation for free particles](#)

$$(i\hbar \gamma^k \partial_k - mc) \psi = 0. \quad (4.303)$$

Betrachten aber jetzt das Elektron in einem elektromagnetischen Feld mit dem Viererpotential [However, now we consider the electron as subject to an electromagnetic field described by the 4-potential](#)

$$\vec{A} = (\phi, -\vec{A}). \quad (4.304)$$

\uparrow
 skalares
 Po-
 tential
 electric
 potential

\nwarrow
 Vektorpotential magnetic potential

Nach dem Prinzip der minimalen Kopplung (vgl. 2.1 & 2.2) ersetzen wir jetzt den mechanischen Impuls durch den kanonisch konjugierten Impuls, d.h. [According to the principle of minimal coupling \(cf. 2.1 & 2.2\) we replace the mechanical momentum by the canonical or conjugate momentum, i.e.,](#)

$$\partial_i \rightarrow \partial_i + \frac{ie}{c\hbar} A_i \quad (4.305)$$

und erhalten damit die Dirac-Gleichung für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld. [and obtain the DE for an electron in the electromagnetic field.](#)

$$\left(\gamma^k \left(i\hbar \partial_k - \frac{e}{c} A_k \right) - mc \right) \psi = 0 \quad (4.306)$$

Multiplikation mit γ^0 und Beachtung von $\gamma^\mu = \beta\alpha_\mu$ führt uns wieder auf die Schrödinger'sche Form [By multiplication by \$\gamma^0\$ and considering that \$\gamma^\mu = \beta\alpha_\mu\$ one obtains a Schrödinger-like equation](#)

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad (4.307)$$

mit [where](#)

$$\hat{H} = c\vec{\alpha} \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) + e\phi + mc^2\beta.$$

Betrachten die entsprechende stationäre Gleichung [Consider the corresponding stationary equation](#)

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (4.308)$$

Analog zur Diskussion in 4.5 zerfällt diese in 2 gekoppelte Gleichungen für die Spinoren χ und φ des Bispinors $\psi = \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix}$. [Similarly to the case discussed in chapter 4.5 it can be separated in two equations for the spinors \$\chi\$ and \$\varphi\$ of the bispinor \$\psi = \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix}\$.](#)

Einsetzen der expliziten Form der α -Matrizen führt auf [Now we use the specific \$\alpha\$ matrices and obtain](#)

$$c\hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) \varphi + e\phi\chi = (E - mc^2)\chi \quad (4.309)$$

$$c\hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) \chi + e\phi\varphi = (E + mc^2)\varphi. \quad (4.310)$$

Stellen die 2. Gleichung nach φ um [Solve the second equation for \$\varphi\$](#)

$$\varphi = \frac{c\hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)}{E + mc^2 - e\phi}\chi \quad (4.311)$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall gilt [In the non-relativistic limit it holds](#)

$$E \simeq mc^2 \gg e\phi \quad (4.312)$$

daher [hence](#)

$$\varphi \approx \frac{1}{2mc} \hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) \chi. \quad (4.313)$$

Damit gehen wir in die erste Gleichung ein und erhalten [inserting this in the first equation one finds](#)

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) \right) \left(\hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) \right) \right] \chi + e\phi\chi = (E - mc^2)\chi \quad (4.314)$$

unter Ausnutzung von [by exploiting](#)

$$\hat{\sigma}_\alpha \hat{\sigma}_\beta = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}_\gamma + \delta_{\alpha\beta} \quad (4.315)$$

erhält man [one obtains](#)

$$\left(\hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right) \left(\hat{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right) = \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \hat{\sigma} (\vec{\nabla} \times \vec{A}), \quad (4.316)$$

und mit [and with](#)

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (4.317)$$

ergibt sich [that](#)

$$\boxed{\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \chi + e\phi\chi - \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\sigma} \vec{B} \chi = (E - mc^2)\chi}. \quad (4.318)$$

Das ist die im Kapitel 3.5 aufgestellte Pauli-Gleichung! Insbesondere zeigt sich, daß der im Kapitel 3.5 empirisch eingeführte Faktor $g = 2$ zwanglos aus der Dirac-Gleichung folgt! [This, however, corresponds to the Pauli equation empirically derived in chapter 3.5! In particular the fact that \$g = 2\$ is now automatically obtained. The Pauli equation is non-relativistic, but it does predict spin. As such, it can be thought of as occupying the middle ground between the \(i\) familiar Schrödinger equation \(on a complex scalar wavefunction\), which is non-relativistic and does not predict spin and the \(ii\) Dirac equation \(on a complex four-component spinor\), which is fully relativistic \(with respect to special relativity\) and predicts spin. Note that because of the properties of the Pauli matrices, if the magnetic vector potential \$\vec{A}\$ is equal to zero, then the equation reduces to the familiar Schrödinger equation for a particle in a purely electric potential \$\phi\$, except that it operates on a two component spinor. Therefore, we can see that the spin of the particle only affects its motion in the presence of a magnetic field.](#)

F

4.8 Zustände positiver und negativer Energie States with positive and negative energy

Wir haben gesehen, daß jeder quantenmechanische Zustand eines relativistischen Teilchens nach ebenen Wellen entwickelt werden kann, wobei ebene Wellen sowohl positiver als auch negativer Energie berücksichtigt werden müssen. Für die weiteren Untersuchungen, z.B. bei der Durchführung der Foldy-Wouthuysen-Transformation ist es zweckmässig, über einen Operator \hat{Z} zu verfügen, der das Vorzeichen der Energieeigenwerte ebener Wellen bestimmt. So soll bezgl. der aus den Eigenspinoren gebildeten ebenen Wellen gelten [We have seen that the plane-wave expansion of the wave function of relativistic particles requires plane waves with positive and negative energy. In the following we will need an operator \$\hat{Z}\$ that determines the sign of the energy eigenvalues of waves. It shall hold](#)

$$\hat{Z}\psi^{(\lambda,\mu)}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x}\cdot\vec{p}-\lambda E(p)t)} = \lambda\psi^{(\lambda,\mu)}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x}\cdot\vec{p}-\lambda E(p)t)} \quad (4.319)$$

Mit Hilfe des Hamilton-Operators des freien Teilchens können wir schreiben [Using the free-particle Hamiltonian we write](#)

$$\hat{Z} = \frac{\hat{H}_f}{|\hat{H}_f|} = \frac{c\vec{\alpha}\hat{p}+mc^2\beta}{\sqrt{m^2c^4+c^2\hat{p}^2}} \quad (4.320)$$

Der Vorzeichenoperator \hat{Z} ist wegen $\hat{H} = \hat{H}^+$ hermitesch und außerdem wegen

$$\hat{Z}^2 = \hat{I} \implies \hat{Z} = \hat{Z}^{-1} = \hat{Z}^+ \quad (4.321)$$

auch unitär. Wenden wir \hat{Z} auf eine Eigenlösung ψ_E der freien Dirac-Gleichung zur durch $E = \lambda E(p)$ definierten Energie an, dann erhalten wir wegen $\hat{H}_f\psi_E = E\psi_E$ [\$\hat{Z}\$ is hermitian because of \$\hat{Z} = \hat{Z}^+\$ and additionally unitary, because it holds \$\hat{Z}^+ = \hat{Z}^{-1}\$. If one applies \$\hat{Z}\$ on an eigenstate \$\psi_E\$ of the free-particle Dirac equation with \$E = \lambda E\(p\)\$ one obtains because of \$\hat{H}_f\psi_E = E\psi_E\$](#)

$$\hat{Z}\psi_E = \frac{\hat{H}_f}{|\hat{H}_f|}\psi_E = \frac{E}{|E|}\psi_E = \text{sgn } E\psi_E = \lambda\psi_E \quad (4.322)$$

Mit Hilfe des Operators \hat{Z} können wir Projektionsoperatoren \hat{P}_+ und \hat{P}_- konstruieren, die aus einem beliebigen Zustand alle ebenen Wellen positiver bzw. negativer Energie herausfiltern. Prinzipiell kann man jeden Bispinor ψ zerlegen in einen Anteil $\psi^{(+)}$, der aus einer Überlagerung aller ebenen Wellen mit positiver Energie besteht und einen Betrag $\psi^{(-)}$, der aus den Basiszuständen negativer Energie aufgebaut ist. [Based on \$\hat{Z}\$ projection operators \$\hat{P}_+\$ and \$\hat{P}_-\$ can be constructed that](#)

filter all plane waves of positive and negative energy contained in an arbitrary state. Every bispinor ψ can be divided in contribution $\psi^{(+)}$ that only contains plane waves of positive energy and $\psi^{(-)}$ that consists of negative energy plane waves.

$$\psi = \psi^{(+)} + \psi^{(-)} \quad (4.323)$$

Dann gilt natürlich $\hat{Z}\psi^{(+)} = \psi^{(+)}$ und $\hat{Z}\psi^{(-)} = -\psi^{(-)}$ und die gesuchten Projektionsoperatoren lauten Obviously it holds $\hat{Z}\psi^{(+)} = \psi^{(+)}$ as well as $\hat{Z}\psi^{(-)} = -\psi^{(-)}$ and the projectors are given by

$$\hat{P}_+ = \frac{1}{2}(1 + \hat{Z}), \quad \hat{P}_- = \frac{1}{2}(1 - \hat{Z}). \quad (4.324)$$

Tatsächlich erhalten wir mit diesen Projektoren Application of the projectors results in

$$\begin{aligned} \hat{P}_\pm \psi &= \frac{1}{2}(1 \pm \hat{Z})(\psi^{(+)} + \psi^{(-)}) \\ &= \frac{1}{2}(\psi^{(+)} + \psi^{(-)} \pm \hat{Z}\psi^{(+)} \pm \hat{Z}\psi^{(-)}) \\ &= \frac{1}{2}(\psi^{(+)} + \psi^{(-)} \pm \psi^{(+)} \mp \psi^{(-)}) = \psi^{(\pm)} \end{aligned} \quad (4.325)$$

Wir können jeden Operator bezgl. seiner Wirkung auf die Zustände positiver und negativer Energie charakterisieren. Ein gerader Operator $[\hat{A}]$ erzeugt bei seiner Anwendung auf einen Zustand positiver Energie $\psi^{(+)}$ bzw. auf einen Zustand negativer Energie $\psi^{(-)}$ wieder einen Zustand $\tilde{\psi}^{(+)}$ positiver bzw. einen Zustand $\tilde{\psi}^{(-)}$ negativer Energie Any operator can be classified according to his effect on positive and negative energy states. The application of even operators $[\hat{A}]$ on positive/negative energy states $\psi^{(+)}/\psi^{(-)}$ lead to positive/negative energy states $\tilde{\psi}^{(+)}/\tilde{\psi}^{(-)}$

$$[\hat{A}]\psi^{(+)} = \tilde{\psi}^{(+)} \quad , \quad [\hat{A}]\psi^{(-)} = \tilde{\psi}^{(-)}. \quad (4.326)$$

Ein ungerader Operator $\{\hat{A}\}$ bildet dagegen Zustände, die aus Eigenzuständen positiver Energie aufgebaut sind, auf solche Zustände ab, die nur aus Eigenzuständen negativer Energie bestehen und umgekehrt, also Odd operators, in contrast, transform positive energy states in negative energy states, and vice versa

$$\{\hat{A}\}\psi^{(+)} = \tilde{\psi}^{(-)} \quad \text{und} \quad \{\hat{A}\}\psi^{(-)} = \tilde{\psi}^{(+)} \quad (4.327)$$

Jeder Operator \hat{A} kann in einen geraden und einen ungeraden Operator zerlegt werden. Man findet Any operator \hat{A} can be decomposed in an even and an odd operator. One finds

$$[\hat{A}] = \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{Z}\hat{A}\hat{Z}) \quad \text{und} \quad \{\hat{A}\} = \frac{1}{2}(\hat{A} - \hat{Z}\hat{A}\hat{Z}) \quad (4.328)$$

woraus sich sofort $\hat{A} = [\hat{A}] + \{\hat{A}\}$ ergibt. Zum Beweis von 4.328 wenden wir $[\hat{A}]$ auf einen Zustand $\psi^{(\pm)}$ an und erhalten [Which results immediately in \$\hat{A} = \[\hat{A}\] + \{\hat{A}\}\$.](#) [In order to prove 4.328 we apply \$\[\hat{A}\]\$ on \$\psi^{\(\pm\)}\$ and obtain](#)

$$[\hat{A}]\psi^{(\pm)} = \frac{1}{2}(\hat{A}\psi^{(\pm)} + \hat{Z}\hat{A}\hat{Z}\psi^{(\pm)}) = \frac{1}{2}(\hat{A}\psi^{(\pm)} \pm \hat{Z}\hat{A}\psi^{(\pm)}) = \frac{1}{2}(1 \pm \hat{Z})\hat{A}\psi^{(\pm)} \quad (4.329)$$

woraus sich mit 4.324 ergibt [in combination with 4.324 one obtains](#)

$$[\hat{A}]\psi^{(\pm)} = \hat{P}_{\pm}\hat{A}\psi^{(\pm)} = \tilde{\psi}^{(\pm)}. \quad (4.330)$$

Der links von \hat{A} stehende Projektionsoperator \hat{P}_{\pm} sorgt jetzt dafür, daß unabhängig von der durch \hat{A} vermittelten Abbildung im Endergebnis nur Zustände positiver oder negativer Energie verbleiben. [The operator \$\hat{P}_{\pm}\$ on the lhs of \$\hat{A}\$ ensures results of purely positive or negative energies.](#)

Im Fall des freien Teilchens kommutieren Hamilton-Operator und Impulsoperator wegen 4.322 mit dem Vorzeichenoperator. Wegen 4.328 und $\hat{Z}^2 = 1$ sind daher diese beiden Operatoren gerade, denn [The Hamiltonian for free particles and the momentum operator commute with the sign operator, because of 4.322. Since 4.328 and \$\hat{Z}^2 = 1\$, these two operators are even, since](#)

$$[\hat{H}] = \frac{1}{2}(\hat{H} + \hat{Z}\hat{H}\hat{Z}) = \frac{1}{2}(\hat{H} + \hat{Z}\hat{Z}\hat{H}) = \hat{H}. \quad (4.331)$$

Das hat insbesondere zur Folge, daß der Quantenzustand eines freien Teilchens, der ausschließlich aus ebenen Wellen positiver (oder negativer) Energien zusammengesetzt ist, auch in Zukunft nur aus positiven (oder negativen) Basiszuständen zusammengesetzt bleibt. Mit anderen Worten, die zeitliche Evolution eines freien Teilchens führt nicht zur Mischung von Zuständen positiver und negativer Energien. Im Gegensatz dazu ist der Ortsoperator ein gemischter Operator. Aus den Vertauschungsrelationen für Orts- und Impulsoperator läßt sich ableiten [Therefore the time evolution of a free particle with either positive or negative energy states does not lead to the mixing of states with positive and negative energies. This contrasts with the position operator. From the commutator relation between position and momentum operator one obtains](#)

$$[\hat{x}, \hat{Z}] = i\hbar \frac{\partial \hat{Z}}{\partial \hat{p}}. \quad (4.332)$$

wobei [where](#)

$$\frac{\partial \hat{Z}}{\partial \hat{p}} = \frac{c\vec{\alpha}}{|H_f|} - \frac{H_f c^2 \hat{p}}{(m^2 c^4 + c^2 \hat{p}^2)^{3/2}} = \frac{c\vec{\alpha}}{|H_f|} - \frac{c^2 \hat{p} \hat{Z}}{H_f^2} \quad (4.333)$$

das heißt [i.e.](#)

$$\hat{x} \hat{Z} - \hat{Z} \hat{x} = i\hbar c \left(\frac{\vec{\alpha}}{|H_f|} - \frac{c\hat{p}\hat{Z}}{H_f^2} \right) \quad (4.334)$$

Durch Multiplikation mit \hat{Z} von rechts erhalten wir hieraus unter Beachtung von $\hat{Z}^2 = 1$ den ungeraden Anteils des Ortsoperators [Multiplying from the left with \$\hat{Z}\$ and remembering that \$\hat{Z}^2 = 1\$ one obtains for the odd contribution to the position operator](#)

$$\{\hat{x}\} = \frac{1}{2}(\hat{x} - \hat{Z}\hat{x}\hat{Z}) = \frac{i\hbar c}{2} \left(\frac{\vec{\alpha}\hat{Z}}{|H_f|} - \frac{c\hat{p}}{H_f^2} \right). \quad (4.335)$$

Da dieser Anteil nicht verschwindet, aber auch nicht mit \hat{x} übereinstimmt, ist der Ortsoperator weder gerade noch ungerade. [This contribution does neither vanish, nor is it identical with \$\hat{x}\$. Therefore the position operator is neither even nor odd.](#)

4.9 Foldy-Wouthuysen-Transformation

Foldy-Wouthuysen Transformation

Die im Kapitel 4.7 dargestellte Ableitung der Pauli-Gleichung aus der Dirac-Gleichung ist ein wichtiges Indiz für die Bestätigung der grundlegenden Bedeutung dieser quantenmechanischen Evolutionsgleichung. Allerdings hat das obige Verfahren den Nachteil, daß es nur für stationäre Lösungen und damit zeitunabhängige elektromagnetische Felder funktioniert. Es wäre interessant zu erfahren, wie die Pauli-Gleichung aussehen würde, wenn man diese Zeitabhängigkeiten berücksichtigt. Wir werden sehen, daß man eine solche Darstellung in Form einer Reihenentwicklung bekommen kann, die in den niedrigsten Ordnungen die Pauli-Gleichung, in höheren Ordnungen aber auch relativistische Korrekturen liefert, die experimentell überprüfbar sind und deshalb wesentlich zur Bestätigung der Dirac-Gleichung beitragen. Im folgenden werden wir ein systematisches Verfahren behandeln, um den bei positiven Energien relativ kleinen unteren Spinor φ des Bispinors ψ aus der Dirac-Gleichung zu eliminieren. Das Verfahren ist eine störungstheoretische Variante der im Kapitel 1.1 besprochenen Methode der kanonischen Transformation. [In chapter 4.7 we derived the Pauli equation from the Dirac equation starting from the assumption of free particles and for the stationary case. Now it would be interesting to know what the Pauli equation looks like for time dependent fields. Below](#)

it will be shown how a series expansion yields in low order the Pauli equation, and relativistic corrections in the higher-order terms. Thereby we systematically eliminate the (for positive energies small) lower spinor φ of the bispinors ψ resulting from the Dirac equation, using canonical transformation as introduced in chapter 1.1.

Ausgangspunkt unserer Überlegungen ist die Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld in der Schrödinger'schen Form 4.307. Thereby the Schrödinger-like representation 4.307 of the Dirac equation for an particle in an electromagnetic field serves as starting point.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad \hat{H} = c\vec{\alpha}(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}) + e\phi + mc^2\beta \quad (4.336)$$

Würden wir die Terme mit den nichtdiagonalen Matrizen α_μ nicht berücksichtigen, dann wären die beiden Zweierspinoren χ und φ des Bispinors ψ in der Dirac-Gleichung bereits entkoppelt und wir hätten eine Evolutionsgleichung für χ gewonnen. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß die beiden Zweierspinoren durch die Matrizen α , nicht aber durch β , gemischt werden. Das Ziel der folgenden Überlegungen und Rechnungen wird es sein, die mischenden Operatoren mit einer kanonischen Transformation aus der Dirac-Gleichung zu eliminieren. If there were no non-diagonal matrices α_μ , the spinors χ and φ of the bispinor ψ would not couple and we had an equation of motion for χ . The matrix β does not mix the components. The aim of the following transformations consists in eliminating the operators that mix the components.

Im Prinzip spielt die Matrix β eine ähnliche Rolle wie der Vorzeichenoperator. Während \hat{Z} die Basiszustände der ebenen Wellenlösungen bezgl. des Vorzeichens der Energie unterscheidet, kennzeichnet β die oberen und unteren Bispinorkomponenten. The matrix β discriminates between the upper and the lower spinors, similarly as \hat{Z} does

$$\beta \begin{pmatrix} \chi \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix} \quad (4.337)$$

Man kann auf diese Weise analog zum obigen Vorgehen Projektoren formulieren, die entweder die obere oder die untere Spinorkomponente aus einem Bispinor herausfiltern, Similarly to the procedure used above one may construct projectors that filter the upper or the lower spinor from the bispinor

$$\hat{B}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{I} \pm \beta), \quad \hat{B}_+ \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B}_- \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix} \quad (4.338)$$

Außerdem können wir wieder jeden Operator \hat{A} in einen geraden Anteil $[\hat{A}]$ und einen ungeraden Anteil $\{\hat{A}\}$ zerlegen, die jetzt aber bezgl. der Matrix β gebildet werden. Also, any operator \hat{A} can be decomposed in an even contribution $[\hat{A}]$ and an odd contribution $\{\hat{A}\}$, using the β matrix

$$[\hat{A}] = \frac{1}{2}(\hat{A} + \beta\hat{A}\beta), \quad \{\hat{A}\} = \frac{1}{2}(\hat{A} - \beta\hat{A}\beta) \quad (4.339)$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß β ein gerader Operator mit $[\beta] = \beta$ ist, während die Matrizen α_μ ungerade (mischende) Operatoren sind, d.h. $\{\alpha_\mu\} = \alpha_\mu$ gilt. Using the commutator relations for the α and β matrices it is easily shown that β is an even operator $[\beta] = \beta$ and α_μ is an odd operator, i.e. $\{\alpha_\mu\} = \alpha_\mu$.

Konzept der Foldy-Wouthuysen-Transformation, concept behind the Foldy-Wouthuysen Transformation

Das Ziel dieser Transformation ist wie oben bereits erwähnt, alle mischenden - also ungeraden - Beiträge aus dem Hamilton-Operator zu eliminieren. Obwohl man zeigen kann, daß eine solche Transformation existieren muß, wird uns deren explizite Bestimmung im allgemeinen Fall beliebiger elektromagnetischer Felder nur störungstheoretisch gelingen. Die Grundidee besteht in der Einführung einer unitären Transformation des Zustands wie in Kapitel 1.1 diskutiert. Our aim consists in eliminating all mixing, i.e., odd contributions of the Hamiltonian. While it can be shown that this is possible in principle, in the the general case we only be able to do it perturbatively. Thereby we start by performing a unitary transformation of the state as discussed in chapter 1.1

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\hat{S}}\psi, \quad \psi = e^{-i\hat{S}}\psi' \quad (4.340)$$

mit dem hermiteschen und evtl. zeitabhängigen Operator \hat{S} . Diese Transformation ändert natürlich nicht die physikalische Bedeutung des quantenmechanischen Zustands. Setzen wir diese Transformation in die Dirac-Gleichung 4.336 ein, dann gelangen wir zu using the hermitian and possibly time-dependent operator \hat{S} . This transformation does not modify the physics of the state. Applying the transformation to the state obeying the Dirac equation 4.336 results in

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(e^{-i\hat{S}}\psi') = \hat{H}e^{-i\hat{S}}\psi' \quad (4.341)$$

und damit and thus

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi' = \left[e^{i\hat{S}}(\hat{H}e^{-i\hat{S}} - i\hbar \frac{\partial e^{-i\hat{S}}}{\partial t}) \right] \psi' \equiv \hat{H}'\psi'. \quad (4.342)$$

Um das oben formulierte Ziel zu erreichen, müssen wir einen Operator \hat{S} finden, der die transformierte Dirac-Gleichung so gestaltet, daß \hat{H}' keine mischenden Terme mehr enthält. Dann sind die beiden Spinoren des Bispinors ψ' entkoppelt und wir können aus der transformierten Dirac-Gleichung sofort die gesuchte Pauli-Gleichung ablesen. In other words, what we need to do is to find such a \hat{S} that \hat{H}' does not contain any mixing term anymore. Then the two spinors of the bispinor ψ' are decoupled and we have reached the Pauli equation we are looking for.

Foldy-Wouthuysen-Transformation für freie Teilchen Foldy-Wouthuysen Transformation for free particles

Um ein gewisses Gefühl für die zu erwartenden Ergebnisse zu erhalten, wollen wir im Vorfeld die oben besprochene Transformation auf die Dirac-Gleichung eines freien Teilchens anwenden. In diesem Falle ist sogar eine exakte Elimination aller mischenden Terme möglich. Für \hat{S} wählen wir den Ansatz In order to get some feeling for what needs to be done we start by transforming the Dirac equation for free particles. In this case even an exact solution is possible. We start by using the ansatz

$$\hat{S} = -i \frac{\vec{\gamma} \hat{\vec{p}}}{|\hat{\vec{p}}|} \hat{\theta} = -i \beta \frac{\vec{\alpha} \hat{\vec{p}}}{|\hat{\vec{p}}|} \hat{\theta} \quad (4.343)$$

mit dem noch unbekanntem Operator $\hat{\theta}$. Wir nehmen hier die Einfachheit halber an, daß $\hat{\theta}$ sowohl mit den Matrizen α_μ und β als auch mit dem Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$ kommutiert und außerdem auch noch zeitunabhängig ist. Um die explizite Struktur von $\exp\{i\hat{S}\}$ zu bekommen, entwickeln wir den Exponentialoperator in eine Potenzreihe nach $\hat{\theta}$. Wegen der vorausgesetzten Vertauschbarkeit erhalten wir where the $\hat{\theta}$ operator is yet unknown. We assume that $\hat{\theta}$ is time-independent and commutes with the α_μ and β matrixes as well as with $\hat{\vec{p}}$. In order to determine $\exp\{i\hat{S}\}$ we expand it into a power series using the commutator relations required above

$$e^{i\hat{S}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\beta \vec{\alpha} \hat{\vec{p}}}{|\hat{\vec{p}}|} \right)^n \hat{\theta}^n \quad (4.344)$$

Die Auswertung erfordert die Kenntnis von Potenzen von \hat{S} . Für \hat{S}^2 erhalten wir unter der Beachtung der Antikommutationsrelationen für α und β -Matrizen The evaluation requires knowledge of the \hat{S}^n . The anticommutator relations for the α and β matrixes yield for \hat{S}^2

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|}\right)^2 &= \frac{1}{|\hat{p}|^2} \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^3 \beta\alpha_{\mu}\hat{p}_{\mu}\beta\alpha_{\nu}\hat{p}_{\nu} & (4.345) \\
 &= -\frac{1}{\hat{p}^2} \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^3 \beta^2\alpha_{\mu}\alpha_{\nu}\hat{p}_{\mu}\hat{p}_{\nu} \\
 &= -\frac{1}{2\hat{p}^2} \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^3 (\alpha_{\mu}\alpha_{\nu} + \alpha_{\nu}\alpha_{\mu})\hat{p}_{\mu}\hat{p}_{\nu} \\
 &= -\frac{1}{\hat{p}^2} \sum_{\mu=1}^3 \sum_{\nu=1}^3 \hat{I}\delta_{\mu\nu}\hat{p}_{\mu}\hat{p}_{\nu} = -\hat{I}
 \end{aligned}$$

Damit sind auch alle höheren Potenzen bekannt [Thus also the higher terms are known](#)

$$\left(\frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|}\right)^{2n} = (-1)^n \hat{I}, \quad \left(\frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|}\right)^{2n+1} = (-1)^n \left(\frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|}\right) \quad (4.346)$$

und wir bekommen für den Exponentialoperator $\exp\{i\hat{S}\}$ [and we obtain for \$\exp\{i\hat{S}\}\$](#)

$$e^{i\hat{S}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{\theta}^{2n}}{(2n)!} \left(\frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|}\right)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{\theta}^{2n+1}}{(2n+1)!} \left(\frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|}\right)^{2n+1} \quad (4.347)$$

$$= \hat{I} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \hat{\theta}^{2n} + \left(\frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|}\right) \sum_n \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \hat{\theta}^{2n+1} \quad (4.348)$$

$$= \hat{I} \cos \hat{\theta} + \frac{\beta\vec{\alpha}\hat{p}}{|\hat{p}|} \sin \hat{\theta} \quad (4.349)$$

Mit der Kenntnis von $\exp\{i\hat{S}\}$ können wir jetzt den Hamilton-Operator des freien Teilchens $\hat{H}_f = c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta$ auf \hat{H}' entsprechend 4.342 abbilden. Beachtet man, daß \hat{S} zeitunabhängig ist, dann erhält man [Knowledge of \$\exp\{i\hat{S}\}\$ allows for calculating \$\hat{H}'\$ from \$\hat{H}_f = c\hat{\alpha}\hat{p} + mc^2\beta\$ according to Eq. 4.342. Since \$\hat{S}\$ is stationary, we obtain](#)

$$\begin{aligned}
 \hat{H}' &= [\hat{I} \cos \hat{\theta} + \frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \sin \hat{\theta}] [c \hat{\alpha} \hat{p} + mc^2 \beta] [\hat{I} \cos \hat{\theta} - \frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \sin \hat{\theta}] \quad (4.350) \\
 &= c \cos^2 \hat{\theta} \hat{\alpha} \hat{p} - c \sin^2 \hat{\theta} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \hat{\alpha} \hat{p} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \\
 &\quad - c \sin \hat{\theta} \cos \hat{\theta} \left[\hat{\alpha} \hat{p} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) - \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \hat{\alpha} \hat{p} \right] \\
 &\quad + mc^2 \beta \cos^2 \hat{\theta} - mc^2 \sin^2 \hat{\theta} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \beta \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \\
 &\quad - mc^2 \beta \sin \hat{\theta} \cos \hat{\theta} \left[\beta \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) - \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \beta \right]
 \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Antikommutationsrelationen für α und β -Matrizen sowie der Beziehung 4.345 können wir die einzelnen Summanden noch vereinfachen. So finden wir [Using the anticommutator relations for the \$\alpha\$ and \$\beta\$ matrices as well as Eq. 4.345 we can simplify the terms](#)

$$\left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \hat{\alpha} \hat{p} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) = - \left(\frac{\hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \beta \hat{\alpha} \hat{p} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) = - \hat{\alpha} \hat{p} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right)^2 = \hat{\alpha} \hat{p} \quad (4.351)$$

und [and](#)

$$\hat{\alpha} \hat{p} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) - \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \hat{\alpha} \hat{p} = 2 \hat{\alpha} \hat{p} \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) = 2 \left| \hat{p} \right| \beta \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right)^2 = -2 \left| \hat{p} \right| \beta \quad (4.352)$$

sowie [as well as](#)

$$\left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \beta \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) = -\beta \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right)^2 = \beta \quad (4.353)$$

und [and](#)

$$\beta \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) - \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) \beta = 2\beta \left(\frac{\beta \hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \right) = 2 \frac{\hat{\alpha} \hat{p}}{|\hat{p}|} \quad (4.354)$$

Setzen wir die obigen Ausdrücke in 4.350 ein, dann erhalten wir den transformierten Hamilton-Operator [using the above expression in 4.350 we obtain](#)

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \cos 2\hat{\theta} c\hat{\alpha}\hat{p} + \sin 2\hat{\theta} c\beta \left| \hat{p} \right| + \cos 2\hat{\theta} mc^2\beta - \sin 2\hat{\theta} mc^2 \frac{\hat{\alpha}\hat{p}}{\left| \hat{p} \right|} \\ &= c\hat{\alpha}\hat{p} \left(\cos 2\hat{\theta} - \frac{mc}{\left| \hat{p} \right|} \sin 2\hat{\theta} \right) + mc^2\beta \left(\cos 2\hat{\theta} + \frac{\left| \hat{p} \right|}{mc} \sin 2\hat{\theta} \right)\end{aligned}\quad (4.355)$$

Auch in diesem Hamilton-Operator treten noch mischende Terme auf. Wir können jetzt aber $\hat{\theta}$ so wählen, daß diese Terme verschwinden. Dazu muß die Bedingung **This Hamiltonian still contains mixing terms. However, we can choose $\hat{\theta}$ in such a way that these terms disappear. We require that**

$$\tan 2\hat{\theta} = \frac{\left| \hat{p} \right|}{mc} \quad (4.356)$$

erfüllt sein. Aus dieser Beziehung können wir jetzt sofort die Größen $\cos 2\hat{\theta}$ und $\sin 2\hat{\theta}$ bestimmen. Wir erhalten **This determines $\cos 2\hat{\theta}$ and $\sin 2\hat{\theta}$**

$$\cos 2\hat{\theta} = \frac{1}{\sqrt{1+\tan^2 2\hat{\theta}}} = \frac{mc}{\sqrt{m^2c^2+\left| \hat{p} \right|^2}} \quad (4.357)$$

und **and**

$$\sin 2\hat{\theta} = \frac{\tan 2\hat{\theta}}{\sqrt{1+\tan^2 2\hat{\theta}}} = \frac{\left| \hat{p} \right|}{\sqrt{m^2c^2+\left| \hat{p} \right|^2}} \quad (4.358)$$

Damit wird nun **Thus**

$$\hat{H}' = \beta c \frac{m^2c^2+\left| \hat{p} \right|^2}{\sqrt{m^2c^2+\left| \hat{p} \right|^2}} = \beta \sqrt{m^2c^4 + c^2 \left| \hat{p} \right|^2} \quad (4.359)$$

Der Hamilton-Operator \hat{H}' enthält jetzt keine mischenden Terme mehr und zerfällt wegen der Diagonalstruktur von β in zwei Komponenten, von denen die eine Teilchen mit positiver, die andere Teilchen mit negativer Energie beschreibt. **The Hamiltonian \hat{H}' indeed contains no terms anymore that mix components of positive and negative energy. Rather, it has a diagonal structure and describes particles with positive and negative energy, respectively, separately.**

Foldy-Wouthuysen-Transformation für Teilchen im elektromagnetischen Feld **Foldy-Wouthuysen Transformation for particles in electromagnetic fields**

Wir wollen uns jetzt wieder dem eigentlichen Problem, nämlich der Bestimmung des Operators \hat{S} für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld, zuwenden. Dazu schreiben wir den Hamilton-Operator 4.336 als **Now we are mentally prepared to**

address the actual problem, namely the determination of the operator \hat{S} in case of a particle that is exposed to electromagnetic fields. We start from the Hamiltonian as given in Eq. 4.336

$$H = mc^2\beta + e\phi + c\alpha\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) = mc^2\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O} \quad (4.360)$$

mit dem bezüglich β geraden, also nicht mischenden Operator where \mathcal{E} is even with respect to β , i.e., it does not mix

$$\mathcal{E} = e\phi, \text{ wobei where } \beta\mathcal{E} = \mathcal{E}\beta \quad (4.361)$$

und dem ungeraden, also mischenden Operator and the odd, i.e., mixing operator

$$\mathcal{O} = c\vec{\alpha}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right), \text{ wobei where } \beta\mathcal{O} = -\mathcal{O}\beta \quad (4.362)$$

Der transformierte Operator \hat{H}' , siehe 4.342 the transformed \hat{H}' from Eq. 4.342

$$\hat{H}' = e^{i\hat{S}}\hat{H}e^{-i\hat{S}} - e^{i\hat{S}}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{-i\hat{S}} \quad (4.363)$$

setzt sich aus zwei Summanden zusammen, die wir durch eine Reihenentwicklung nach \hat{S} darstellen. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß die Taylor-Entwicklung der beiden Exponentialterme, die anschließende Ausmultiplikation und geschickte Zusammenfassung der Terme gleicher Ordnung in \hat{S} auf consists of two terms, which may be represented by a series expansion in \hat{S} . Rearrangement leads to (Baker-Hausdorff identity)

$$e^{i\hat{S}}\hat{H}e^{-i\hat{S}} = \hat{H} + i[\hat{S}, \hat{H}] - \frac{1}{2}[\hat{S}[\hat{S}, \hat{H}]] - \frac{i}{6}[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]]] + \frac{1}{24}[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]]]] + \dots \quad (4.364)$$

führt (Baker-Hausdorff-Identität). Ähnlich geht man bei der Darstellung des zweiten Summanden vor. Zuerst entwickelt man die Exponentialfaktoren in eine Reihe, dann führt man die Differentiation nach der Zeit aus und schließlich faßt man die Terme gleicher Ordnung zusammen. Auf diese Weise gelangt man zu Similarly the second term can be written as

$$-ie^{i\hat{S}}\frac{\partial}{\partial t}e^{-i\hat{S}} = -\dot{\hat{S}} - \frac{i}{2}[\hat{S}, \dot{\hat{S}}] + \frac{1}{6}[\hat{S}, [\hat{S}, \dot{\hat{S}}]] + \dots \quad (4.365)$$

Setzen wir diese Ausdrücke in \hat{H}' ein, nimmt der transformierte Hamilton-Operator bis zur dritten Ordnung in \hat{S} folgende Gestalt an [Using these expressions in \$\hat{H}'\$ we obtain the transformed Hamiltonian up to third order as](#)

$$\begin{aligned} \hat{H}' = & \hat{H} + i[\hat{S}, \hat{H}] - \frac{1}{2}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] - \frac{i}{6}[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]]] \\ & + \frac{1}{24}[\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]]]] - \hbar\dot{\hat{S}} - \frac{i\hbar}{2}[\hat{S}, \dot{\hat{S}}] + \frac{\hbar}{2}[\hat{S}, [\hat{S}, \dot{\hat{S}}]] + \dots \end{aligned} \quad (4.366)$$

Wir wollen jetzt das eigentliche Verfahren diskutieren. Im Gegensatz zum freien Teilchen läßt sich die kanonische Transformation für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld nicht mehr exakt angeben, sondern muß iterativ bestimmt werden. Um eine Vorstellung von der Struktur von \hat{S} zu erhalten, verwenden wir von 4.366 zunächst nur die ersten beiden Terme und setzen für \hat{H} die formale Darstellung von 4.360 ein [The transformation for particles in electromagnetic fields has to be done iteratively. We start by using the first two terms of 4.366 and use for \$\hat{H}\$ the formal representation given in 4.360](#)

$$\hat{H}' \approx mc^2\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O} + i[\hat{S}, mc^2\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O}] \quad (4.367)$$

Wir wollen jetzt die ungeraden Terme aus dem Hamilton-Operator eliminieren. Deshalb legen wir jetzt \hat{S} so fest, daß der Kommutator $[\hat{S}, mc^2\beta]$ zunächst den ungeraden Operator \mathcal{O} in \hat{H} kompensiert, also [We want to eliminate the odd terms of the Hamiltonian. To begin with, we choose \$\hat{S}\$ in such a way that the commutator \$\[\hat{S}, mc^2\beta\]\$ compensates the odd operator \$\mathcal{O}\$ in \$\hat{H}\$, thus](#)

$$\mathcal{O} + i[\hat{S}, mc^2\beta] = 0 \quad (4.368)$$

gilt. Da \mathcal{O} bezgl. β ungerade ist, gilt $\mathcal{O}\beta = -\beta\mathcal{O}$. Dieses Verhalten legt den Ansatz $\hat{S} = a\beta\mathcal{O}$ mit dem noch freien Parameter a nahe. Setzen wir diese Vermutung oben ein, erhalten wir eine einfache algebraische Gleichung [Since \$\mathcal{O}\$ is odd with respect to \$\beta\$, i.e., \$\mathcal{O}\beta = -\beta\mathcal{O}\$, we choose the Ansatz \$\hat{S} = a\beta\mathcal{O}\$ with \$a\$ as free parameter and obtain indeed an algebraic equation](#)

$$i\mathcal{O} = [a\beta\mathcal{O}, mc^2\beta] = amc^2(\beta\mathcal{O}\beta - \beta^2\mathcal{O}) = -2amc^2\beta^2\mathcal{O} = -2amc^2\mathcal{O} \quad (4.369)$$

aus der wir sofort $a = -i/(2mc^2)$ bestimmen können. Damit ist dann [That immediately yields \$a = -i/\(2mc^2\)\$, thus](#)

$$\hat{S} = -\frac{i}{2mc^2}\beta\mathcal{O} \quad (4.370)$$

Offenbar gibt es im Hamilton-Operator 4.360 Terme der Ordnung m und der Ordnung m^0 . Nach der Transformation mit dem eben bestimmten \hat{S} sind zwar in \hat{H}' nicht alle ungeraden Terme eliminiert, aber alle verbleibenden ungeraden Größen sind jetzt mindestens von der Ordnung m^{-1} . Neben den ungeraden Beiträgen treten natürlich auch neue gerade Ausdrücke von der Ordnung m^{-1} auf, die wir zusammen in einem neuen geraden Operator \mathcal{E}' vereinigen können. Wir erhalten somit einen transformierten Hamilton-Operator \hat{H}' , der wieder die gleiche Struktur wie der ursprüngliche Hamilton-Operator \hat{H} aufweist [The Hamiltonian 4.360 contains terms of order \$m\$ and order \$m^0\$. After the transformation using the \$\hat{S}\$ determined above, not all odd terms in \$\hat{H}'\$ are eliminated, but the remaining odd terms are of order \$m^{-1}\$. In addition new even terms of the order \$m^{-1}\$ appear, which can be collected in a new even operator \$\mathcal{E}'\$. Thus we obtain a transformed Hamiltonian \$\hat{H}'\$ that can be written in the same structure as the original \$\hat{H}\$ operator](#)

$$\hat{H}' \approx mc^2\beta + \mathcal{E}' + \mathcal{O}'. \quad (4.371)$$

Im Unterschied zu \mathcal{O} in \hat{H} ist jetzt aber \mathcal{O}' in \hat{H}' von der Ordnung m^{-1} . Die konkrete Struktur von \mathcal{O} spielte bei diesem Vorgehen überhaupt keine Rolle. Wir können deshalb mit \mathcal{O}' entsprechend 4.372 einen neuen Operator \hat{S} bilden [in \$\hat{H}'\$ is of the order \$m^{-1}\$, in contrast to \$\mathcal{O}\$ in \$\hat{H}\$. The precise structure of \$\mathcal{O}\$ is not important for this procedure. Using \$\mathcal{O}'\$ in 4.372 yields a new operator \$\hat{S}\$](#)

$$\hat{S} = -\frac{i}{2mc^2}\beta\mathcal{O}' \quad (4.372)$$

der jetzt von der Ordnung m^{-2} ist und mit diesem aus \hat{H}' einen neuen Hamilton-Operator \hat{H}'' erzeugen, der jetzt nur noch ungerade Terme der Ordnung m^{-2} besitzt. Die Fortsetzung dieses Verfahrens liefert uns eine unendliche Folge von unitären Transformationen, die zu einer sukzessiven Reduktion der ungeraden Beiträge führt. Mit der inversen Masse – oder genauer der zugehörigen inversen Ruheenergie $1/(mc^2)$ – haben wir somit auch den kleinen Parameter einer störungstheoretischen Entwicklung gefunden. [of the order \$m^{-2}\$ that transforms \$\hat{H}'\$ into a new Hamiltonian \$\hat{H}''\$, that only contains odd terms of order \$m^{-2}\$. The continuation of this procedure leads to an infinite number of unitary transformations that successively reduce the odd terms. The inverse mass \$m^{-1}\$ – or more precisely the inverse rest energy \$1/\(mc^2\)\$ – is the order parameter of this perturbation series.](#)

Allerdings erfordert eine auch für höhere Ordnungen konsistente Transformation die Berücksichtigung der allgemeinen Transformationsformel 4.366, in die auch zeitliche Ableitungen \hat{S} eingehen. Mit drei Transformationsschritten gelangt man zum transformierten Hamilton-Operator **In order of the transformation to be consistent for higher orders, one needs to consider the general transformation 4.366, where also time derivatives \hat{S} enter. We three transformation steps one arrives eventually at the Hamiltonian**

$$\hat{H}''' = \beta \left(mc^2 \beta + \frac{1}{2mc^2} \mathcal{O}^2 - \frac{1}{8m^3 c^6} \mathcal{O}^4 \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2 c^4} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{i\hbar}{8m^2 c^4} [\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}] \quad (4.373)$$

Wobei **Where** $\mathcal{E} = e\phi$ und **and** $\mathcal{O} = c\vec{\alpha} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)$.

Auswertung des transformierten Operators Evaluation of the transformed Hamiltonian

Wenn man den transformierten Hamilton-Operators explizit als Funktion der elektromagnetischen Felder darstellt, ergibt sich **If the transformed Hamiltonian is written in dependence on the electromagnetic fields one obtains**

$$\begin{aligned} \hat{H}''' = & \beta \left\{ mc^2 + \frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{\hat{\vec{p}}^4}{8m^3 c^2} \right\} + \hat{I} \left\{ e\phi - \frac{e\hbar^2}{8m^2 c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \right\} \quad (4.374) \\ & - \hat{\Sigma} \left\{ \frac{ie\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{e}{2m^2 c^2} \vec{E} \times \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right\} - \frac{e}{mc} \beta \hat{\Sigma} \vec{B} \end{aligned}$$

Dabei ist $\hat{\Sigma} = (\hat{\Sigma}_1, \hat{\Sigma}_2, \hat{\Sigma}_3)$ der auf vier Dimensionen verallgemeinerte Spinoperator mit **Here $\hat{\Sigma} = (\hat{\Sigma}_1, \hat{\Sigma}_2, \hat{\Sigma}_3)$ is four-dimensional generalization of the spin operator with**

$$\hat{\Sigma}_\mu = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_\mu & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_\mu \end{pmatrix}. \quad (4.375)$$

Unter Auswertung dieses Spinoperators zerfällt die zugehörige quantenmechanische Evolutionsgleichung für den Bispinor ψ jetzt in zwei separate Gleichungen für den oberen und unteren Spinor. Für den oberen Spinor erhalten wir eine Gleichung vom Typ **Using the spin operator above the equation for the bispinor ψ decouples into two separate equations for the upper and the lower spinor. For the upper spinor we obtain**

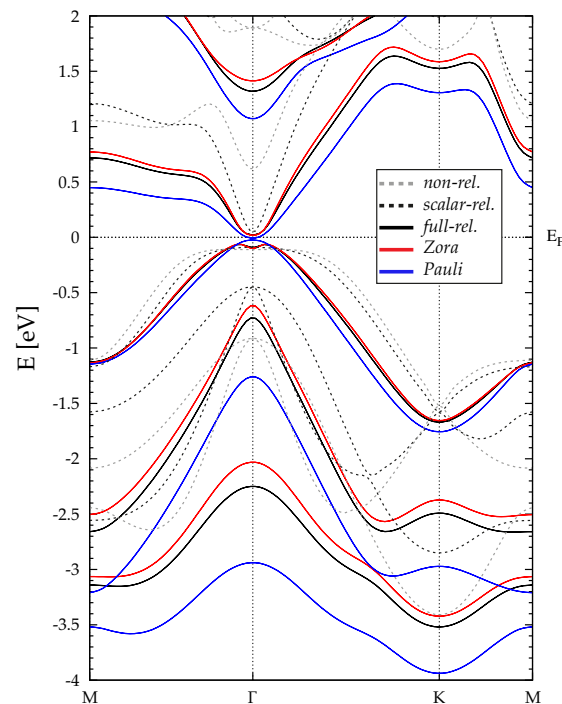
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi = \hat{H}\chi \quad (4.376)$$

mit dem Hamilton-Operator [with the Hamiltonian](#)

$$\begin{aligned} \hat{H} = \hat{I}\left\{ mc^2 + \frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + e\phi - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\vec{\nabla} \cdot \vec{E} \right\} \\ - \hat{\sigma}\left\{ \frac{ie\hbar^2}{8m^2c^2}\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{e\hbar\vec{E}}{4m^2c^2} \times \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \frac{e\hbar}{2mc}\vec{B} \right\} \end{aligned} \quad (4.377)$$

Es handelt sich hierbei wieder um die Pauli-Gleichung, die aber im Gegensatz zu der Version 3.98 bzw. 4.318 noch einige relativistische Korrekturen erhält. [Again, we arrived at the Pauli equation! In contrast to the versions 3.98 and 4.318, respectively, however, some additional relativistic corrections show up.](#)

Die Größenordnung der relativistischen Korrekturen wird an der berechneten Bandstruktur einer Bi(111)-Doppellage deutlich. [The influence of the relativistic corrections on the electron energies in a Bi\(111\) bilayer is shown below.](#)



[U. Gerstmann, N.J. Vollmers, A. Lücke, M. Babilon W.G. Schmidt
 Phys. Rev. B **89**, 165431 (2014)]

Physikalische Bedeutung **Interpretation**

Wir wollen jetzt kurz die Bedeutung der einzelnen Terme dieser Wellengleichung diskutieren. Der erste Klammersausdruck ist bezgl. seiner Wirkung auf einen Spinor diagonal. Vernachlässigt man die Spineigenschaften des Teilchens und damit den zweiten, an die Pauli'schen Spinmatrizen koppelnden Term, dann könnte man den Hamilton-Operator auch eine gewöhnliche Schrödinger-Gleichung mit einer skalaren Wellenfunktion zuordnen. Die ersten drei Summanden dieses Diagonaltermes sind als Entwicklung der Potenzen von $(mc^2)^{-1}$ zu verstehen. Die hierdurch präsentierten Observablen haben ein klassisches Analogon, so daß ihnen entsprechend den Jordan'schen Regeln quantenmechanische Operatoren zugeordnet werden können. Der Ruhemasseterm mc^2 kann durch einen geeigneten Phasenfaktor der Wellenfunktion – nämlich durch $\psi \rightarrow \psi \exp\{-imc^2t/\hbar\}$ – eliminiert werden, ohne daß der physikalische Inhalt der Wellengleichung oder des quantenmechanischen Zustands geändert wird. Zusammen mit dem elektrostatischen Potential $e\phi$ entspricht der zweite Summand des Diagonaltermes der Quantisierung der klassischen Hamilton-Funktion eines geladenen Partikels. Wir haben z.B. den normalen Zeeman-Effekt, der sich aus der diesen Termen entsprechenden Schrödinger-Gleichung ableiten läßt, im Abschnitt 2 der Vorlesung besprochen. Beim dritten und fünften Summanden des Diagonaltermes handelt es sich um relativistische Korrekturen, wobei der letztere auch als Darwin-Term bezeichnet wird. Dieser Term hängt mit der sogenannten Zitterbewegung des quantenmechanischen Teilchens zusammen, die ausführlicher im nächsten Abschnitt besprochen wird. Der zweite Klammersausdruck im Hamilton-Operator berücksichtigt die Spineigenschaften des Partikels. Dabei entspricht der letzte Summand der magnetischen Dipolwechselwirkung, alle anderen Beiträge lassen sich zur Spin-Bahn-Wechselwirkung zusammenfassen. Beide Beiträge ergeben sich direkt aus der Dirac-Gleichung! Die Struktur der Spin-Bahn-Wechselwirkung hängt natürlich von dem jeweiligen elektromagnetischen Feld ab. Für die Bewegung in einem zentralsymmetrischen elektrostatischen Feld haben wir eine besonders einfache Situation vorliegen. Mit $\vec{A} = 0$ und $\phi = \phi(r)$ bekommen wir *The first term in curled brackets above is diagonal, i.e., can be assigned to a Schrödinger equation that acts on a scalar wave function. Thereby the first term can be eliminated by a suitable phase factor ($\psi \rightarrow \psi \exp\{-imc^2t/\hbar\}$), the second term is derived from the classical Hamilton function of a charged particle and gives rise, e.g. to the normal Zeeman effect as discussed in chapter 2. The third and fifth term are relativistic corrections, thereby the latter is the so-called Darwin term that is related to the zitterbewegung which we will discuss in the next section. The second term in curled brackets takes care of the spin properties. Thereby the last term describes the interaction with the magnetic field, whereas the other terms describe the spin-orbit interaction. It depends on the specific electromagnetic field. If we assume the case of a field that is symmetrical around its centre with $\vec{A} = 0$ and $\phi = \phi(r)$ we obtain*

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi = \frac{\partial\phi}{\partial r}\frac{\vec{r}}{r} \quad \text{und} \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = 0 \quad (4.378)$$

und somit vereinfacht sich die Spin-Bahn-Wechselwirkung [and the spin-orbit Interaction](#)

$$\hat{H}_{\text{so}} = \hat{\sigma} \left\{ \frac{ie\hbar^2}{8m^2c^2} \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \vec{E} \times (\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}) \right\} \quad (4.379)$$

zu [simplifies to](#)

$$\hat{H}_{\text{so}} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial\phi}{\partial r} \hat{\sigma} (\vec{r} \times \hat{\vec{p}}) \right) \quad (4.380)$$

Beachtet man noch den Drehimpulsoperator $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$ und den Spinoperator $\hat{\vec{S}} = (\hbar/2)\hat{\sigma}$, dann erhalten wir die bereits bekannte Spin-Bahn-Wechselwirkung [Considering that \$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}\$ and \$\hat{\vec{S}} = \(\hbar/2\)\hat{\sigma}\$ one obtains the well-known expression](#)

$$\hat{H}_{\text{so}} = \frac{e}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial\phi}{\partial r} \right) \hat{\vec{S}} \hat{\vec{L}} \quad (4.381)$$

4.10 Der Rashba-Effekt [Rashba effect](#)

Als Rashba-Effekt bezeichnet man die Kopplung des Elektronenspins an die orbitale Bewegung des Elektrons für den Fall, daß eine Inversions-Asymmetrie der Struktur des Systems vorliegt, genauer: daß das Potential, welches das Elektronen-Gas auf zwei Dimensionen (hier x-y-Ebene) einschließt, asymmetrisch ist. Es handelt sich dabei um eine Spin-Bahn-Kopplung, deren Beitrag zur Elektronenenergie proportional ist zum Spatprodukt aus dem elektrischen Feld \vec{E} am Ort des Elektrons, dessen Impuls \vec{p} , und dessen Spin $\vec{\sigma}$.

[The Rashba effect, or Rashba-Dresselhaus effect, is a momentum-dependent splitting of spin bands in the two-dimensional electron gas \(in the following the x-y plane\) resulting from the combined effect of atomic spin-orbit coupling and asymmetry of the potential in the direction perpendicular to the two-dimensional plane.](#)

Um uns diesen Effekt zu verdeutlichen starten wir zunächst mit den Foldy-Wouthuysen transformierten Dirac-Hamiltonoperator [4.377 Start with the Hamiltonian 4.377](#)

$$\hat{H} = \hat{I} \left\{ mc^2 + \frac{(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + e\phi - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \right\} \quad (4.382)$$

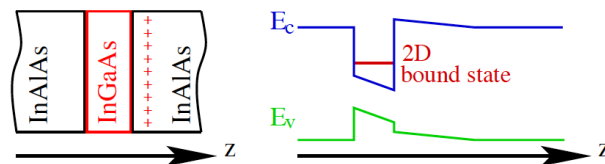
$$- \hat{\sigma} \left\{ \frac{ie\hbar^2}{8m^2c^2} \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{e\hbar \vec{E}}{4m^2c^2} \times \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{B} \right\}$$

den wir abrüsten zunächst durch die Abwesenheit magnetischer Felder, d.h. [that we simplify by considering the case that no magnetic fields are present, i.e.,](#) $\vec{B} = 0, \vec{A} = 0, \vec{\nabla} \times \vec{E} = 0$.

Weiterhin vernachlässigen wir die skalarrelativistischen Korrekturen der kinetischen Energie und den Darwinterms. Der Ruhemassenterm läßt sich wegrenormalisieren. Damit erhalten wir folgenden Modell-Hamiltonoperator [Furthermore we neglect scalar-relativistic corrections and obtain the following Hamiltonian](#)

$$\hat{H} = \hat{I} \left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\phi \right\} - \hat{\sigma} \cdot \frac{e\hbar \vec{E}}{4m^2c^2} \times \hat{\vec{p}}. \quad (4.383)$$

Im weiteren nehmen wir an, daß das skalare Potential ϕ eine Variation senkrecht zur Bewegungsrichtung der Elektronen im 2DEG hat. Das ist typischerweise der Fall für Elektronen in Halbleiterheterostrukturen [If two different materials in a heterostructure are combined one observes often a spatial variation of the band edges that realises a textbook example of a 2D quantum well. The spatial asymmetry of the band edges mimics electric field along \$z\$, i.e., perpendicular to the electron movement in the x-y plane](#)



oder an Oberflächen von Festkörpern entlang der Oberflächennormalen. Dieses Potential gebe Anlaß zu einem elektrischen Feld $\vec{E} = (0, 0, E_z)$. Damit wird der Potentialterm $e\phi$ im diagonalen Teil des Hamiltonoperators für ein 2DEG in x-y-Ebene zu einer (im folgenden auf Null gesetzten) Konstanten, so daß sich der Hamiltonoperator [Also the structural inversion asymmetry due to a surface results in an electric field along the surface normal, i.e, along the \$z\$ direction. The thus resulting electric field \$\vec{E} = \(0, 0, E_z\)\$ renders the \$e\phi\$ term in the diagonal part of the Hamiltonian to be a constant for a two-dimensional electron gas in the x-y plane. Assuming this constant to be zero results the Hamiltonian](#)

$$\hat{H} = \hat{I} \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e\hbar E_z}{4m^2 c^2} \hat{\sigma} \cdot (\vec{e}_z \times \hat{p}) \quad (4.384)$$

ergibt. Bei Einführung einer effektiven Spin-Bahn-Kopplungsstärke α und der Substitution $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ erhält man [Substituting \$\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}\$ and introducing an effective spin-orbit coupling strength \$\alpha\$ leads to](#)

$$\hat{H} = \hat{I} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right\} + i\hbar\alpha \left(\hat{\sigma}_x \frac{\partial}{\partial y} - \hat{\sigma}_y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (4.385)$$

Unter expliziter Einsetzung der Pauli'schen Spinmatrizen [exploiting the explicit form of the Pauli spin matrices](#)

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.386)$$

erhält man den 2×2 Hamiltonoperator [one obtains the \$2 \times 2\$ Hamiltonian](#)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) & \hbar\alpha \left(i \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ \hbar\alpha \left(i \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \right) & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \end{pmatrix}. \quad (4.387)$$

Für die Ortsabhängigkeit eines in 2 Dimensionen freien Elektronengases machen wir folgenden Spinor-Ansatz [The following spinor ansatz is made for the spatial dependence of the electrons free in two dimensions](#)

$$\psi(x, y) = e^{i(k_x x + k_y y)} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (4.388)$$

und erhalten die erlaubten Energieeigenwerte aus der Lösung der Säkulargleichung [The allowed energies follow from the secular equation](#)

$$\det(\hat{H} - E\hat{I}) = 0, \quad (4.389)$$

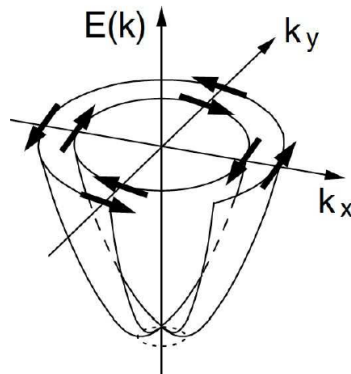
d.h.,

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) - E & -\hbar\alpha(k_y + ik_x) \\ -\hbar\alpha(k_y - ik_x) & \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) - E \end{vmatrix} = 0. \quad (4.390)$$

Offensichtlich ist die Energie gegeben durch [Obviously one obtains](#)

$$E_{1,2} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) \pm \hbar\alpha \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (4.391)$$

d.h. es kommt zu einer charakteristischen Aufspaltung der parabolischen Dispersion freier Elektronen für die beiden Spinkomponenten, dem sogenannten „Rashba-Splitting“. i.e., a momentum-dependent spin splitting is observed, the so-called Rashba splitting



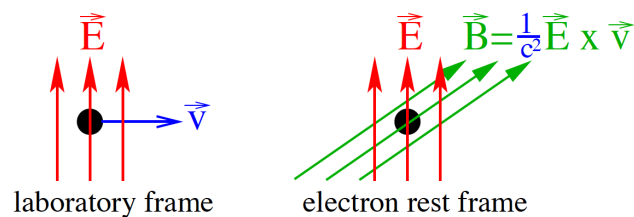
Bemerkungen Remarks

(i) Der Rashba-Effekt ist eng verwandt mit dem Zeeman-Effekt. Im Magnetfeld spalten die Spinzustände infolge des Zeeman-Terms [The Rashba effect is closely related to the Zeeman effect. The latter describes the energy splitting between the two spin states in a magnetic field due to the Zeeman term](#)

$$\hat{H}_Z \sim \hat{\sigma} \cdot \vec{B} \tag{4.392}$$

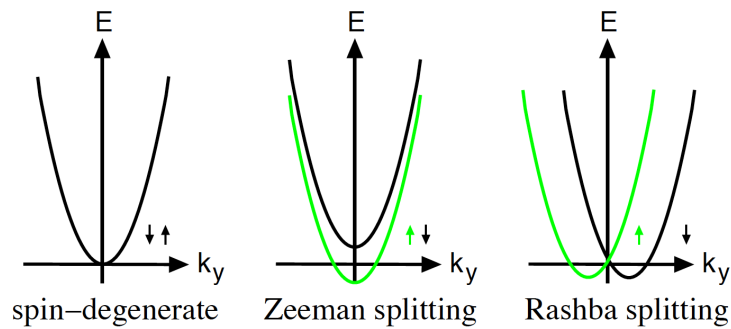
auf. Das im elektrischen Feld mit der Geschwindigkeit \vec{v} bewegte Elektron nimmt das \vec{E} -Feld des Laborsystems als \vec{B} -Feld im eigenen Ruhesystem wahr [The electric field, however, affects spin state of moving electrons. This is a relativistic effect: The electric field in lab frame causes a magnetic field in rest frame of the moving electron](#)

$$\vec{B} = \frac{1}{c^2} \vec{E} \times \vec{v}. \tag{4.393}$$



Damit wird aus dem Zeeman-Term des Hamilton-Operators der oben diskutierte Rashba-Term! [The Rashba effect is thus the "Zeeman effect" of electrons moving in an electric field!](#)

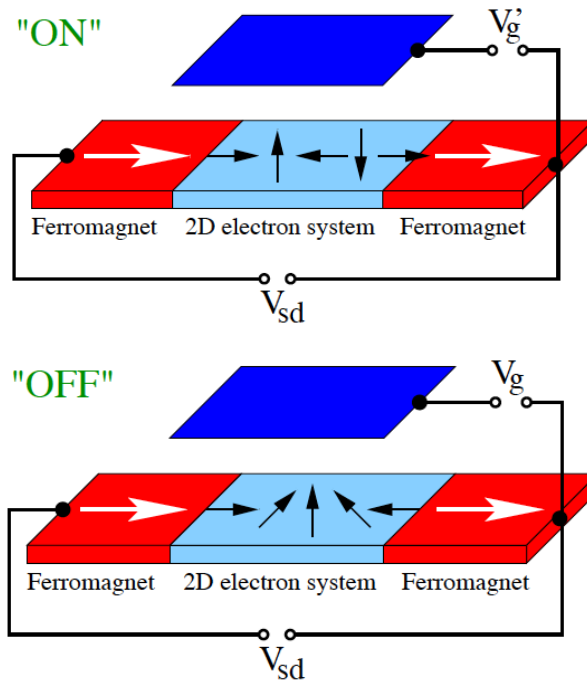
$$\hat{H}_Z \sim \hat{\sigma} \cdot \vec{B} \longrightarrow \hat{H}_R \sim \hat{\sigma} \cdot (\vec{E} \times \hat{p}) \tag{4.394}$$



(ii) Der Rashba-Hamilton-Operator [The Rasha Hamiltonian](#)

$$\hat{H}_R = i\hbar\alpha(\hat{\sigma}_x \frac{\partial}{\partial y} - \hat{\sigma}_y \frac{\partial}{\partial x}) \quad (4.395)$$

führt zu einer \vec{E} -Feld-abhängigen Rotation des Elektronenspins \rightarrow wird im spin-FET ausgenutzt [leads to a spin precession that is exploited in the spinFET](#)



(iii) An Oberflächen kann es insbesondere dann zu starken Rashba-Aufspaltungen kommen, wenn elektronische Zustände von Adsorbatatomen im Bereich des Potentialgradienten beim Übergang des Volumenpotentials zum Vakuumniveau liegen, z.B. bei atomaren In-Drähten einer Si(111)-Oberfläche, siehe [Strong Rashba splittings may be observed on surfaces when adsorbate electron states are exposed to strong electric fields due to the transition from the bulk to the vacuum region, as observed for example for In nanowires self-assembled on the Si\(111\) surface](#) U.

Gerstmann, N.J. Vollmers, A. Lücke, M. Babilon W.G. Schmidt *Rashba splitting and relativistic energy shifts in In/Si(111) nanowires*, Phys. Rev. B **89**, 165431 (2014).

4.11 Die Zitterbewegung des Elektrons Zitterbewegung of electrons

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik ist der Geschwindigkeitsoperator direkt mit dem Impulsoperator verbunden. Man kann diesen Zusammenhang am einfachsten durch die Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild veranschaulichen, wo die Zeitableitung des einer Observablen zugeordneten Operators und der Operator der Zeitableitung einer Observablen übereinstimmen [In nonrelativistic quantum mechanics the velocity operator is directly related to the momentum operator. This is particular obvious from the Heisenberg picture where we obtain](#)

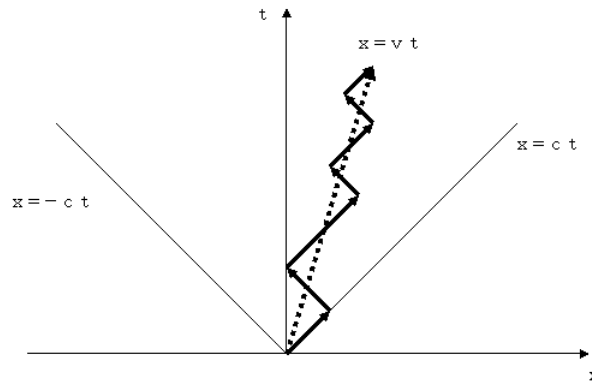
$$\hat{\dot{x}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{\hat{p}}{m} \quad (4.396)$$

Führen wir die gleichen Rechnungen mit dem Hamilton-Operator 4.233 des freien relativistischen Teilchen durch, dann bekommen wir [Performing the same calculation with the free-particle Dirac Hamiltonian 4.233 results in](#)

$$\hat{\dot{x}} = c\hat{\alpha} \quad (4.397)$$

Nach dieser Gleichung hat jede Komponente des Geschwindigkeitsoperators nur die beiden Eigenwerte $\pm c$. (Erinnerung Kap. 4.1, dort gezeigt, daß die Eigenwerte der $\hat{\alpha}$ -Matrizen ± 1 sind.) Noch seltsamer ist die Tatsache, daß die Komponenten des Geschwindigkeitsoperators im Gegensatz zu den Impulskomponenten nicht mehr kommutieren. Offenbar gibt es für dieses Phänomen keinen nichtrelativistischen Grenzfall, denn aus 4.397 kann man keinesfalls 4.396 ableiten. Das relativistische Teilchen führt eine permanente Zitterbewegung mit den instantanen Geschwindigkeitskomponenten $\pm c$ aus. Das ist ein paradox erscheinendes Ergebnis, zumal man experimentell für ein Spin-1/2-Teilchen beliebige Geschwindigkeiten mit $|\dot{\vec{x}}| < c$ messen kann. Man kann sich natürlich auf den Standpunkt stellen, daß eine Geschwindigkeitsmessung nicht zeitlich lokal erfolgt, sondern stets im Sinne des Grenzübergangs $v = |\Delta x / \Delta t|_{\Delta t \rightarrow 0}$ über kurze, aber immer endliche Zeitintervalle erstreckt werden muß. Demnach ist jede Geschwindigkeitsmessung eigentlich äquivalent zu einer Serie kausal aufeinander folgender Ortsmessungen und kann in dieser Hinsicht gewissermassen als Mittelwertbildung verstanden werden. [According to this equation there are only the two eigenvalues \$\pm c\$ for the components](#)

of the velocity operator. (In Chapter 4.1 we have shown that ± 1 are the eigenvalues of the $\hat{\alpha}$ matrices). Moreover, these components don not commute anymore and we cannot obtain 4.396 as nonrelativistic limit of 4.397. The relativistic particle follows a trembling motion with the instantaneous velocity components $\pm c$. That we can indeed measure any velocity $|\dot{\vec{x}}| < c$ can possibly be explained from the fact that any velocity measurement is nonlocal as it corresponds to the limit $v = |\Delta x / \Delta t|_{\Delta t \rightarrow 0}$ and involves small, but finite time intervals.



Andererseits wäre es zu erwarten, daß der quantenmechanische Erwartungswert der Geschwindigkeit eines Partikels wieder dem Ehrenfest'schen Theorem genügt, nach dem für die Mittelwerte der Quantenmechanik die klassischen (bzw. relativistisch-mechanischen) Bewegungsgleichungen gelten. Um diese Aussage zu prüfen, benutzen wir am besten die Darstellung der Operatoren im Heisenberg-Bild. Uns interessiert die Zeitabhängigkeit des Ortsoperators \hat{x}_H , die wiederum von der Zeitabhängigkeit der $\hat{\alpha}_H$ bestimmt ist: *On the other hand, we expect to obtain the expectation value for the particle velocity from the Ehrenfest theorem. In order to probe that we most conveniently use the Heisenberg picture. We are interested in the time dependence of the position operator \hat{x}_H , which depends in turn on the time dependence of the $\hat{\alpha}_H$:*

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_H, \hat{x}_H] = c\hat{\alpha}_H, \quad \frac{d\hat{\alpha}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_H, \hat{\alpha}_H] \quad (4.398)$$

Da die Kommutatoren im Schrödinger-Bild und im Heisenberg-Bild die gleiche mathematische Struktur besitzen ($[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \implies [\hat{A}_H, \hat{B}_H] = \hat{C}_H$) folgen aus den im Schrödinger-Bild gültigen Relationen $[\hat{H}_f, \hat{H}_f] = 0$, $[\hat{H}_f, \hat{p}] = 0$ und $[\hat{H}_f, \hat{x}] = \frac{c\hbar}{i}\hat{\alpha}$ sofort die entsprechenden Relationen im Heisenberg-Bild. Damit ergibt sich *It holds $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \implies [\hat{A}_H, \hat{B}_H] = \hat{C}_H$ and therefore we immediately write*

$$[\hat{H}_H, \hat{H}_H] = 0, \quad [\hat{H}_H, \hat{p}_H] = 0, \quad [\hat{H}_H, \hat{x}_H] = \frac{c\hbar}{i} \hat{\alpha}_H \quad (4.399)$$

Diese Kommutationsrelationen zeigen uns zunächst, daß [We see that](#)

$$\frac{d\hat{H}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{H}_H] = 0, \quad \frac{d\hat{p}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{p}_H] = 0, \quad (4.400)$$

woraus wir die zeitliche Invarianz des Impuls- und Hamiltonoperators schließen können. Damit ist aber der Impuls- und Hamiltonoperator im Heisenberg-Bild identisch zum Impuls- und Hamiltonoperator im Schrödinger-Bild. [i.e., the Hamiltonian and the momentum operator are time-independent, it holds](#)

$$\hat{p}_H = \hat{p}, \quad \hat{H}_H = \hat{H}_f \quad (4.401)$$

Zunächst berechnen wir mit dem Hamiltonoperator \hat{H}_f aus 4.233 den Kommutator [We start by calculating the commutator for the Hamiltonian \$\hat{H}_f\$ from 4.233](#)

$$[\hat{H}_f, \hat{\alpha}_\mu] = \hat{H}_f \hat{\alpha}_\mu + \hat{\alpha}_\mu \hat{H}_f - 2\hat{\alpha}_\mu \hat{H}_f \quad (4.402)$$

Für die ersten beiden Terme bekommen wir unter Beachtung der Antikommutatorbeziehungen für α - und β -Matrizen [Using the anticommutator relations for \$\alpha\$ and \$\beta\$ matrixes we find](#)

$$c \underbrace{(\alpha_\nu \alpha_\mu + \alpha_\mu \alpha_\nu)}_{2\hat{I}\delta_{\mu\nu}} \hat{p}_\nu + mc^2 \underbrace{(\beta \alpha_\mu + \alpha_\mu \beta)}_0 = 2c\hat{I}\delta_{\mu\nu} \hat{p}_\nu = 2c\hat{I}\hat{p}_\mu \quad (4.403)$$

Damit [Hence](#)

$$[\hat{H}_f, \hat{\alpha}] = 2(c\hat{I}\hat{p} - \hat{\alpha}\hat{H}_f) \quad \text{also thus} \quad [\hat{H}_f, \hat{\alpha}_H] = 2(c\hat{I}\hat{p} - \hat{\alpha}_H\hat{H}_f) \quad (4.404)$$

Aus der Bewegungsgleichung [From the equation of motion](#)

$$\frac{d\hat{\alpha}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_f, \hat{\alpha}_H] = \frac{2i}{\hbar} (c\hat{I}\hat{p} - \hat{\alpha}_H\hat{H}_f) \quad (4.405)$$

bekommen wir unter Beachtung der Anfangsbedingungen $\hat{\alpha}_H(0) = \hat{\alpha}$ die Lösung [we obtain by considering the initial value \$\hat{\alpha}_H\(0\) = \hat{\alpha}\$ the solution](#)

$$\hat{\alpha}_H(t) = \left(\hat{\alpha} - \hat{I} \frac{c\hat{p}}{\hat{H}_f}\right) e^{-\frac{2i}{\hbar} \hat{H}_f t} + \hat{I} \frac{c\hat{p}}{\hat{H}_f} \quad (4.406)$$

Setzen wir diese Lösung in die Bewegungsgleichung für den Ortsoperator [If one inserts this into the equation of motion of the position operator](#)

$$\frac{d\hat{x}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_f, \hat{x}_H] = c\hat{\alpha}_H \quad (4.407)$$

ein, dann erhalten wir nach einer einfachen Integration mit der Anfangsbedingung $\hat{x}_H(0) = \hat{x}$ [one obtains by integration and assuming \$\hat{x}_H\(0\) = \hat{x}\$](#)

$$\hat{x}_H(t) = \hat{x} + \hat{I} \frac{c^2 \hat{p}}{\hat{H}_f} t + ic\hbar \left(\hat{\alpha} - \hat{I} \frac{c\hat{p}}{\hat{H}_f}\right) \frac{e^{-\frac{2i}{\hbar} \hat{H}_f t} - 1}{2\hat{H}_f} \quad (4.408)$$

Der quantenmechanische Erwartungswert ist damit durch [This results in the expectation value](#)

$$\bar{x}(t) = \bar{x} + \hat{I} c^2 \overline{\hat{p} \hat{H}_f^{-1} t} + \frac{ic\hbar}{2} \overline{\left(\hat{\alpha} - \hat{I} c \hat{p} \hat{H}_f^{-1}\right) \left(e^{-\frac{2i}{\hbar} \hat{H}_f t} - 1\right) \hat{H}_f^{-1}} \quad (4.409)$$

gegeben. Die beiden ersten Terme stimmen mit unseren anfänglich geäußerten Vermutungen überein. Insbesondere bewegt sich hiernach ein freies Teilchen mit konstanter Geschwindigkeit. Neu - und für ein freies Teilchen völlig unerwartet - ist dagegen der dritte Term, der Oszillationen mit einer Frequenz der Größenordnung $2mc^2/\hbar$ beschreibt. [The first two terms agree with our expectation that a free particle moves with a constant velocity. The third term, unexpectedly, describes however oscillations with a frequency of the order \$2mc^2/\hbar\$.](#)

Um die tiefere Ursache für dieses Phänomen besser zu verstehen, nehmen wir an, daß sich das Teilchen im Zustand positiver Energie ψ^+ befindet. Dieser Zustand ändert sich nicht bei Anwendung des Projektionsoperators \hat{P}_+ , siehe 4.324 [In order to better understand this phenomenon we assume that the particle is in the positive-energy state \$\psi^+\$. This will not change by applying the projector \$\hat{P}_+\$, cf. 4.324](#)

$$\psi^+ = \hat{P}_+ \psi^+ \quad (4.410)$$

Beachtet man noch 4.404 und berücksichtigt, daß \hat{P} wegen 4.324 hermitesch ist, kann man schreiben [In combination with 4.404 and exploiting that \$\hat{P}\$ is hermitian because of 4.324 one may write](#)

$$\begin{aligned}
 \overline{(\hat{\alpha} - \hat{I}c\hat{p}\hat{H}_f^{-1})(e^{-\frac{2i}{\hbar}\hat{H}_ft} - 1)\hat{H}_f^{-1}} &= \overline{(\hat{H}_f\hat{\alpha} - \hat{I}c\hat{p})(e^{-\frac{2i}{\hbar}\hat{H}_ft} - 1)\hat{H}_f^{-2}} \quad (4.411) \\
 &= -\frac{1}{2}[\hat{H}_f, \hat{\alpha}](e^{-\frac{2i}{\hbar}\hat{H}_ft} - 1)\hat{H}_f^{-2} \\
 &= \left\langle \psi^{(+)} \left| [\hat{H}_f, \hat{\alpha}] \frac{1 - e^{-\frac{2i}{\hbar}\hat{H}_ft}}{2\hat{H}_f^2} \right| \psi^{(+)} \right\rangle \\
 &= \left\langle \psi^{(+)} \left| \hat{P}_+[\hat{H}_f, \hat{\alpha}] \frac{1 - e^{-\frac{2i}{\hbar}\hat{H}_ft}}{2\hat{H}_f^2} \hat{P}_+ \right| \psi^{(+)} \right\rangle \\
 &= \left\langle \psi^{(+)} \left| \hat{P}_+[\hat{H}_f, \hat{\alpha}] \hat{P}_+ \frac{1 - e^{-\frac{2i}{\hbar}\hat{H}_ft}}{2\hat{H}_f^2} \right| \psi^{(+)} \right\rangle
 \end{aligned}$$

wobei wir verwendet haben, daß der Projektionsoperator \hat{P}_+ und der Hamilton-Operator \hat{H}_f miteinander kommutieren. Wegen 4.320 und 4.324 folgt weiter [where is has been exploited that the projector \$\hat{P}_+\$ commutes with the Hamiltonian \$\hat{H}_f\$. From 4.320 and 4.324 it follows](#)

$$[\hat{P}_+, \hat{\alpha}] = \frac{1}{2}[\hat{Z}, \hat{\alpha}] = \frac{1}{2|\hat{H}_f|}[\hat{H}_f, \hat{\alpha}] \quad (4.412)$$

und somit [and thus](#)

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_+[\hat{H}_f, \hat{\alpha}]\hat{P}_+ &= 2 \left| \hat{H}_f \right| \hat{P}_+[\hat{P}_+, \hat{\alpha}]\hat{P}_+ = 2 \left| \hat{H}_f \right| (\hat{P}_+^2\hat{\alpha}\hat{P}_+ - \hat{P}_+\hat{\alpha}\hat{P}_+^2) \quad (4.413) \\
 &= 2 \left| \hat{H}_f \right| (\hat{P}_+\hat{\alpha}\hat{P}_+ - \hat{P}_+\hat{\alpha}\hat{P}_+) = 0
 \end{aligned}$$

Mit anderen Worten, in einem Zustand positiver Energie verschwinden die seltsamen Oszillationen. Wird der Zustand des Teilchens auch noch durch einen Eigenzustand des Impulsoperators beschrieben, dann ist die Partikelgeschwindigkeit durch $c^2\vec{p}/E(\vec{p})$ gegeben. Man kann mit den gleichen Rechnungen zeigen, daß die Oszillationen auch für jeden Zustand verschwinden, der ausschließlich aus ebenen Wellen negativer Energie aufgebaut ist. Allerdings ist dann die Partikelgeschwindigkeit eines Teilchens im Eigenzustand zum Impulswert \vec{p} gegeben durch $-c^2\vec{p}/E(\vec{p})$. Wir haben also das paradoxe Resultat, daß bei negativen Energieeigenwerten die Partikelgeschwindigkeit und der Partikelimpuls entgegengerichtet sind. [In other words, the oscillations do not show up in a positive-energy state. If in addition this state is an eigenstate of the momentum operator, the particle velocity is given by \$c^2\vec{p}/E\(\vec{p}\)\$. Similarly, the oscillations disappear for any pure negative-energy](#)

state. However, in this case the particle velocity for an eigenstate of the momentum operator with \vec{p} is given by $-c^2\vec{p}/E(\vec{p})$, i.e., velocity and momentum point in opposite directions!

Mischung von Zuständen positiver und negativer Energie **Mixing positive and negative-energy states**

Die Diskussion der Zitterbewegung läßt es wünschenswert erscheinen, Zustände negativer Energie als unphysikalisch zu erklären und von allen weiteren Untersuchungen auszuschließen. Auch ein weiteres Problem wäre damit aus der Welt geschafft. In der Dirac-Theorie ist das Spektrum der Energieeigenwerte nach unten offen. Befindet sich ein quantenmechanisches Teilchen also in einem Zustand mit einer gewissen Energie, so kann es durch Strahlungsprozesse permanent Energie abgeben und so sukzessive Zustände mit immer kleinerer Energie erreichen. Ein einziges Teilchen könnte deshalb entgegen der experimentellen Erfahrung unendlich viel Strahlungsenergie abgeben. Die willkürliche Charakterisierung aller Zustände negativer Energie als physikalisch unzulässig und der damit verbundene Ausschluß aus einer physikalischen Theorie bringt aber neue Probleme mit sich. In diesem Fall würde die notwendige Vollständigkeit der Eigenfunktionen beliebiger Operatoren nicht mehr gewährleistet sein, da alle Anteile negativer Energie ausprojiziert werden müssten. Noch gravierender ist aber, daß ein Teilchen, dessen Zustand aus ebenen Wellen positiver Energie zusammengesetzt ist, nur im Fall eines freien Teilchens auch in Zukunft diesen Status behält. In Gegenwart elektromagnetischer Felder gibt es aber stets Übergänge zwischen Zuständen positiver und negativer Energie. Man sieht diese Aussage sofort ein, wenn man bedenkt, daß der Ortsoperator und damit auch alle ortsabhängigen Potentiale keine geraden Operatoren sind. Deshalb wird jeder Zustand, der anfänglich nur aus Impulseigenfunktionen mit positiver Energie besteht, im Laufe der Zeit in einen Zustand umgewandelt, der eine Superposition sowohl aus energetisch positiven wie auch aus negativen Anteilen ist. *From the discussion above one might want to exclude the negative-energy states as physical solutions. However, this cannot be done since (i) the eigen value spectrum of any operator would not be complete anymore and (ii) only free particles remain in pure positive- (or negative-)energy states for all times. The presence of electromagnetic fields gives rise to transitions between states of positive and negative energy. This is understood from the fact that the position operator (and thus all spatially dependent potentials) are no even operators and will thus change the sign of the energy of the particle as time evolves.*

Dirac's Löchertheorie **Hole theory**

Zur Lösung der mit den negativen Energieeigenwerten verbundenen Probleme verwendete Dirac die Tatsache, daß Elektronen als Spin-1/2-Teilchen das Pauli'sche Ausschließungsprinzip erfüllen. Er nahm deshalb an, daß alle Zustände negati-

ver Energie vollständig besetzt sind und deshalb nach dem Ausschließungsprinzip keinen weiteren Teilchen Platz finden. Dieser vollbesetzte *Dirac-See* wird als Vakuumzustand interpretiert. Eine direkte Beobachtung der Elektronen des Dirac-Sees ist bei dieser Interpretation nicht möglich. Als Schwierigkeit erweist sich zunächst, daß der Dirac-See eine unendlich große Masse und eine unendlich große Ladung besitzt. Dieses Problem ist aber nicht gravierend, da man die unendliche Masse durch eine Verschiebung der Energieskala, die unendliche Ladung durch eine Redefinition des Ladungsbegriffs beseitigen kann. Betrachten wir ausschließlich freie Teilchen, dann sind die Energieeigenwerte durch $\pm\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ gegeben. Damit erstreckt sich das negative Energiespektrum über den Wertebereich $-\infty < E \leq -mc^2$, das positive dagegen über $mc^2 \leq E < \infty$. Im Bereich $-mc^2 < E < mc^2$ gibt es keine zulässigen Energiewerte.

Durch Anregung mit einer Mindestenergie von $2mc^2$ kann ein Elektron aus einem Zustand negativer Energie in den Zustand positiver Energie gehoben werden und wird damit als reales Elektron mit einer negativen Ladung beobachtbar. Zugleich hinterläßt es ein effektiv positiv geladenes Loch. Dieses Loch wird *Positron* genannt und stellt das *Antiteilchen* \bar{e} zum Elektron e dar. Natürlich gibt es auch den dieser Paarerzeugung entgegengesetzten Prozeß der Paarvernichtung. Angenommen im Dirac-See sei ein durch Impuls- und Spinquantenzahl bestimmter Zustand nicht besetzt, also ein Loch vorhanden. Ein Elektron der Ladung e kann dieses Loch auffüllen und damit das Vakuum wieder herstellen. Da der Endzustand das Vakuum ist, muß das Loch eine positive Ladung $+|e|$ gehabt haben.

Wir wollen die Eigenschaften der bei einer Paarerzeugung entstehenden Teilchen und Antiteilchen auf einer phänomenologischen Ebene untersuchen. Dazu nehmen wir an, daß ein Elektron negativer Energie E_- mit dem Impuls \vec{p} durch Absorption eines Photons aus dem Dirac-See in einen Zustand positiver Energie E_+ mit dem Impuls \vec{p}_+ angeregt wird. Dann ist die hierfür benötigte Photonenenergie

$$\hbar\omega = \sqrt{m^2c^4 + c^2\vec{p}_+^2} - (-\sqrt{m^2c^4 + c^2\vec{p}_-^2}) = E_+ - E_- \quad (4.414)$$

Offenbar haben Elektron und Positron die gleiche Masse m . Da für das Vakuum der Gesamtimpuls und die Gesamtenergie verschwinden, führt die Entfernung eines Elektrons des Impulses \vec{p}_- zu einem Loch (Positron) des Impulses $\vec{p}_p = -\vec{p}_-$ und der Energie $E_p = -E_-$. Deshalb kann die Paarerzeugung auch als Bildung eines Elektrons der Energie $E_e = E_+$ und des Impulses $\vec{p}_e = \vec{p}_+$ und eines Positrons der Energie $E_p = -E_-$ und des Impulses $\vec{p}_p = -\vec{p}_-$ verstanden werden.

Eine analoge Aussage gilt für den Spin. Da die z-Komponente des Photonenspins ± 1 ist, müssen wegen der Drehimpulsbilanz Elektron und Positron entweder beide den Spin $+1/2$ oder $-1/2$ besitzen. Die Entfernung eines Elektrons negativer Energie im Spinzustand \vec{S} aus dem insgesamt spinfreien Vakuum hinterläßt ein Loch vom Spin $-\vec{S}$. Deshalb entspricht ein Positron mit Spin \vec{S}_p einem Elektron negativer Energie mit dem Spin $-\vec{S}_p$.

To cope with this problem, Dirac introduced the hypothesis, known as hole theory, that the vacuum is the many-body quantum state in which all the negative-energy electron eigenstates are occupied, see discussion in chapter 4.5.

5 Wegintegralformulierung der Quantenmechanik The path integral formulation of quantum mechanics

5.1 Zeitentwicklungsoperator The time evolution operator

Zeitliche Entwicklung eines Systems werde durch Schrödingergleichung beschrieben
 The Hamiltonian generates the time evolution of quantum states according to the SE

Anfangszustand initial state $|\psi(t_A)\rangle$

$$\downarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (5.1)$$

späterer Zustand final state $|\psi(t)\rangle$

Die entsprechende Abbildung wird durch unitären Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_A)$ vermittelt
 The time evolution in the corresponding vector space is given by the application of the time evolution operator

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_A) |\psi(t_A)\rangle \quad (5.2)$$

Einsetzen in Schrödingergleichung oben ergibt Evolutionsgleichung für \hat{U}
 From the SE one obtains the following equation of motion

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_A) = \hat{H} \hat{U}(t, t_A) \quad (5.3)$$

für autonome, d.h. zeitunabhängige Hamiltonoperatoren ergibt sich
 when the Hamiltonian does not depend upon time (autonomous) then

$$\hat{U}(t, t_A) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_A)}. \quad (5.4)$$

Falls \hat{H} zeitabhängig ergibt sich
 for time-dependent Hamiltonians one finds

$$\hat{U}(t, t_A) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_A) \quad (5.5)$$

(mit Anfangsbedingung with initial condition $\hat{U}(t_A, t_A) = \hat{I}$)

Zur Lösung dieser Integralgleichung setzt man \hat{U} iterativ unter dem Integral ein
 Solve the integral equation by iteratively inserting \hat{U}

$$\hat{U}(t, t_A) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') \int_{t_A}^{t'} dt'' \hat{H}(t'') \hat{U}(t'', t_A) \quad (5.6)$$

weitere Iterationen ergeben schließlich **which finally results in**

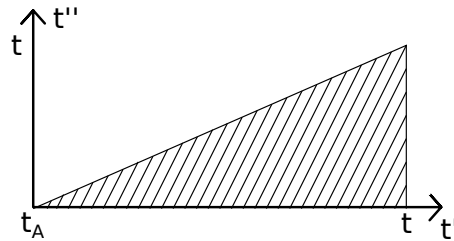
$$\hat{U}(t, t_A) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') \int_{t_A}^{t'} dt'' \hat{H}(t'') + \dots \quad (5.7)$$

$$\dots + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_A}^t dt' \int_{t_A}^{t'} dt'' \int_{t_A}^{t''} dt^{(n-1)} \hat{H}(t') \hat{H}(t'') \dots \hat{H}(t^{(n)}) \quad (5.8)$$

betrachten dritten Term etwas genauer **consider third term in more detail**

$$T_3 = \int_{t_A}^t dt' \int_{t_A}^{t'} dt'' \hat{H}(t') \hat{H}(t'') \quad (5.9)$$

Integrationsgebiet **region of integration**



Integrand ist das zeitgeordnete Produkt $\hat{H}(t')\hat{H}(t'')$ mit $t'' \leq t'$ **it is integrated over the time-ordered product $\hat{H}(t')\hat{H}(t'')$ where $t'' \leq t'$**

können Integrationsgebiet vergrößern auf **may double the region integration**

$$t_A \leq t' \leq t, \quad t_A \leq t'' \leq t \quad (5.10)$$

bei Einführung eines Faktors $\frac{1}{2}$, **provided we multiply by $\frac{1}{2}$**
 müssen außerdem auf korrekte Zeitordnung achten **and are cautious with respect to the correct order of integration**

\Rightarrow Führen Zeitordnungsoperator \hat{T} ein, der die Faktoren eines Produkts so anordnet, daß spätere Ereignisse links von früheren stehen. **It is useful to introduce an operator \hat{T} called time-ordering operator, that interchanges the operators if necessary to achieve the proper time ordering.**

Es gilt **It holds**

$$T_3 = \frac{1}{2} \hat{T} \int_{t_A}^t dt' \int_{t_A}^t dt'' \hat{H}(t') \hat{H}(t'') \quad (5.11)$$

$$= \frac{1}{2} \hat{T} \left(\int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') \right)^2. \quad (5.12)$$

Allgemein gilt für das $(n + 1)$ -te Glied der Reihenentwicklung **Generally it holds for the $(n + 1)$ th term of the series**

$$T_{n+1} = \frac{1}{n!} \hat{T} \left(\int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') \right)^n. \quad (5.13)$$

Damit erhalten wir **Hence**

$$\hat{U}(t, t_A) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \hat{T} \left(\int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t') \right)^n \quad (5.14)$$

$$= \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^t dt' \hat{H}(t')}. \quad (5.15)$$

Damit formale Lösung für die Evolutionsgleichung **Thus we arrive at the formal solution of the equation of motion**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_A) = \hat{H} \hat{U}(t, t_A) \quad (5.16)$$

gewonnen. Im Spezialfall eines autonomen Hamiltonoperators folgt das bekannte Ergebnis **In the special case of an autonomous Hamiltonian one obtains as expected**

$$\hat{U}(t, t_A) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_A)}. \quad (5.17)$$

5.2 Propagatoren Propagators

Starten von Schrödingergleichung **Consider Schrödinger equation**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (5.18)$$

formale Lösung durch **formal solution given by**

$$|\psi(t_E)\rangle = \hat{U}(t_E, t_A) |\psi(t_A)\rangle \quad (5.19)$$

gegeben. Ortsdarstellung erhalten wir durch skalare Multiplikation mit dem Eigenzustand $\langle x_E |$ zur Endzeit t_E **The position representation is obtained by scalar multiplication by the eigenstate $\langle x_E |$ at the final time t_E**

$$\langle x_E | \psi(t_E) \rangle = \langle x_E | \hat{U}(t_E, t_A) | \psi(t_A) \rangle \quad (5.20)$$

$$= \int dx_A \langle x_E | \hat{U}(t_E, t_A) | x_A \rangle \langle x_A | \psi(t_A) \rangle \quad (5.21)$$

$\int dx_A |x_A\rangle \langle x_A| = \hat{I}$

D.h. die Wahrscheinlichkeitsamplitude [The probability amplitude](#)

$$\psi(x_E, t_E) = \langle x_E | \psi(t_E) \rangle \quad (5.22)$$

für das Auftreten des Teilchens zur Endzeit t_E am Ort x_E gegeben durch Integration über alle anfänglichen Teilchenpositionen x_A gewichtet mit der Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators [for the appearance of the particle at the position \$x_E\$ at the final time \$t_E\$ given by integrating over all initial positions \$x_A\$ weighted with the position representation of the time evolution operator](#)

$$\langle x_E | \hat{U}(t_E, t_A) | x_A \rangle \quad (5.23)$$

wird daher auch als Propagator bezeichnet. [is called propagator.](#)

Kompaktere Darstellung in der Form [Often are more compact notation is used](#)

$$\psi(x_E, t_E) = \int dx_A K(x_E, t_E; x_A, t_A) \psi(x_A, t_A) \quad (5.24)$$

mit dem Integralkern (Propagator) [employing the integration kernel \(propagator\)](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \langle x_E | \hat{U}(t_E, t_A) | x_A \rangle \quad (5.25)$$

$$= \langle x_E | \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} \hat{H}(t') dt'} | x_A \rangle \quad (5.26)$$

können jetzt einen Zwischenzeitpunkt t_1 einführen [may introduce intermediate time \$t_1\$](#)

$$t_A < t_1 < t_E \quad (5.27)$$

$$|\psi(t_E)\rangle = \hat{U}(t_E, t_1) \hat{U}(t_1, t_A) |\psi(t_A)\rangle \quad (5.28)$$

in Ortsdarstellung folgt [in position representation it follows](#)

$$\langle x_E | \psi(t_E) \rangle = \langle x_E | \hat{U}(t_E, t_1) \hat{U}(t_1, t_A) | \psi(t_A) \rangle \quad (5.29)$$

$$= \int dx_1 dx_A \langle x_E | \hat{U}(t_E, t_1) | x_1 \rangle \langle x_1 | \hat{U}(t_1, t_A) | x_A \rangle \langle x_A | \psi(t_A) \rangle \quad (5.30)$$

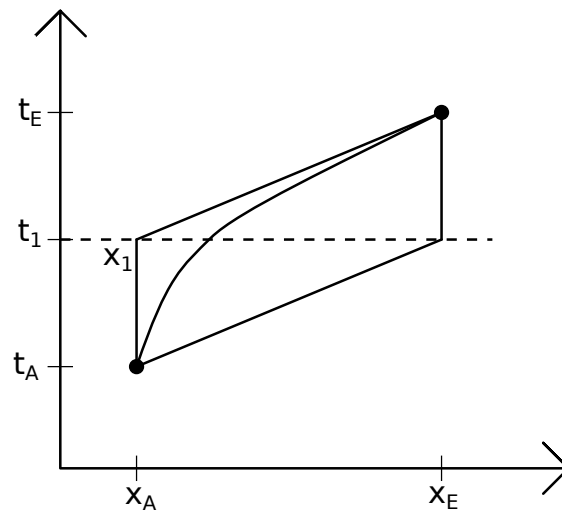
d.h. i.e.,

$$\psi(x_E, t_E) = \int dx_1 dx_A K(x_E, t_E; x_1, t_1) K(x_1, t_1; x_A, t_A) \psi(x_A, t_A) \quad (5.31)$$

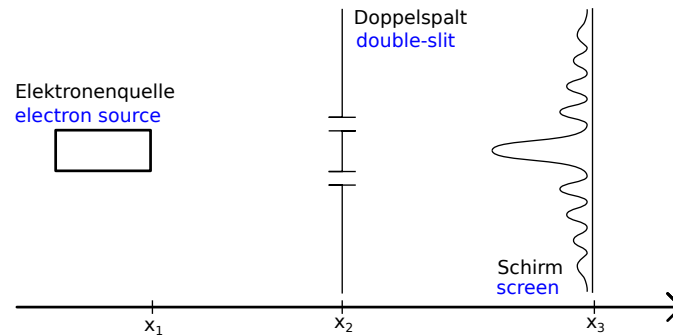
offensichtlich gilt [obviously](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \int dx_1 K(x_E, t_E; x_1, t_1) K(x_1, t_1; x_A, t_A) \quad (5.32)$$

unten siehe graphische Darstellung des Propagators des Teilchens von (x_A, t_A) nach (x_E, t_E) mit verschiedenen Zwischenpunkten (x_1, t_1) [below see schematic representation of the propagator of the particle moving from \$\(x_A, t_A\)\$ to \$\(x_E, t_E\)\$ with intermediate coordinates \$\(x_1, t_1\)\$](#)



Beispiel: Doppelspaltexperiment [Example: double-slit experiment](#)



Übergangsamplitude von Quelle 1 zum Schirm 3 gegeben durch [transition amplitude from the source 1 to the screen 3](#) given by

$$K(3; 1) = K(3; 2_A)K(2_A; 1) + K(3; 2_B)K(2_B; 1) \quad (5.33)$$

Intensität am Schirm gegeben durch [intensity at screen reads](#)

$$|K(3; 1)|^2 = (K(3; 2_A)K(2_A; 1) + K(3; 2_B)K(2_B; 1))^* \times (K(3; 2_A)K(2_A; 1) + K(3; 2_B)K(2_B; 1)) \quad (5.34)$$

$$= |K(3; 2_A)K(2_A; 1)|^2 + |K(3; 2_B)K(2_B; 1)|^2 + K^*(3; 2_A)K^*(2_A; 1)K(3; 2_B)K(2_B; 1) + K^*(3; 2_B)K^*(2_B; 1)K(3; 2_A)K(2_A; 1) \quad (5.35)$$

Ist Öffnung A verschlossen, verbleibt nur Beitrag $|K(3; 2_B)K(2_B; 1)|^2$, analog verbleibt bei verschlossener Öffnung B nur $|K(3; 2_A)K(2_A; 1)|^2$ und die Interferenzterme verschwinden. [Provided slit A is closed only the contribution](#)

$|K(3; 2_B)K(2_B; 1)|^2$ will be present, similarly only $|K(3; 2_A)K(2_A; 1)|^2$ survives if the slit B is closed, and the interference terms disappear.

Zurück zum Propagator, fügen weitere Zwischenzeitpunkte ein. Teilen dazu das Intervall [Let us come back to the propagator. We introduce further intermediate times and divide the interval](#)

$$[t_A, t_E] \quad (5.36)$$

in N äquidistante Intervalle der Länge [in \$N\$ equidistant intervals of length](#)

$$\tau = \frac{t_E - t_A}{N}. \quad (5.37)$$

Damit [Thus](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \langle x_E | \hat{U}(t_E, t_{N-1}) \hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_A) | x_A \rangle \quad (5.38)$$

durch Einschieben von Vollständigkeitsrelationen [by employing the completeness relation](#)

$$\hat{I} = \int dx_j |x_j\rangle \langle x_j| \quad (5.39)$$

ergibt sich [one obtains](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \int dx_{N-1} \dots dx_1 K(x_E, t_E; x_{N-1}, t_{N-1}) K(x_{N-1}, t_{N-1}; x_{N-2}, t_{N-2}) \dots \dots K(x_2, t_2; x_1, t_1) K(x_1, t_1; x_A, t_A). \quad (5.40)$$

Die letzte Formel ist so zu interpretieren, daß das Teilchen alle denkbaren Wege zwischen Anfangs- und Endpunkt durchläuft. [The last expression suggests that the particle uses all conceivable paths between initial and final coordinates.](#)

Bei der Durchführung des Grenzübergangs [Calculating the limit](#)

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow 0}} N\tau = t_E - t_A \quad (5.41)$$

geht die Zahl der Integrationen gegen unendlich, der Propagator ergibt sich dann als Funktionalintegral [the number of integrations resches infinite. The propagator is then given as functional integral.](#)

5.3 Propagator für zeitunabhängigen Hamiltonoperator

Propagator for time-independent Hamiltonian

betrachten ein einzelnes Wegelement von [consider individual path element](#)
 $(x_j, t_j) \rightarrow (x_{j+1}, t_{j+1})$

$$K(x_{j+1}, t_{j+1}; x_j, t_j) = \langle x_{j+1} | \hat{U}(t_{j+1}, t_j) | x_j \rangle \quad (5.42)$$

$$= \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t_{j+1} - t_j)} | x_j \rangle \quad (5.43)$$

$$= \langle x_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau} | x_j \rangle \quad (5.44)$$

$$= \langle x_{j+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \tau + O(\tau^2) | x_j \rangle \quad (5.45)$$

$$= \underbrace{\langle x_{j+1} | x_j \rangle}_{\delta(x_{j+1} - x_j)} - \frac{i}{\hbar} \tau \langle x_{j+1} | \hat{H} | x_j \rangle + O(\tau^2) \quad (5.46)$$

$$\parallel$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j)}$$

Müssen jetzt noch das Matrixelement des Hamiltonoperators auswerten [Need to evaluate the matrix elements of the Hamiltonians](#)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (5.47)$$

unter Ausnutzung von $\hat{I} = \int dp_j |p_j\rangle \langle p_j|$ schreiben wir [Exploiting that \$\hat{I} = \int dp_j |p_j\rangle \langle p_j|\$ one obtains](#)

$$\langle x_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | x_j \rangle = \int dp' \int dp_j \langle x_{j+1} | p' \rangle \langle p' | \frac{\hat{p}^2}{2m} | p_j \rangle \langle p_j | x_j \rangle \quad (5.48)$$

Erinnerung QM I [Reminder QM I](#)

$$\langle x_{j+1} | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p' x_{j+1}} \quad (5.49)$$

$$\langle p_j | x_j \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j} \quad (5.50)$$

offensichtlich gilt außerdem [in addition it holds](#)

$$\langle p' | \frac{\hat{p}^2}{2m} | p_j \rangle = \frac{p'^2}{2m} \delta(p' - p_j) \quad (5.51)$$

damit [thus](#)

$$\langle x_{j+1} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | x_j \rangle = \int \frac{dp' dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} (p' x_{j+1} - p_j x_j)} \frac{p'^2}{2m} \delta(p' - p_j) \quad (5.52)$$

$$= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j)} \frac{p_j^2}{2m} \quad (5.53)$$

ähnlich behandeln wir das Matrixelement des Potentials [in a similar manner we obtain the matrix element of of the potential](#)

$$\langle x_{j+1}|V(\hat{x})|x_j\rangle = V(x_j)\langle x_{j+1}|x_j\rangle \quad (5.54)$$

$$= V(x_j)\delta(x_{j+1} - x_j) \quad (5.55)$$

$$= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_j(x_{j+1}-x_j)} V(x_j) \quad (5.56)$$

damit finden wir insgesamt [altogether we obtain](#)

$$\langle x_{j+1}|\hat{H}|x_j\rangle = \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_j(x_{j+1}-x_j)} \left(\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right) \quad (5.57)$$

$$= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p_j(x_{j+1}-x_j)} H(p_j, x_j) \quad (5.58)$$

Dabei ist $H(p_j, x_j)$ die dem Hamiltonoperator entsprechende klassische Hamiltonfunktion. [Here \$H\(p_j, x_j\)\$ denotes the classical Hamiltonian function that corresponds to the Hamiltonian operator](#)

Damit ergibt sich für den infinitesimalen Propagator in Gleichung 5.42 [Thus we obtain the infinitesimal propagator as given by 5.42](#)

$$K(x_{j+1}, t_{j+1}; x_j, t_j) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j e^{\frac{i}{\hbar}p_j(x_{j+1}-x_j)} + \dots$$

$$\left(-\frac{i\tau}{\hbar} \right) \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j e^{\frac{i}{\hbar}p_j(x_{j+1}-x_j)} H(p_j, x_j) + O(\tau^2) \quad (5.59)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_j e^{\frac{i}{\hbar}p_j(x_{j+1}-x_j)} \left(1 - \frac{i\tau}{\hbar} H(p_j, x_j) \right) \quad (5.60)$$

$$= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(p_j(x_{j+1}-x_j) - \tau H(p_j, x_j))}. \quad (5.61)$$

Damit jetzt in den Ausdruck für den Gesamtpropagator [Now we enter the expression for the total propagator](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \int dx_{N-1} \dots dx_1 K(x_E, t_E; x_{N-1}, t_{N-1}) \dots$$

$$\dots K(x_{N-1}, t_{N-1}; x_{N-2}, t_{N-2}) \dots K(x_1, t_1; x_0, t_0) \quad (5.62)$$

eingehen führt zu [and obtain](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) \quad (5.63)$$

$$= \int \underbrace{\left(\prod_{j=1}^{N-1} dx_j \right)}_{D_x} \underbrace{\left(\prod_{j=0}^{N-1} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \right)}_{D_p} \underbrace{\left(\prod_{j=0}^{N-1} e^{\frac{i}{\hbar}[p_j(x_{j+1}-x_j) - \tau H(p_j, x_j)]} \right)}_{e^{\sum_{j=0}^{N-1} \frac{i}{\hbar} [p_j(x_{j+1}-x_j) - \tau H(p_j, x_j)]}} \quad (5.64)$$

Im Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ ist [Calculating the limit](#) $N \rightarrow \infty$ [one obtains](#)
 $\tau \rightarrow 0$ $\tau \rightarrow 0$

$$\dot{x}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{x(t_{j+1}) - x(t_j)}{t_{j+1} - t_j} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{x_{j+1} - x_j}{\tau} \quad (5.65)$$

und wir erhalten [thus](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \int D_x D_p e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} dt [p\dot{x} - H(p, x)]} \quad (5.66)$$

Bei diesem symbolischen Integral (die praktische Auswertung erfolgt über das Vielfachintegral oben) wird über alle Wege im Phasenraum integriert. Daher der Name Pfadintegral. [Here the symbolic integration involves all possible paths in phase space. This leads to the term "path integral".](#)

Zur weiteren Analyse dieses Ausdrucks setzen wir im Vielfachintegral oben jetzt die Hamiltonfunktion ein [For further analysis of this expression we now insert above the Hamiltonian function](#)

$$H(p_j, x_j) = \frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \quad (5.67)$$

und erhalten [and obtain](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \left\{ \prod_{j=0}^{N-1} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} [p_j(x_{j+1} - x_j) - \frac{p_j^2}{2m}\tau - V(x_j)\tau]}_*} \right\} \quad (5.68)$$

$$* = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\tau}{2m} \left[p_j^2 - \frac{2m}{\tau} (x_{j+1} - x_j) p_j + \frac{m^2}{\tau^2} (x_{j+1} - x_j)^2 \right]} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\tau}{2m} \frac{m^2}{\tau^2} (x_{j+1} - x_j)^2} e^{-\frac{i}{\hbar} V(x_j)\tau}$$

jetzt [now substitute](#)

$$p'_j = p_j - \frac{m}{\tau} (x_{j+1} - x_j) \quad (5.69)$$

und erhalten [and obtain](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=0}^{N-1} \frac{dp'_j}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\tau p_j'^2}{2m}} \dots \quad (5.70)$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\tau}{2m} \frac{m^2}{\tau^2} (x_{j+1} - x_j)^2} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} V(x_j)\tau} \quad (5.71)$$

durch ausnutzen von **exploiting that** $\int e^{-p^2} dp = \sqrt{\pi}$

$$= \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} e^{\frac{i}{\hbar} \tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\tau} \right)^2 - V(x_j) \right]} \quad (5.72)$$

$$= \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\tau} \right)^2 - V(x_j) \right]} \quad (5.73)$$

$$\begin{array}{c} \downarrow \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow 0}} \\ \underbrace{\frac{m}{2} \dot{x}(t)^2 - V(x(t))}_{[L(x, \dot{x})]} \\ \text{Lagrange-Funktion} \end{array}$$

Damit **Thus**

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = N \int D_x e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} dt L(x, \dot{x})} \quad (5.74)$$

↑
Normierungsfaktor

Mit der Definition der klassischen Wirkungsfunktion **By using the definition of action**

$$S = \int_{t_A}^{t_E} L dt \quad (5.75)$$

haben wir somit eine auf der Lagrange-Funktion basierende Formulierung der Quantenmechanik gefunden: **one obtains a formulation of the quantum mechanics that is based on the Lagrangian mechanics:**

$$K(x_E, t_E, x_A, t_A) = N \int D_x e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (5.76)$$

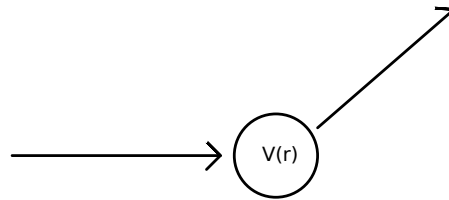
In der klassischen Mechanik folgt das Teilchen der Trajektorie, die die Wirkung minimiert. In der Quantenmechanik sind viele Trajektorien mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit an der Propagation des Teilchens beteiligt. Der größte Beitrag kommt aber dabei auch von den Bahnen, die S minimieren. Die Bahnen mit größeren S tragen wegen der Oszillationen von $e^{\frac{i}{\hbar} S}$ wenig zum Propagator bei. **In classical mechanics the particle follows one specific path, determined by the principle of least action. In quantum mechanics, however, many trajectories contribute with specific probabilities to the particle motion. The main contribution is thereby given by the path that minimizes S . Paths with larger S contribute less to the propagator, due to the oscillations of $e^{\frac{i}{\hbar} S}$.**

Bem: Note: Für den Propagator mit zeitabhängigem Hamiltonoperator ergibt sich in Analogie zur obigen Rechnung [For time-dependent Hamiltonians one obtains in a similar manner as above](#)

$$K(x_E, t_E; x_A, t_A) = \int D_x D_p e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} dt (p\dot{x} - H(p, x, t))} \quad (5.77)$$

5.4 Lippmann–Schwinger–Gleichung Lippmann–Schwinger equation

betrachten ein Teilchen, das an einem Potential $V(\vec{r}, t)$ gestreut wird [consider particle which gets scattered by a potential \$V\(\vec{r}, t\)\$](#)



Starten vom Propagator des Teilchens in 3D (vgl. Kapitel 5.3) [Start from this particle's propagator calculated in three dimensions \(cf. chapter 5.3\)](#)

$$K(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) = N \int D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} dt L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})} \quad (5.78)$$

$$= N \int D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} dt (T - V)} \quad (5.79)$$

$$= N \int D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} T dt} \left\{ \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} V(\vec{r}, t) dt + \dots \right\} \quad (5.80)$$

$$= K_0 + K_1 + K_2 + \dots \quad (5.81)$$

berechnen zunächst K_0 [Calculate first \$K_0\$](#)

$$K_0 = N \int D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_E} T dt} \quad (5.82)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{3N}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} d^3 \vec{r}_j e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \tau \frac{m}{2} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\tau} \right)^2} \quad (5.83)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{3N}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} d^3 \vec{r}_j e^{\frac{im}{2\hbar\tau} ((\vec{r}_E - \vec{r}_{N-1})^2 + (\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_{N-2})^2 + \dots + (\vec{r}_1 - \vec{r}_A)^2)} \quad (5.84)$$

Unter Ausnutzung von [Exploit that](#)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda [(\vec{b} - \vec{r}_n)^2 + (\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1})^2 + \dots + (\vec{r}_1 - \vec{a})^2]} d^3 \vec{r}_1 \dots d^3 \vec{r}_n = \left[\frac{i^n \pi^n}{(n+1)\lambda^n} \right]^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i\lambda}{n+1} (\vec{b} - \vec{a})^2} \quad (5.85)$$

ergibt sich mit $\lambda = m/(2\hbar\tau)$ für den freien Propagator
 and obtain by substituting $\lambda = m/(2\hbar\tau)$ for the free particle propagator

$$K_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{3N}{2}} \left(\frac{2\pi i \hbar \tau}{m} \right)^{\frac{3(N-1)}{2}} \cdot \frac{1}{N^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\tau} \frac{1}{N} (\vec{r}_E - \vec{r}_A)^2} \quad (5.86)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau N} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2\tau} \frac{1}{N} (\vec{r}_E - \vec{r}_A)^2} \quad (5.87)$$

mit $N\tau = t_E - t_A$ folgt it follows

$$K_0 = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_E - t_A)} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(\vec{r}_E - \vec{r}_A)^2}{t_E - t_A}} \quad (5.88)$$

wegen Kausalität muß der Propagator für $t_E < t_A$ verschwinden, d.h. due to causality the propagator vanishes for $t_E < t_A$, i.e.,

$$K_0 = \Theta(t_E - t_A) \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_E - t_A)} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(\vec{r}_E - \vec{r}_A)^2}{t_E - t_A}} \quad (5.89)$$

bestimmen jetzt den zweiten Teil des Propagators now determine the propagator's second part

$$K_1 = N \int D\vec{r} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_E}^{t_A} T dt} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_A}^{t_E} V(\vec{r}, t) dt \quad (5.90)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{m}{i\hbar\tau} \right)^{\frac{3N}{2}} \int \prod_{j=0}^{N-1} d\vec{r}_j e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\tau m}{2} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\tau} \right)^2} \sum_{k=0}^{N-1} \tau V(\vec{r}_k, t_k) \quad (5.91)$$

zerlegen die Summe im Exponenten in zwei Teile expand the sum in the exponent in two terms

$$\sum_{j=0}^{N-1} = \sum_{j=0}^{k-1} + \sum_{j=k}^{N-1} \quad (5.92)$$

damit thus

$$K_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{3N}{2}} \sum_{k=0}^{N-1} \tau \int d^3\vec{r}_{N-1} \dots d^3\vec{r}_{k+1} d^3\vec{r}_k d^3\vec{r}_{k-1} \dots d^3\vec{r}_1 \times \quad (5.93)$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=k}^{N-1} \frac{\tau m}{2} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\tau} \right)^2} V(\vec{r}_k, t_k) e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{k-1} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\tau} \right)^2} \quad (5.94)$$

spalten das Integral auf und ziehen $\int d^3\vec{r}_k$ heraus [Split the integral and bracket out \$\int d^3\vec{r}_k\$](#)

$$K_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{i\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \tau \int d^3\vec{r}_k \times \quad (5.95)$$

$$\left\{ \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau} \right)^{\frac{3(N-k)}{2}} \int d^3\vec{r}_{N-1} \dots d^3\vec{r}_{k+1} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=k}^{N-1} \frac{\tau m}{2} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\tau} \right)^2} \right\} \times \quad (5.96)$$

$$V(\vec{r}_k, t_k) \left\{ \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\tau} \right)^{\frac{3k}{2}} \int d^3\vec{r}_{k-1} \dots d^3\vec{r}_1 e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\tau m}{2} \left(\frac{\vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j}{\tau} \right)^2} \right\} \quad (5.97)$$

offensichtlich entspricht die erste geschweifte Klammer gerade $K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_k, t_k)$, die zweite geschweifte Klammer ist $K_0(\vec{r}_k, t_k; \vec{r}_A, t_A)$ [obviously the first curly bracket corresponds to \$K_0\(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_k, t_k\)\$, and the second one to \$K_0\(\vec{r}_k, t_k; \vec{r}_A, t_A\)\$, respectively](#)

mit dem Grenzübergang und dem Übergang zu kontinuierlichen Variablen Umbenennung [calculate limit and change to continues variables](#)

$$\sum_{k=1}^{N-1} \tau \rightarrow \int_{t_A}^{t_E} dt; \quad \vec{r}_k \rightarrow \vec{r} \quad (5.98)$$

erhalten wir schließlich [and obtain eventually](#)

$$K_1(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3\vec{r} K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}, t) V(\vec{r}, t) K_0(\vec{r}, t; \vec{r}_A, t_A) \quad (5.99)$$

(wegen Kausalität ist [causality requires](#)

$$K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}, t) = 0 \quad \text{für for} \quad \begin{array}{l} t > t_E \quad \text{oder or} \\ t < t_A \end{array} \quad (5.100)$$

deshalb können wir Zeitintegration bis $\pm\infty$ ausdehnen [therefore may integrate to \$\pm\infty\$](#))

Unter Verwendung der gleichen Umformung wie bei K_1 können wir K_2 bestimmen. [Similarly to the case of \$K_1\$ we may determine \$K_2\$.](#)

es ergibt sich [One obtains](#)

$$K_2 = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \int d^3\vec{r}' \int d^3\vec{r}'' K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}'', t'') \times \quad (5.101)$$

$$\times V(\vec{r}'', t'') K_0(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') K_0(\vec{r}', t'; \vec{r}_A, t_A). \quad (5.102)$$

Analoge Ausdrücke ergeben sich für die höheren Terme. [Analogous expressions are obtained for higher-order terms.](#)

Der Gesamtpropagator ist dann [The full propagator reads then](#)

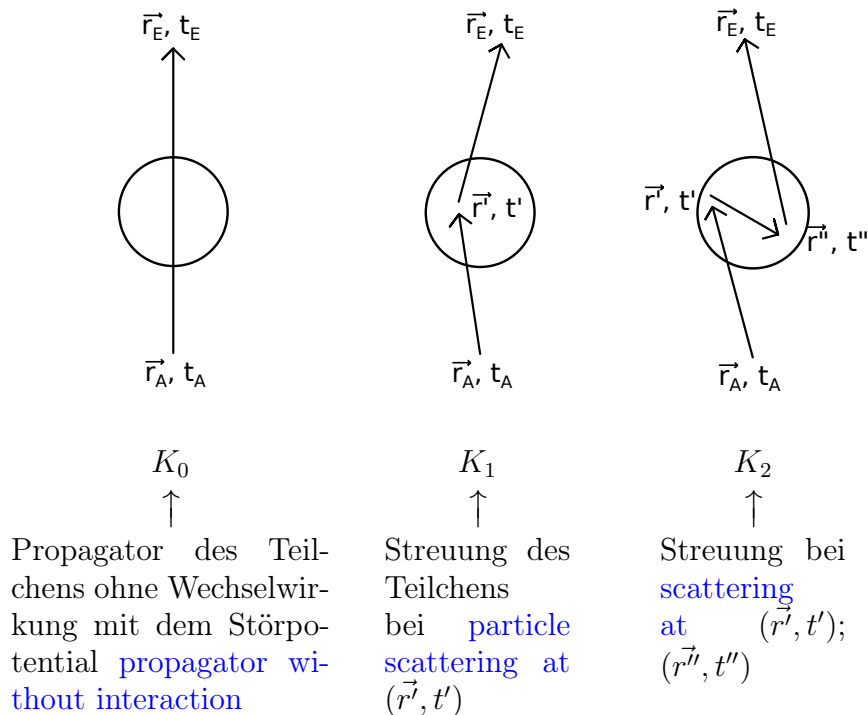
$$K(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) = K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) \quad (5.103)$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \int K_0(\vec{r}_E, t_E, \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') K_0(\vec{r}', t', \vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}' dt' \quad (5.104)$$

$$+ \frac{1}{(i\hbar)^2} \int K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}'', t'') V(\vec{r}'', t'') K_0(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') \times \quad (5.105)$$

$$\times V(\vec{r}', t') K_0(\vec{r}', t'; \vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}' d^3\vec{r}'' dt' dt'' + \dots \quad (5.106)$$

Diese Störungsreihe des Propagators wird als “Born’sche Reihe” bezeichnet und kann sehr anschaulich durch multiple Wechselwirkungen des Teilchens mit dem Streupotential veranschaulicht werden: [This expression is known as “Born series”.](#) [It can be visualized in an intuitive way as multiple interactions between particle and scattering potential.](#) [The Born series inspired Feynman to formulate relativistic quantum mechanics in terms of vertices connected together into “Feynman diagrams.”](#)



setzen jetzt die Born’sche Reihe für den Propagator in dem Ausdruck 5.24 für die Wellenfunktion ein [insert now the Born series expression for the propagator in our](#)

wave function equation 5.24

$$\psi(\vec{r}_E, t_E) = \int K(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) \psi(\vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}_A \quad (5.107)$$

$$= \int K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) \psi(\vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}_A \quad (5.108)$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \int K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') K_0(\vec{r}', t'; \vec{r}_A, t_A) \times \\ \psi(\vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}' dt' d^3\vec{r}_A \\ + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') K_0(\vec{r}', t'; \vec{r}'', t'') \times \\ V(\vec{r}'', t'') K_0(\vec{r}'', t''; \vec{r}_A, t_A) \psi(\vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}'' d^3\vec{r}' dt'' dt' d^3\vec{r}_A \\ + \dots$$

Klammern jetzt aus dem zweiten und allen höheren Termen den Ausdruck [Bracket the following expression out of second and higher-order terms](#)

$$\frac{1}{i\hbar} \int d^3\vec{r}' dt' K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') \quad (5.109)$$

aus und erhalten [and obtain](#)

$$\psi(\vec{r}_E, t_E) = \int K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) \psi(\vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}_A \quad (5.110)$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \int d^3\vec{r}' dt' K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') \times \\ \int d^3\vec{r}_A \{ K_0(\vec{r}', t'; \vec{r}_A, t_A) + \\ \frac{1}{i\hbar} \int d^3\vec{r}'' dt'' K_0(\vec{r}', t'; \vec{r}'', t'') V(\vec{r}'', t'') \\ K_0(\vec{r}'', t''; \vec{r}_A, t_A) \dots \} \psi(\vec{r}_A, t_A)$$

Vgl. mit Gl. 5.108 zeigt, daß offensichtlich gilt [comparison with Eq. 5.108 shows that](#)

$$\int d^3\vec{r}_A \{ \quad \} \psi(\vec{r}_A, t_A) = \psi(\vec{r}', t') \quad (5.111)$$

Damit erhalten wir eine Integralgleichung zur Bestimmung der Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ die als [This leads us to an integral equation determining the wave function \$\psi\(\vec{r}, t\)\$ that is known as](#)

Lippmann–Schwinger–Gleichung [Lippmann–Schwinger Equation](#)

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}_E, t_E) = & \int K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}_A, t_A) \psi(\vec{r}_A, t_A) d^3\vec{r}_A \\ & + \frac{1}{i\hbar} \int d^3\vec{r}' dt' K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}', t') V(\vec{r}', t') \psi(\vec{r}', t') \end{aligned} \quad (5.112)$$

bekannt ist. Dabei handelt es sich um eine exakte Integralgleichung, für die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$. Der erste Term entspricht dabei der Entwicklung des Anfangszustands für ein freies Teilchen. [It is an exact equation for the wave function \$\psi\(\vec{r}, t\)\$. Its first term corresponds to the evolution for a free particle.](#)

6 Greenfunktion der Einteilchen–Schrödingergleichung Green's Function of the Single-Particle Schrödinger Equation

In the theory of interacting systems the *Green's function*, or the propagator, plays a crucial role. In its basic definition it is a much more complex function than the "simple" Green's function, familiar from the theory of partial differential equations, but many of its properties do bear a very close relationship to the simple function. It is worthwhile, therefore, to review the theory of Green's functions within the framework of the Schrödinger equation and perturbation theory.

6.1 Definition und Darstellung Definition and Representation

Es gelte Suppose we have a partial differential equation of the general form

$$\{\hat{H}(r) - E\}\psi(r) = 0 \quad (6.1)$$

mit $H \dots$ hermitescher Operator. Dann ist die zugehörige Greenfunktion definiert durch where $\hat{H}(\mathbf{r})$ is a general Hermitian operator. The Green's function is defined as the solution of the equation

$$\{\hat{H}(r) - E\}G(r, r'; E) = -\delta(r - r') \quad (6.2)$$

wobei $G(r, r'; E)$ und $\psi(r)$ den selben Randbedingungen genügen. which also satisfies the same boundary conditions imposed on the original problem. In other words it satisfies the same equation and boundary conditions as the wave function $\psi(r)$ but with an additional "source" at an arbitrary position r' . It is this extra degree of freedom which makes the Green's function so very useful.

Darstellung mittels EV und EW von \hat{H}

Green's function in terms of the eigenvalues E_n and eigenfunctions $\psi_n(\mathbf{r})$ of the defining operator

$$\{\hat{H}(r) - E_n\}\psi_n(r) = 0, \quad \hat{H} \text{ hermitesch hermitian}$$

$\Rightarrow \{\psi_n\}$ bilden VONS form a complete set

$\Rightarrow \{\psi_n\}$ können als Basis zur Darstellung von G benutzt werden may be used as a basis to represent G

Ansatz: ansatz

$$G(r, r'; E) = \sum_{n, n'} G_{n, n'} \cdot \psi_n(r) \cdot \psi_{n'}^*(r') \quad (6.3)$$

einsetzen in Definitionsgleichung [use in definition](#)

$$\{\hat{H}(r) - E\}G(r, r'; E) \quad (6.4)$$

$$= \sum_{n, n'} G_{n, n'} \{\hat{H}(r) - E\} \psi_n(r) \psi_{n'}^*(r') \quad (6.5)$$

$$= \sum_{n, n'} G_{n, n'} \{E_n - E\} \psi_n(r) \psi_{n'}^*(r') \quad (6.6)$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{\stackrel{!}{=} -\delta(r-r') = -\sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r')}$$

↑
 Vollständigkeit von [completeness of](#) $\{\psi_n\}$

$$\Rightarrow G_{n, n'} = \frac{\delta_{nn'}}{E - E_n} \quad (6.7)$$

$$\Rightarrow \boxed{G(r, r'; E) = \sum_n \frac{\psi_n(r) \psi_n^*(r')}{E - E_n}} \quad (6.8)$$

Nutzen der Greenfunktion? [Use of Green's function?](#)

Einfache Vorschrift zur Berechnung der Lösung des inhomogenen Problems [Having obtained the Green's function, what are its uses? The most common one in the theory of differential equations is that it tells us about the solution to the inhomogeneous problem. If we have an equation of the form](#)

$$\{\hat{H}(r) - E\}\psi(r) = f(r) \quad (6.9)$$

falls Greenfunktion des homogenen Problems bekannt [where \$f\(\mathbf{r}\)\$ is a known function. Provided we know the Green's function of the homogeneous problem](#)

$$\{\hat{H}(r) - E\}G(r, r'; E) = -\delta(r - r') \quad (6.10)$$

dann gilt [then \$\psi\(r\)\$ is given by](#)

$$\psi(r) = - \int f(r') G(r, r'; E) dr' \quad (6.11)$$

Beweis Proof: Anwendung von $\{\hat{H} - E\}$ von links

[This is easily verified by operating on both sides with \$\(\hat{H}\(\mathbf{r}\) - E\)\$:](#)

$$\{\hat{H}(r) - E\}\psi(r) = - \int \underbrace{\{\hat{H}(r) - E\}G(r, r'; E)}_{-\delta(r-r')} f(r') dr' \quad (6.12)$$

$$= \int f(r') \delta(r - r') dr' \quad (6.13)$$

$$= f(r) \quad (6.14)$$

□

D.h. wenn die Greenfunktion für die homogene Gleichung bekannt ist, erhält man mit geringer Mühe die Lösung einer beliebigen inhomogenen Gleichung. Thus knowing the Green's function for the homogeneous equation one can calculate, with the minimum of extra work, the properties of the solution under a whole range of different conditions.

6.2 Störungsrechnung mit Greenschen Funktionen Green's functions and Perturbation Theory

Kleiner Störterm $V(r)$, suchen Lösung von The most common form of inhomogeneity in quantum mechanics is the presence of a perturbation. In this case we have, in addition to the Hamiltonian $\hat{H}(r)$, which is assumed soluble, an extra, usually small potential $V(r)$, so that

$$\{\hat{H}(r) - E + V(r)\}\psi(r) = 0 \quad (6.15)$$

D.h. die Inhomogenität ist jetzt In terms of the chapter above this means that

$$f(r) = -V(r)\psi(r) \quad (6.16)$$

Sei $\psi_0(r)$ die Lösung des ungestörten Problems mit Greenfunktion $G(r, r'; E)$ Suppose $\psi_0(r)$ is a solution to the unperturbed equation with Green's function $G(r, r'; E)$

$$\{\hat{H}(r) - E\}\psi_0(r) = 0 \quad (6.17)$$

dann ist then we have an integral equation so solve for the wave function rather than a simple integral solution

$$\psi(r) = \psi_0(r) + \int G(r, r'; E)V(r')\psi(r') dr' \quad (*)$$

Beweis Proof: Anwendung von $\{\hat{H}(r) - E\}$ von links
 Operating on both sides with $(H(r) - E)$:

$$\{\hat{H}(r) - E\}\psi(r) \quad (6.19)$$

$$= \underbrace{\{\hat{H}(r) - E\}\psi_0(r)}_{\parallel} + \int \underbrace{\{\hat{H}(r) - E\}G(r, r'; E)}_{-\delta(r'-r)} V(r')\psi(r') dr' \quad (6.20)$$

$$= -V(r)\psi(r) \quad (6.21)$$

□

Lösung der Integralgleichung (*) durch Iteration: **Provided the effect of $V(\mathbf{r})$ is small, we might solve Eq. (*) by successive approximations. This gives**

$$\psi_0 = \psi_0(r) \tag{6.22}$$

$$\psi_1 = \psi_0(r) + \int G(r, r'; E)V(r')\psi_0(r') dr' \tag{6.23}$$

$$\psi_2 = \psi_0(r) + \int G(r, r'; E)V(r')\psi_1(r') dr' \tag{6.24}$$

$$= \underbrace{\psi_0(r) + \int G(r, r'; E)V(r')\psi_0(r') dr'}_{\psi_1} + \int \int G(r, r'; E)V(r')G(r', r'', E)V(r'')\psi_0(r'') dr' dr'' \tag{6.25}$$

Die so gefundene Lösung erinnert offensichtlich an die Born'sche Reihe aus Kapitel 5.4. Eine kompaktere Darstellung ergibt sich durch Diskretisierung. **This series is in fact reminiscent of the Born approximation series (see chapter 5.4). In treating series like these it is very easy to be sidetracked by the presence of various multiple integrals. There is a simpler way of writing these equations, however. Suppose we consider $V(r)$ a continuous function of the variable r . Let us now instead define $V(r)$ by its value on an array defined by an infinite set of points**

$$r \rightarrow r_n, \quad r_{n+1} - r_n = \delta \tag{6.26}$$

$$V(r) \rightarrow \{V(r_1), V(r_2), V(r_3), \dots\} \dots \text{Vektor} \tag{6.27}$$

entsprechend wird $G(r, r'; E)$ zur Matrix **Having V defined as an infinite array of numbers, the next step would be to write it as a vector in the infinite dimensional (Hilbert) space whose components are the $V(r_n)$. The Green's functions are defined in terms of two numbers (i.e., r, r') so $G(r, r', E)$ will become a matrix function in Hilbert space**

damit **Integrals like the one below then revert to being matrix products (where now, of course, the order is important) so that we have**

$$\int G(r, r'; E)V(r') dr' \rightarrow \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Anwendung einer} \\ \text{Matrix auf Vektor}}}{GV} \tag{6.28}$$

damit kompakte Darstellung der iterativen Lösung für ψ **If we now rewrite the**

perturbation series as

$$\psi = \psi_0 + GV\psi_0 + GVG\psi_0 + GVG\psi_0 + \dots \quad (6.29)$$

$$= \psi_0 + GV[\underbrace{\psi_0 + GV\psi_0 + GVG\psi_0 + \dots}_{\psi}] \quad (6.30)$$

$\psi = \psi_0 + GV\psi$	Dyson-Gleichung für ψ	(6.31)
--------------------------	----------------------------	--------

Die Dyson-Gleichung ist ähnlich zur Lippmann-Schwinger-Gleichung aus Kapitel 5.4. This integral equation is the simplest form of what is generally termed a *Dyson equation*. It reminds us of the Lippmann-Schwinger equation discussed in chapter 5.4. In many cases we are not interested in the wave function itself. The Green's function contains so much of interest that it is usually far better to work with it alone. Supposing we consider the same problem as before, but in terms of Green's functions.

Greenfunktion des gestörten Problems Green's function of perturbed system

kennen Greenfunktion des ungestörten Problems Suppose we know the solution of the problem

$$\{E - \hat{H}(r)\}G_0(r, r'; E) = \delta(r - r') \quad (6.32)$$

in Matrixschreibweise or in matrix notation

$$\{E \cdot I - H\}G_0 = I \dots \quad \text{Einheitsmatrix Identity} \quad (6.33)$$

suchen Greenfunktion die erfüllt wish to solve for the Green's function of the equation

$$\{E - \hat{H}(r) - V(r)\}G(r, r'; E) = \delta(r - r') \quad (6.34)$$

in Matrixschreibweise or in matrix notation

$$\{E \cdot I - H - V\}G = I \quad (6.35)$$

Lösung gegeben mittels Solution given as

$G = G_0 + G_0VG$	Dyson-Gleichung für G	(6.36)
-------------------	-------------------------	--------

This is again a "Dyson equation", this time for the Green's function.

Beweis Proof: Anwendung von $\{E \cdot I - H\}$ von links
 Operating on both sides with $\{E \cdot I - H\}$:

$$\{E \cdot I - H\}G = \underbrace{\{E \cdot I - H\}G_0}_I + \underbrace{\{E \cdot I - H\}G_0}_I VG = VG + I \quad (6.37)$$

$$\Rightarrow \{E \cdot I - H - V\}G = I \quad (6.38)$$

□

In der Rechnung wird iterative Lösung verwandt: In actual calculations again, in perturbation theory, we make successive approximations such as:

$$G_0 = G_0 \quad (6.39)$$

$$G_1 = G_0 + G_0VG_0 \quad (6.40)$$

$$G_2 = G_0 + G_0VG_1 \quad (6.41)$$

$$= \underbrace{G_0 + G_0VG_0}_{G_1} + G_0VG_0VG_0 \quad (6.42)$$

⋮

6.3 Zeitabhängige Greenfunktionen Time-Dependent Green's Functions

zeitabhängige Schrödingergleichung One must consider, in many cases, the time-dependent Schrödinger equation. This is written as

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}(r) \right\} \psi(r, t) = 0 \quad (6.43)$$

hat die formale Lösung and has the formal solution

$$\psi(r, t) = \psi(r) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (6.44)$$

Die zugehörige Greenfunktion ist definiert durch The defining equation for this Green's function is

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}(r) \right\} G(r, r'; t, t') = \hbar \delta(r - r') \delta(t - t') \quad (6.45)$$

falls $H = \hat{H}(r)$, d.h. zeitunabhängig, dann hängt G nur von $t - t' = \tau$ ab. Kann als Fouriertransformierte dargestellt werden Notice, that in this case, where H is not a function of time, the Green's function will only depend upon $t - t' = \tau$. The

Fourier transform of the energy-dependent Green's function defined below is the function we require.

$$G(r, r'; \tau) = \frac{1}{2\pi} \int G(r, r'; E) e^{-i\frac{E\tau}{\hbar}} dE \quad (6.46)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r') \int \frac{e^{-i\frac{E\tau}{\hbar}}}{E - E_n} dE \quad (6.47)$$

Auswertung des Integrals Here we have substituted the eigenfunction expansion form of the Green's function. As it stands (for real energies) this integral is undefined.

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\frac{E\tau}{\hbar}}}{E - E_n} dE \quad (6.48)$$

wegen Singularität nicht möglich, verlegen Polstelle in komplexe Ebene. If we evaluate the integral by a contour integral, then we have a number of possibilities, according to how we move the poles given by the zeros of the denominator.

$$\frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{-i\frac{E\tau}{\hbar}}}{E - E_n + i\delta} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{Diagram of a contour integral in the complex energy plane. The real axis is horizontal and labeled 'E'. A semi-circular contour is drawn in the lower half-plane, starting from the left, going right along the real axis, then curving down and left, then up and right back to the real axis. Arrows on the contour indicate a clockwise direction. A pole is marked with a dot in the lower half-plane at the position $E = E_n - i\delta$.$$
 \end{array} \quad (6.49)

integrieren in komplexer Ebene integrate in complex energy plane

$$\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{+\infty}^{-\infty} + \underbrace{\int_{\text{Contour}}}_{=0} = 2\pi i \sum_n \text{Res}(n) \quad (6.50)$$

Residuum Residue
 = 0 für for $\tau > 0$ weil
 because
 $e^{-i\frac{E\tau}{\hbar}} \rightarrow 0$

damit thus

$$\int_{+\infty}^{-\infty} = 2\pi i \lim_{E \rightarrow E_n - i\delta} \frac{(E - E_n + i\delta)e^{-i\frac{E}{\hbar}\tau}}{E - E_n + i\delta} \quad (6.51)$$

$$= 2\pi i e^{-i\frac{E_n - i\delta}{\hbar}\tau} \cdot \Theta(\tau) \quad (6.52)$$

↑

für $\tau < 0$ liegt das Integral in der oberen Halbebene, dort gibt es keine Polstelle und entsprechend verschwindet das Integral for $\tau < 0$ the integral is performed in the upper plane, there are no poles, and the integral thus vanishes

⇒ definieren 2 neue Greenfunktionen according to how we place the poles in the complex energy plane, we may define two Green's functions

$$G^R(r, r'; E) = \sum_n \frac{\psi_n(r)\psi_n^*(r')}{E - E_n + i\delta} \quad (6.53)$$

↓
FT

$$G^R(r, r'; t - t') = -i \sum \psi_n(r)\psi_n^*(r') e^{-i\frac{E_n - i\delta}{\hbar}(t-t')} \quad \text{für for } t > t' \quad (6.54)$$

$$= 0 \quad \text{für for } t < t' \quad (6.55)$$

retardierte Greenfunktion retarded Green's function

$$G^A(r, r'; E) = \sum_n \frac{\psi_n(r)\psi_n^*(r')}{E - E_n - i\delta} \quad (6.56)$$

↓
FT

$$G^A(r, r'; t - t') = i \sum \psi_n(r)\psi_n^*(r') e^{-i\frac{E_n + i\delta}{\hbar}(t-t')} \quad \text{für for } t < t' \quad (6.57)$$

$$= 0 \quad \text{für for } t > t' \quad (6.58)$$

avancierte Greenfunktion advanced Green's function

Warum interessant? Angenommen wir kennen die Eigenfunktion unseres Systems bei (r', t') , dann erhalten wir die Lösung bei (r, t) aus The time-dependent Green's function has one very interesting property, which gives rise to the term propagator (see previous chapter!) Suppose we have a problem in which we know the eigenfunction at some particular space-time point (r, t) , then we can obtain the wave function at a later time t from the integral

$$\psi(r, t) = \int iG^R(r, r', t - t')\psi(r', t') dr' \quad (6.59)$$

Beweis Proof: G^R einsetzen insert G^R

$$\psi(r, t) = \int \sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r') e^{-i \frac{E_n - i\delta}{\hbar} (t-t')} \psi(r', t') dr' \quad (6.60)$$

entwickeln $\psi(r', t')$ nach stationären Lösungen expanding $\psi(r', t')$ in terms of the eigenfunctions gives

$$\psi(r', t') = \sum_m \alpha_m \psi_m(r') e^{-i \frac{E_m t'}{\hbar}} \quad (6.61)$$

einsetzen we find

$$\psi(r, t) = \int \sum_{n,m} \psi_n(r) \psi_n^*(r') e^{-i \frac{E_n - i\delta}{\hbar} (t-t')} \alpha_m \psi_m(r') e^{-i \frac{E_m t'}{\hbar}} dr' \quad (6.62)$$

$$= \sum_{n,m} \alpha_m \psi_n(r) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \underbrace{\left[\int dr' \psi_n^*(r') \psi_m(r') dr' \right]}_{\delta_{nm}} \times \quad (6.63)$$

$$\times \underbrace{e^{i \frac{(E_n - E_m) t'}{\hbar}}}_{\substack{\downarrow n=m \\ 1}} \underbrace{e^{-\delta(t-t')}}_{\substack{\downarrow \delta \rightarrow 0 \\ 1}} \quad (6.64)$$

□

Bem. Note: • Die Eigenschaft die Zeitentwicklung eines Zustands aus der zeitabhängigen Greenfunktion zu erhalten, erinnert an die Propagatoren $K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}, t)$ aus Kapitel 5. Tatsächlich ist die Greenfunktion der Schrödingergleichung des freien Teilchens i.w. der Propagator Obviously in a very real sense the Green's function tells us how the wave function develops in time or how the particle described by the wave function propagates. Thus the Green's function corresponds to the propagator $K_0(\vec{r}_E, t_E; \vec{r}, t)$ introduced in chapter 5.

- Greenfunktion hat Pole bei den EW des Systems The Green's function has poles at the eigenvalues of the system

$$G(r, r'; E) = \sum_n \frac{\psi_n(r) \psi_n^*(r')}{E - E_n} \quad (6.65)$$

- Zusammenhang mit Dichtematrix The density matrix is defined as

$$\rho(r, r'; E) = \sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r') \delta(E - E_n) \quad (6.66)$$

gilt it holds

$$G^A(r, r'; E) - G^R(r, r'; E) = \sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r') \left(\frac{1}{E - E_n - i\delta} - \frac{1}{E - E_n + i\delta} \right) \quad (6.67)$$

unter Ausnutzung von exploiting the standard identity

$$\frac{1}{x \pm i\delta} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x) \quad (6.68)$$

(welche streng genommen nur unter dem Integral $\int dx$ gilt) erhält man
 (which is strictly true only under an integral $\int dx$) one obtains

$$G^A(r, r'; E) - G^R(r, r'; E) = 2\pi i \sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r') \delta(E - E_n) \quad (6.69)$$

$$\rho(r, r'; E) = \frac{1}{2\pi i} \{G^A(r, r'; E) - G^R(r, r'; E)\} \quad (6.70)$$

- Analogously the diagonal elements of the density function that correspond to the local density of states are obtained from the Green's function

$$\rho(r, r; E) = \rho(r; E) = \frac{1}{\pi} \Im \{G^A(r, r; E)\} \quad (6.71)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \Im \{G^R(r, r; E)\} \quad (6.72)$$

- Zusammenhang mit Erwartungswerten eines Operators The single-particle Green's function does not easily give the expectation value of an operator in a general state.

betrachten $\hat{O}(r)$ Supposing, however, that we have an operator $\hat{O}(r)$, then we can write the following related function

$$\lim_{\substack{t' \rightarrow t \\ r' \rightarrow r}} \text{Sp}[\hat{O}(r)G(r, r'; t - t')] \quad (6.73)$$

$$= \lim_{\substack{t' \rightarrow t \\ r' \rightarrow r}} \text{Sp} \left[\hat{O}(r) \sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t')} \right] \quad (6.74)$$

$$= \lim_{r' \rightarrow r} \text{Sp} \sum_n \psi_n^*(r') \hat{O}(r) \psi_n(r) \quad (6.75)$$

$$= \sum_n \int \psi_n^*(r) \hat{O}(r) \psi_n(r) dr \quad (6.76)$$

$$= \sum_n \langle n | \hat{O} | n \rangle \quad (6.77)$$

(notice the use of the trace ($\equiv \text{Sp}$) as a generalization of the sum of the diagonal elements of a matrix), i.e., for the simple single-particle Green's function such an expression gives the sum of the expectation values between the eigenfunctions. This is because all of the properties of the physical system have not yet been included into the Green's function. In particular, the expectation value requires a knowledge of which states are occupied.

Altogether, we see that in many respects the Green's functions can replace the wave functions in a single-particle system. This is not surprising, of course, in view of the similarity of the wave equations satisfied by the two functions. The reason for introducing Green's functions is, however, that even when the concept of single particle states have lost their meaning the Green's function can be defined and calculated in such a way that many of the properties seen in this chapter are retained.

Beispiel: freies Teilchen Example: free electron

Eigenvektoren und Eigenwerte sind bekannt, es gilt *start from the known eigenstates and eigenfunctions*

$$\psi_K(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad , \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

mit kontinuierlichem Index k , d.h. *with continuous k index, i.e.,*

$$\begin{aligned} G^R(\vec{r}, \vec{r}'; E) &= \sum_n \frac{\psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}')}{E - E_n + i\delta} \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\delta} \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty k^2 dk \frac{e^{i\vec{k}|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\delta} \end{aligned}$$

Dabei wird das Koordinatensystem so gewählt, daß $\vec{e}_z \parallel (\vec{r} - \vec{r}')$ mit $x = |\vec{r} - \vec{r}'|$ ergibt. Diese Substitution ergibt *Chose coordinate system such that $\vec{e}_z \parallel (\vec{r} - \vec{r}')$ with $x = |\vec{r} - \vec{r}'|$. This substitution results in*

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\delta} \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{ikx \cos \theta}}_{-\frac{e^{ikx \cos \theta}}{ikx} \Big|_0^\pi = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{ikx}}$$

Ausdehnung des Integrationsgebietes $\int_0^\infty dk \rightarrow \int_{-\infty}^\infty dk$ vereinfacht den letzten Term $\int_0^\infty dk \rightarrow \int_{-\infty}^\infty dk$ to get rid of e^{-ikx}

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^2 ix} \int_{-\infty}^\infty \frac{k \cdot dk \cdot e^{ikx}}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\delta}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int \underbrace{\frac{k \cdot dk \cdot e^{ikx}}{(\sqrt{\frac{2m(E+i\delta)}{\hbar^2}} - k)(\sqrt{\frac{2m(E+i\delta)}{\hbar^2}} + k)}}_I$$

I hat eine Polstelle 1. Ordnung in der oberen komplexen Ebene. Schließen den Integrationspfad in der oberen Ebene und nutzen den Residuensatz aus. [Close the integration path by an infinite semicircle in the upper half plane, where I has a pole, and employing the residue theorem.](#)

$$\oint_c f = 2\pi i \sum_a Res_a f$$

mit Residuen für Polstellen 1. Ordnung gegeben durch [with residue given by](#) $Res_a f = \lim_{z \rightarrow a} (z - a)f(z)$. Damit hier [This results in](#)

$$I = 2\pi i \lim_{k \rightarrow \kappa} -\frac{k e^{ikx}}{\kappa + k} = -i\pi e^{i\kappa x}$$

mit [where](#) $\kappa = \sqrt{\frac{2m(E+i\delta)}{\hbar^2}}$. Dies ergibt insgesamt die retardierte Greenfunktion in der Form [The retarded Green's function thus reads](#)

$$G^R = \frac{\Omega}{4\pi^2 ix} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (-i)\pi \cdot e^{i\kappa}$$

die sich mit $x = |r - r'|$ wie folgt darstellen läßt [back substitution of \$x = |r - r'|\$ leads to](#)

$$G^R(r, r'; E) = -\frac{\Omega m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\sqrt{2m(E+i\delta)}|r-r'|}}{|r-r'|} \quad (6.78)$$

Wenn man in der obigen Gleichung die Energie durch die kinetischen Energie des freien Teilchens ersetzt, wird die Beziehung zum früher berechneten freien Propagator (vgl. Gl. 5.86) deutlich. [Replacing the energy \$E\$ with the kinetic energy of a free particle shows the relation to the free propagator \(Eq. 5.86\) calculated earlier.](#)

Bemerkungen [remarks](#)

- Über die Greenfunktion läßt sich auch die Zustandsdichte bestimmen (vgl. 6.72) [Local density of states obtained from the Green's function, cf. 6.72](#)

$$D(r, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{r \rightarrow r'} \text{Im}\{G^R(r, r'; E)\} \quad (6.79)$$

$$= \frac{\Omega m}{2\pi^2\hbar^2} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(\frac{2mE}{\hbar^2}x)}{x} \quad (6.80)$$

$$= \frac{\Omega m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \sqrt{E} \quad (6.81)$$

Zustandsdichte hängt nicht vom Ort ab und ist wurzelförmig, d.h. entspricht unseren Erwartungen an freies Teilchen. [Confirms our expectations for a free particle in three dimension.](#)

- Zusammenhang mit Elektrodynamik? Betrachten den spezielle Fall $E=0$ [For the particular case \$E = 0\$ one obtains](#)

$$G^R(r, r'; E = 0) \sim -\frac{1}{4\pi|r-r'|}$$

Offensichtlich ist dies die Greenfunktion zur Laplace-Gleichung, das heißt sie erfüllt [As can be seen from definition of the Green's function 6.2 with \$E=0\$ and \$\hat{H} \sim \nabla^2\$ this is the Green's function corresponding to Laplace's equation, i.e.,](#)

$$\Delta_r G^R(r, r'; E = 0) = -\delta(r - r').$$

Wenn wir die Greensche Funktion des homogenen Problems kennen, kennen wir aber nach Gl. 6.11 auch die Lösung des inhomogenen Problems, d.h. der Poissonprobleme. [According to 6.11 the Green's function of the homogenous](#)

problems provides the solution of the inhomogenous problem, i.e., Poisson's equation

$$\Delta U(r) = -4\pi\rho(r) \quad (6.82)$$

Das heißt $U(r)$ kann über die Greensche Funktion als [The electrostatic potential \$U\$ that satisfies Poisson's equation is obtained as](#)

$$\begin{aligned} U(r) &= - \int \underbrace{G(r, r'; 0)}_{-\frac{1}{4\pi|r-r'|}} 4\pi\rho(r') dr' \\ &= \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' \end{aligned}$$

dargestellt werden, das heißt daß wir damit ein elektrostatisches Potential in quellenmäßiger Darstellung erhalten.

7 Mehrteilchensysteme Many-particle systems

7.1 Identische Teilchen Identical particles

Bisher jeweils immer auf ein Teilchen, in der Regel auf Elektron fokussiert. Typischerweise hat man es jedoch mit vielen Teilchen zu tun (Festkörper $N = 10^{23}$).
 Until now we studied the properties of single particles, typically electrons. In reality, however, one typically deals with system that contain many particles. A solid, e.g., has of the order of $N = 10^{23}$ particles.

⇒ brauchen Vielteilchenwellenfunktion **need many-body wavefunction**

$$|\psi\rangle \rightarrow \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \quad (7.1)$$

\uparrow
 Koordinaten
 aller N
 Teilchen
 N coordinates

$$\text{SG: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \right\} \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (7.2)$$

Lösung beliebig kompliziert, machen die Approximation “unabhängiger Teilchen”, d.h. die Elektronen “sehen” sich untereinander nicht, d.h. Coulombabstoßung der Elektronen klein gegenüber Bindungsenergie im Zentralpotential. **Analytical solution difficult, assume “independent particles”, i.e., the Elektrons do not interact with each other, i.e. assume that the Coulomb repulsion of the electrons is small compared to their binding energy in the external potential.**

$$\Rightarrow \hat{H} = \sum_i^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + V(\vec{x}_i) = \sum_i^N \hat{H}_i \quad (7.3)$$

zunächst **start with** $N = 2$

machen Ansatz **make ansatz** $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_1(\vec{x}_1) \cdot \psi_2(\vec{x}_2)$

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi_1(\vec{x}_1)\psi_2(\vec{x}_2) \quad (7.4)$$

$$= \psi_2 \underbrace{\hat{H}_1 \psi_1}_{E_1 \psi_1} + \psi_1 \underbrace{\hat{H}_2 \psi_2}_{E_2 \psi_2} \quad (7.5)$$

$$= (E_1 + E_2)\psi \quad (7.6)$$

D.h. für N unabhängige Teilchen gilt **For independent particles it holds**

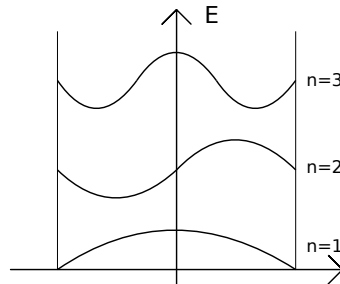
$\psi = \psi_1 \cdot \psi_2 \cdot \dots \cdot \psi_N$ ist eine spezielle Lösung und die zugehörige Energie ist **is a**

special solution and the corresponding energy is given by

$$E = \sum_i^N E_i \quad (7.7)$$

Bsp.: zwei Teilchen im Potentialtopf $-a < x < a$

Example: two independent particles in a potential well $-a < x < a$



$$E_n = n^2 \cdot K \quad \text{mit with} \quad K = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (7.8)$$

die Teilchen seien in $n_1 = 1$ und $n_2 = 3$ assume the particles to occupy the states $n_1 = 1$ and $n_2 = 3$

$$\Rightarrow E_{1,2} = E_1 + E_2 = (n_1^2 + n_2^2)K \quad (7.9)$$

$$\psi_{1,2} = \psi_1(1)\psi_2(2) \quad (7.10)$$

↑
 Teilchen 1 in Zustand 1
 particle 1 in state 1

$$= \frac{2}{a} \cdot \cos \frac{\pi}{2a} \lambda_1 x_1 \cdot \cos \frac{\pi}{2a} \lambda_2 x_2 \quad (7.11)$$

$n_1 = 1 \qquad n_2 = 3$

Untersuchen Zustand in dem Teilchen vertauscht sind Consider now state where the particles are interchanged

$$\psi_{2,1} = \hat{P}_{\vec{x}} \psi_{1,2} = \psi_1(2)\psi_2(1) \quad (7.12)$$

↑
 Operator der die
 Positionen vertauscht
 operator which
 interchanges the
 positions

$$= \frac{2}{a} \cos \frac{\pi}{2a} \lambda_1 x_2 \cdot \cos \frac{\pi}{2a} \lambda_2 x_1 \quad (7.13)$$

offensichtlich $E_{2,1} = E_{1,2}$ und obviously it holds $E_{2,1} = E_{1,2}$ and

$$\langle \psi_{1,2} | \psi_{2,1} \rangle = \underbrace{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle}_0 \underbrace{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}_0 = 0 \quad (7.14)$$

d.h. die beiden Zustände sind orthogonal i.e. the two states are orthogonal

$P_{1,2}/P_{2,1} \dots$ Wahrscheinlichkeit bei Wellenfunktion $\psi_{1,2}/\psi_{2,1}$ ein Teilchen bei x_1 und ein weiteres Teilchen bei x_2 zu finden **probability to find in case of wave function particle $\psi_{1,2}/\psi_{2,1}$ one particle at x_1 and another particle at x_2**

$$P_{1,2} = |\psi_{1,2}|^2 = \frac{4}{a^2} \cos^2\left(\frac{\pi}{a}\lambda_1 x_1\right) \cdot \cos^2\left(\frac{\pi}{a}\lambda_2 x_2\right) \quad (7.15)$$

$$P_{2,1} = |\psi_{2,1}|^2 = \frac{4}{a^2} \cos^2\left(\frac{\pi}{a}\lambda_1 x_2\right) \cdot \cos^2\left(\frac{\pi}{a}\lambda_2 x_1\right) \quad (7.16)$$

i. allg. **generally** $P_{1,2} \neq P_{2,1}$ für **for** $x_1 \neq x_2$!

Falls die Teilchen ununterscheidbar sind, wie z.B. Elektronen, ist dieses Ergebnis unphysikalisch! **This result is not meaningful in case of identical particles! Identical particles, also called indistinguishable or indiscernible particles, are particles that cannot be distinguished from one another, even in principle!**

\Rightarrow Lösung des Problems: Bilden eine Liko aus den orthogonalen WF $\psi_{1,2}$ und $\psi_{2,1}$
The problem can be solved by forming a linear combination of the two orthogonal wave functions $\psi_{1,2}$ and $\psi_{2,1}$

$$\psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1,2} + \psi_{2,1}) \quad (7.17)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_1(2)\psi_2(1)) \quad (7.18)$$

$$\psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1,2} - \psi_{2,1}) \quad (7.19)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)) \quad (7.20)$$

(Übung: Zeigen, daß $\langle \psi_S | \psi_S \rangle = 1$ und $\langle \psi_A | \psi_A \rangle = 1$ wenn die Einteilchenwellenfunktionen $\psi_i(i)$ normiert sind. **Exercise: Show that $\langle \psi_S | \psi_S \rangle = 1$ and $\langle \psi_A | \psi_A \rangle = 1$ for normalized single-particle wavefunctions $\psi_i(i)$**)

Offensichtlich **Obviously**

$$\psi_S(2, 1) = \hat{P}_{\vec{x}} \psi_S(1, 2) = \psi_S(1, 2) \quad (7.21)$$

WF symmetrisch bzgl. Teilchenaustausch **Wavefunction symmetric upon particle exchange**

$$\psi_A(2, 1) = \hat{P}_{\vec{x}} \psi_A(1, 2) = -\psi_A(1, 2) \quad (7.22)$$

WF antisymmetrisch bzgl. Teilchenaustausch **Wavefunction antisymmetric upon particle exchange**

$\Rightarrow P_{1,2} = P_{2,1}$ für $\psi_{S/A}$, d.h. die neuen Liko tragen der Ununterscheidbarkeit von identischen Teilchen (z.B. Elektron) Rechnung **the linear combinations formed above take the fact into account that the particles are indistinguishable**

Für Vertauschungsoperator $\hat{P}_{\vec{x}}$ gilt For the interchange operator $\hat{P}_{\vec{x}}$ it holds

$$\hat{P}_{\vec{x}}^2 = \hat{P}_{\vec{x}}\hat{P}_{\vec{x}} = \hat{I} \quad (7.23)$$

damit thus

$$\hat{P}_{\vec{x}}^2\psi(1, 2) = a^2\psi(1, 2) = \psi(1, 2) \quad (7.24)$$

d.h. EW $a = \pm 1$, d.h. $a \in \mathbb{R}$ hence, for the eigenvalues $a = \pm 1$, i.e. $a \in \mathbb{R}$

$\Rightarrow \hat{P}_{\vec{x}}$ hermitescher Operator hermitian operator

weiter gilt furthermore $[\hat{P}_{\vec{x}}, \hat{H}] = 0$, Beweis: proof:

$$\hat{P}_{\vec{x}}\hat{H}\psi(1, 2) = \hat{P}_{\vec{x}}(E_1 + E_2)\psi(1, 2) = \underbrace{(E_1 + E_2)\hat{P}_{\vec{x}}\psi(1, 2)}_{\psi(2,1)} \quad (7.25)$$

$$\hat{H}\hat{P}_{\vec{x}}\psi(1, 2) = \hat{H}\psi(2, 1) \quad (7.26)$$

(Erinnerung QMI reminder QMI)

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}]|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle \quad (7.27)$$

wegen because of $[\hat{P}_{\vec{x}}, \hat{H}] = 0$ und and $\frac{\partial\hat{P}_{\vec{x}}}{\partial t} = 0$ sind die EW it holds for the eigenvalues $a = \pm 1$ Erhaltungsgrößen des Systems, d.h. that are preserved upon time evolution, i.e.,

Der Symmetriecharakter eines Systems unter Vertauschung der Koordinaten von zwei Teilchen ist eine Erhaltungsgröße. The symmetry properties of a physical system upon interchange of two particle positions is conserved.

Allgemein gilt: Generally it holds:

Ein Vielteilchensystem ist in jedem Fall entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bei Teilchenaustausch und behält diese Eigenschaft bei. A many-body systems can be classified as either symmetric or antisymmetric upon particle interchange and will not change its symmetry properties.

Für For $x_1 = x_2$ gilt it holds

$$\left. \begin{aligned} |\psi_S|^2 &= 2|\psi_1(x)|^2|\psi_2(x)|^2 \\ |\psi_A|^2 &= 0 \end{aligned} \right\} \text{Beweis: Übung } \text{proof: exercise} \quad (7.28)$$

D.h. bei einem antisymmetrischen System keine Wahrscheinlichkeit identische Teilchen bei der gleichen Koordinate zu finden. **Two identical particles of an antisymmetric system cannot occupy the same position (more generally: single-particle state)**

Bei symmetrischen System ist die Wahrscheinlichkeit gleicher Koordinaten doppelt so groß wie bei unterscheidbaren Teilchen! **The probability to find two particles of a symmetric system at the same position (more generally: in the same single-particle state) is twice as large as for not-identical, independent particles!**

Symmetrieeigenschaften des Systems hängen von Natur der Teilchen ab: **The choice of symmetry or antisymmetry is determined by the species of particle:**

- Teilchen mit halbzahligen Spin haben antisymmetrische WF **Particles that have half-integer spin have antisymmetric wave functions**
(Bsp.: Elektronen, Protonen, **examples: electrons, protons, ...**)
 - werden als **Fermionen** bezeichnet **Particles with wavefunctions antisymmetric under exchange are called fermions.**
 - können gleiche Quantenzahlen (oben: gleiche Koordinaten) nicht besetzen **Fermions cannot occupy the same single-particle states. This is known as the Pauli exclusion principle, and it is the fundamental reason behind the chemical properties of atoms and the stability of matter.**
 - ⇒ daraus resultiert z.B. der Schalenbau der Atome **this is causing, e.g., the aufbau principle**
- Teilchen mit ganzzahligen Spin haben symmetrische WF **Particles that have integer spin have symmetric wave functions**
(Bsp.: Photonen, Phononen, **examples: photons, phonons, ...**)
 - werden als **Bosonen** bezeichnet **Particles with wavefunctions symmetric under exchange are called bosons.**
 - besetzen bevorzugt die gleichen Quantenzahlen (oben: gleiche Koordinaten) **Bosons have a tendency to clump into the same quantum state, which underlies phenomena such as the laser, Bose-Einstein condensation, and superfluidity.**

7.2 Fermionen

Fermions

speziell Elektronen **focus on electrons**

e^- mit verschiedenen Spin-Orientierungen sind prinzipiell unterscheidbar (z.B.

durch Anlegen eines B-Felds). Electrons of different spin orientation can be discriminated, e.g., by applying an external magnetic field

⇒ beziehen Spin-Koordinaten mit ein, d.h. need additionally their spin coordinate

$$\psi_1(1) = \psi_1(\vec{x}_1, s_1) \quad (7.29)$$

um System vollständig zu charakterisieren for complete characterization of the electrons

$$\hat{P}_{\vec{x}} \rightarrow \hat{P}_{\vec{x},s} \quad (7.30)$$

$$\hat{P}_{\vec{x},s}\psi_{1,2} = \hat{P}_{\vec{x},s}[\psi_1(\vec{x}_1, s_1)\psi_2(\vec{x}_2, s_2)] \quad (7.31)$$

$$= [\psi_1(\vec{x}_2, s_2)\psi_2(\vec{x}_1, s_1)] \quad (7.32)$$

$$= \psi_{2,1} \quad (7.33)$$

Falls keine Wechselwirkung zwischen Orts- und Spinkoordinate bestehen (d.h. unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung) können wir WF in Orts- und Spin-Anteil faktorisieren: In case there is no interaction between spatial and spin coordinates (i.e., if spin-orbit interaction is neglected) we can factorize the spatial and spin dependence of the wave function:

$$\psi(\vec{x}, s) = \underbrace{\psi(\vec{x})}_{\text{Ortsfunktion spatial function}} \underbrace{(\alpha_+\chi_+ + \alpha_-\chi_-)}_{\substack{\chi(s) \\ \text{Spinfunktion} \\ \text{spin function}}} \quad (7.34)$$

jetzt speziell 2 Elektronen consider now two electrons

$$\psi(1, 2) = \psi_{\vec{x}}(1, 2) \cdot \chi(1, 2) \quad (7.35)$$

muß antisymmetrisch sein needs to be antisymmetric

⇒ 2 Möglichkeiten: two possibilities:

- symmetrisch im Ort, antisymmetrisch im Spin symmetric with respect to position, antisymmetric with respect to spin
- antisymmetrisch im Ort, symmetrisch im Spin antisymmetric with respect to position, symmetric with respect to spin

dabei for the spin function it holds

$$\chi_S(1, 2) = c \cdot \{\chi_1(1)\chi_2(2) + \chi_1(2)\chi_2(1)\} \quad (7.36)$$

$$\chi_A(1, 2) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Normierung}}}{c} \cdot \{\chi_1(1)\chi_2(2) - \chi_1(2)\chi_2(1)\} \quad (7.37)$$

damit hence

$$\psi^{(A)}(1, 2) = \begin{cases} \psi_{\vec{x}}^{(A)}(1, 2)\chi_S(1, 2) \\ \psi_{\vec{x}}^{(S)}(1, 2)\chi_A(1, 2) \end{cases} \quad (7.38)$$

können Spinfunktion explizit angeben, da nur 2 Einstellmöglichkeiten vorhanden:
 spin funktion allows only for two values, may be explicitly given

$$\chi_1(1) \begin{cases} \nearrow \chi_+(1) \text{ Teilchen 1 hat Spin } \text{particle 1 has spin } \uparrow \\ \searrow \chi_-(1) \text{ Teilchen 1 hat Spin } \text{particle 1 has spin } \downarrow \end{cases} \quad (7.39)$$

damit folgende Möglichkeiten thus two possibilities

$$\chi_S = \begin{cases} \uparrow\uparrow + \uparrow\uparrow & = \chi_+(1)\chi_+(2) = \chi_1^1 \\ \left. \begin{matrix} \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow \\ \downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow \end{matrix} \right\} & = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)] = \chi_1^0 \\ \downarrow\downarrow + \downarrow\downarrow & = \chi_-(1)\chi_-(2) = \chi_1^{-1} \end{cases} \quad (7.40)$$

$$\chi_A = \begin{cases} \left. \begin{matrix} \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow \\ \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow \end{matrix} \right\} & = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] = \chi_0^0 \end{cases} \quad (7.41)$$

mit der Notation above the following notation has been used

$$\chi_s^{m_s} \quad \begin{array}{l} m_s \dots z\text{-Komponente des Gesamtspins } z \text{ component of total spin} \\ s = s_1 + s_2 \dots \text{ Gesamtspin } \text{total spin} \end{array} \quad (7.42)$$

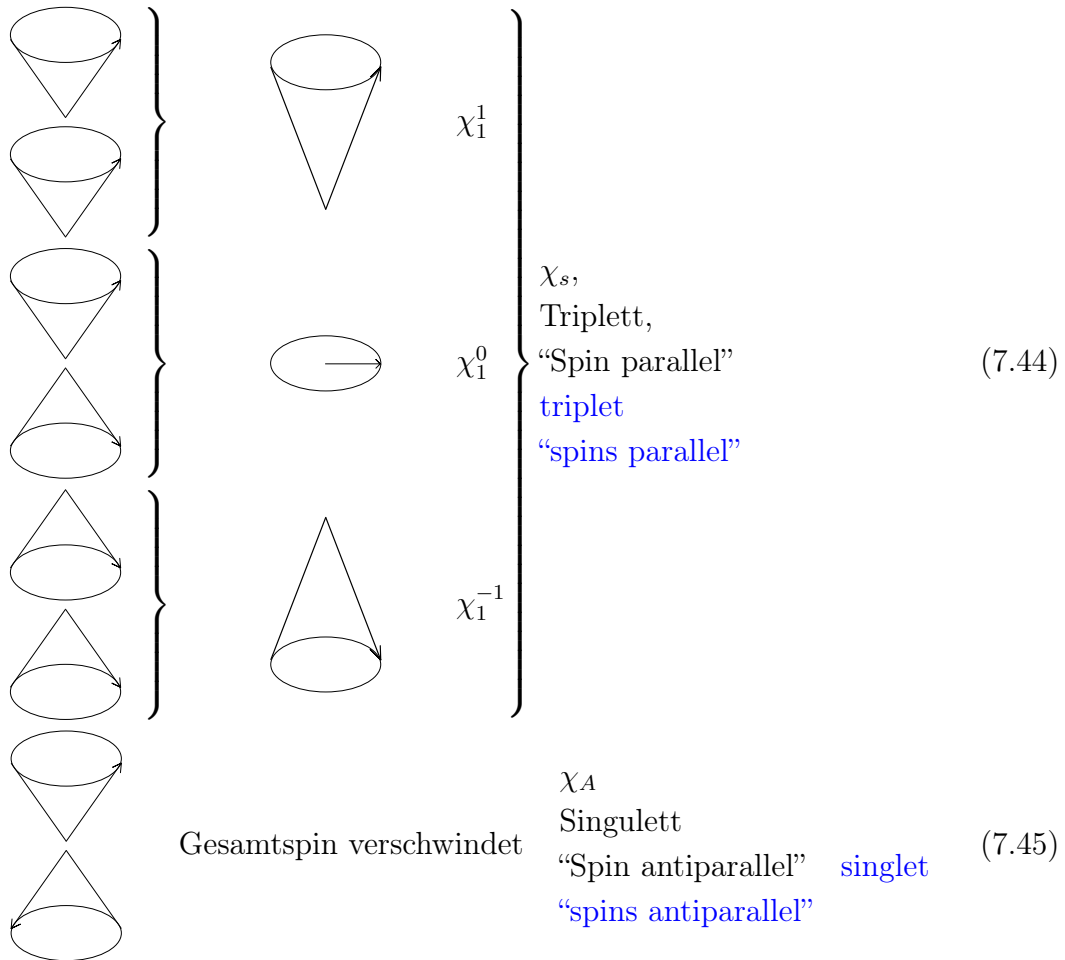
$$\chi_1^{-1}, \chi_1^0, \chi_1^1 \quad \begin{array}{l} \text{haben } \text{have } S = 1 \\ m_s = \{-1, 0, 1\} \end{array} \quad (7.43)$$

⇒ werden als “Triplet”-Zustände bezeichnet are called “triplet” states

χ_0^0 hat $S = 0, m_s = 0$ ⇒ Singulett-Zustand is called “singlet” state

(Übungsaufgabe: Beweisen, daß die Liko’s der $\chi_{\pm}(i)$ tatsächlich zu Triplet/Singulett-Zuständen führen Exercise: Demonstrate that the linear combinations above are indeed spin triplets or spin singlets)

graphische Interpretation [schematic illustration](#)



Falls die Spins ein Triplet bilden, ist die Ortswellenfunktion antisymmetrisch [Spin triplets have antisymmetric spatial wavefunction](#)

Für Singulett-Zustände ist die Ortswellenfunktion symmetrisch [Spin singlets must have symmetric spatial wavefunction](#)

Bem.: Der Symmetriecharakter der Ortswellenfunktion hat oft großen Einfluß auf die Energie des Zustands und bestimmt damit die Symmetrie der Spinorientierung
[Remark:](#) The symmetry character of the spatial wave function often has large influence on the state energy and thus enforces a specific spin orientation

Verallgemeinerung für N Fermionen [Generalization to \$N\$ fermions](#)

bisher 2 Fermionen, WF ist antisymmetrisch gegenüber einer Vertauschung der Teilchen [previously 2 fermions, wave function antisymmetric with respect to par-](#)

icle interchange

$$\psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1)] \quad (7.46)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) \end{vmatrix} \quad (7.47)$$

↑ Darstellung als Determinante möglich suggests representation as a determinante
 ↑ (x₁, s₁) Koord. coordinates Quantenzustand (z.B. n, l, m, m_s) quantum state (e.g. n, l, m, m_s)

Diese Darstellung kann auf N Fermionen verallgemeinert werden The expression can be generalized to any number of fermions by writing it as a determinant. For an N -electron system, the "Slater determinant" is defined as

$$\psi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \dots & \psi_1(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(1) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix} \quad (7.48)$$

die Vielteilchen-WF ist dann in der Form einer "Slater-Determinante" gegeben

Falls 2 Teilchen im gleichen QZ

⇒ 2 Spalten der Determinante sind gleich

⇒ $\psi_A \equiv 0$

⇒ Pauli-Prinzip: 2 Fermionen des gleichen Systems können nicht in allen ihren QZ übereinstimmen

The use of Slater determinants ensures conformity to the "Pauli principle". Indeed, the Slater determinant vanishes when two (or more) spin orbitals are the same. In chemistry one expresses this fact by stating that no two electrons can occupy the same spin orbital. The Pauli exclusion principle is the quantum mechanical principle that no two identical fermions (particles with half-integer spin) may occupy the same quantum state simultaneously. A more rigorous statement is that the total wave function for two identical fermions is anti-symmetric with respect to exchange of the particles. The principle was formulated by Austrian physicist Wolfgang Pauli in 1925.

7.3 Hartree-Näherung Hartree approximation

Suchen Näherungsverfahren zur Lösung eines Vielelektronensystems im Feld mehrerer Atomkerne In search for an approximate solution of the many-electron problem

Problemstellung: Hamiltonoperator der e^- Problem defined by the following Hamiltonian:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{k=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2}_{\text{kin. Energie der } e^- \text{ kinetic energy}} + \underbrace{\sum_{k=1}^N V(\bar{r}_k)}_{\text{ext. Potential}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{k \neq k'}^{N,N} \frac{e^2}{(\bar{r}_k - \bar{r}_{k'})}}_{e^- - e^- - \text{WW interaction}} \quad (7.49)$$

mit where $V(\bar{r}_k) = \underbrace{\sum_{a=1}^M}_{\text{Atome atoms}} -\frac{Zae^2}{|R_a - \bar{r}_k|}$

gilt energy eigenvalue problem $\hat{H}\Psi(\bar{r}_1\sigma_1; \dots; \bar{r}_n\sigma_n) = E^e\Psi(\dots)$ mit Spinvariable σ where σ denotes the spin

machen für Vielteilchen WF Ψ den Ansatz let us assume a trial wave function of the form

$$\Psi_H(\bar{r}_1\sigma_1; \dots; \bar{r}_n\sigma_n) = \Psi(\bar{r}_1; \dots; \bar{r}_n)\chi(\sigma_1; \dots; \sigma_n)$$

sinnvoll, da \hat{H} nicht auf Spinkoordinate wirkt (keine Spin-Bahn oder Spin-Spin-Kopplung) factorization of spin and spatial coordinates makes sense, because Hamiltonian does not act on spin

können χ weiter faktorisieren since we do not consider spin-spin interaction, we can further factorize χ

$$\chi(\sigma_1; \dots; \sigma_n) = \chi_1(\sigma_1)\chi_2(\sigma_2) \cdot \dots \cdot \chi_n(\sigma_n) \quad (7.50)$$

faktorisieren auch Ψ factorize Ψ as well

$$\Psi(\bar{r}_1; \dots; \bar{r}_n) = \varphi_1(\bar{r}_1)\varphi_2(\bar{r}_2) \cdot \dots \cdot \varphi_n(\bar{r}_n) \quad (7.51)$$

Für Ψ ist diese Darstellung nicht exakt, da die Elektron-Elektron-Wechselwirkung die Elektronen untereinander koppelt, keine unabhängigen Teilchen. Außerdem ist die so konstruierte Gesamtwellenfunktion Ψ_H symmetrisch unter Teilchenaustausch, d.h. sie genügt nicht dem Pauli-Prinzip für Fermionen! The factorization of Ψ is certainly an approximation, because the electrons interact with each other via the Coulomb repulsion. Moreover, the trial wave function is not antisymmetric, and thus does not take into account the exclusion principle!

Hoffnung: Kommen durch Variation von Ψ_H im Sinne des Ritz'schen Variationsprinzips dem elektrischen Grundzustand zumindest nahe. One hopes to obtain via energy minimization techniques like the Ritz method a reasonable wave function nevertheless.

Damit Hartree-Ansatz der Wellenfunktion: Thus Hartree ansatz for many-electron wave function

$$\Psi_H = \varphi_1(\bar{r}_1)\chi_1(\sigma_1)\dots\varphi_n(\bar{r}_n)\chi_n(\sigma_n) \quad (7.52)$$

nach Ritz gilt [According to the Ritz principle it holds](#)

$$E^e < \langle \Psi_H | \hat{H} | \Psi_H \rangle$$

WF normiert, im einzelnen gilt [Assume wave function to be normalized. It holds](#)

$$\sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n}^{\text{Spins}} \int |\Psi_H(\bar{r}_1 \sigma_1; \dots; \bar{r}_n \sigma_n)|^2 d^3 \bar{r}_1 \dots d^3 \bar{r}_n = 1$$

$$\sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} |\chi(\sigma_1; \dots; \sigma_n)|^2 = 1$$

$\sum_{\sigma} \chi_i^*(\sigma) \chi_j(\sigma) = \delta_{s_i s_j} = 1$ für parallele Spins, sonst 0 [for parallel spins, 0 otherwise](#)

$$\int |\Psi(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_n)|^2 d^3 \bar{r}_1 \dots d^3 \bar{r}_n = 1$$

$$\int \varphi_i^*(\bar{r}) \varphi_j(\bar{r}) d^3 \bar{r} = \delta_{ij}$$

berechnen damit [now calculate](#) $\langle \Psi_H | \hat{H} | \Psi_H \rangle = I$

Spin-WF \rightarrow Multiplikation mit 1 [Since the Hamiltonian does not contain the spin, the spin function integration amounts to a multiplication with 1](#)

bleibt Ortsanteil [We are left with the spatial wave functions. Because H only operates on the kth particle \(or the kth and the k'th particle\), the integrals over all the other particle coordinates are equal to one. Therefore the integral simplifies to](#)

$$\begin{aligned} I &= \sum_k^n \int \varphi_1^*(\bar{r}_1) \cdot \dots \cdot \varphi_n^*(\bar{r}_n) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_k^2}{2m} + V(\bar{r}_k) \right\} \varphi_1(\bar{r}_1) \cdot \dots \cdot \varphi_n(\bar{r}_n) d^3 \bar{r}_1 \cdot \dots \cdot d^3 \bar{r}_n \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k, k'; k \neq k'} \int \varphi_1^*(\bar{r}_1) \cdot \dots \cdot \varphi_n^*(\bar{r}_n) \frac{e^2}{|\bar{r}_k - \bar{r}_{k'}|} \varphi_1(\bar{r}_1) \cdot \dots \cdot \varphi_n(\bar{r}_n) d^3 \bar{r}_1 \cdot \dots \cdot d^3 \bar{r}_n \\ &= \sum_k^n \int \varphi_k^*(\bar{r}_k) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_k^2}{2m} + V(\bar{r}_k) \right\} \varphi_k(\bar{r}_k) d^3 \bar{r}_k \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k, k'; k \neq k'} \int \varphi_k^*(\bar{r}_k) \varphi_{k'}^* \frac{e^2}{|\bar{r}_k - \bar{r}_{k'}|} \varphi_k(\bar{r}_k) \varphi_{k'}(\bar{r}_{k'}) d^3 \bar{r}_k d^3 \bar{r}_{k'} \end{aligned}$$

Suchen jetzt die Einteilchenorbitale φ_i , die den Ausdruck I minimieren. Nebenbedingung: φ_i auf 1 normiert, wird mit Methode der Lagrange-Multiplikatoren berücksichtigt. [The trial wave function does not take into account the exclusion](#)

principle. The latter plays an important role, since if all the electrons could be in the same quantum state, the energy would be minimum with all the electrons in the lowest-energy single-particle orbital. To take the exclusion principle into account, we add to the ansatz represented the rule: Every electron must be in a different state. Technically, we do this by minimizing the energy subject to the constraint that the single-particle orbitals φ_i are normalized to one electron. This is done by applying Lagrange multipliers.

⇒ Minimierungsproblem für Funktional The optimization problem thus reads

$$F[\varphi_j] = \left\{ I[\varphi_1, \dots, \varphi_n] - \sum_{k=1}^n \epsilon_k \langle \varphi_k | \varphi_k \rangle \right\} \quad (7.53)$$

notwendige Bedingung für Minimum for minimum it holds

$$\frac{\delta F[\varphi_j(\bar{r}_j)]}{\delta \varphi_j^*(\bar{r}'_j)} = 0$$

nach Rechenvorschrift gilt für Funktionalableitung evaluation of functional derivatives

$$\frac{\delta F[\varphi_j(\bar{r}_j)]}{\delta \varphi_j^*(\bar{r}'_j)} = \frac{\partial F}{\partial \varphi_j^*} \delta(\bar{r}_j - \bar{r}'_j)$$

und wir erhalten somit The factor $\frac{1}{2}$ in front of the interaction term drops out because there are two equal terms from the derivative, $m = k$ and $m = k'$. Thus

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_j^2}{2m} + V(\bar{r}'_j) \right\} \varphi_j(\bar{r}'_j) + \sum_{k \neq j}^n \int \varphi_k^*(\bar{r}_k) \frac{e^2}{|\bar{r}'_j - \bar{r}_k|} \varphi_k(\bar{r}_k) d^3 \bar{r}_k \varphi_j(\bar{r}'_j) = \epsilon_j \varphi_j(\bar{r}'_j)$$

mit Teilchendichte with electron density $n(\bar{r}) = \sum_{k=1; k \neq j}^n |\varphi_k(\bar{r})|^2 + |\varphi_j(\bar{r})|^2$
 und Umbenennung and after relabeling $\bar{r}_k \rightarrow \bar{r}'$; $\bar{r}'_j \rightarrow \bar{r}$

folgt die Hartree-Gleichung one obtains the Hartree equation

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\bar{r}) + \int \frac{e^2 n(\bar{r}') d^3 \bar{r}'}{|\bar{r} - \bar{r}'|} - \int \frac{e^2 |\varphi_j(\bar{r}')|^2}{|\bar{r} - \bar{r}'|} d^3 \bar{r}' \right\} \varphi_j(\bar{r}) = \epsilon_j \varphi_j(\bar{r}) \quad (7.54)$$

d.h. Elektron im Orbital φ_j sieht Electron occupying orbital φ_j is subject to

- externes Potential external potential $V(\bar{r})$ (Atomrümpfe e.g., due to ions)
- elektrost. Potential aller anderen Elektronen Coulomb potential of all electrons

$$\int \frac{e^2 n(\bar{r}') d^3 \bar{r}'}{|\bar{r} - \bar{r}'|} = V_H(\bar{r})$$

- reduziert um die Selbstwechselwirkung **reduced by the self-interaction**

$$\int \frac{e^2 |\varphi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' = V_{SI}(r)$$

Wie kann man die Hartree-Gleichung lösen, wenn das effektive Potential

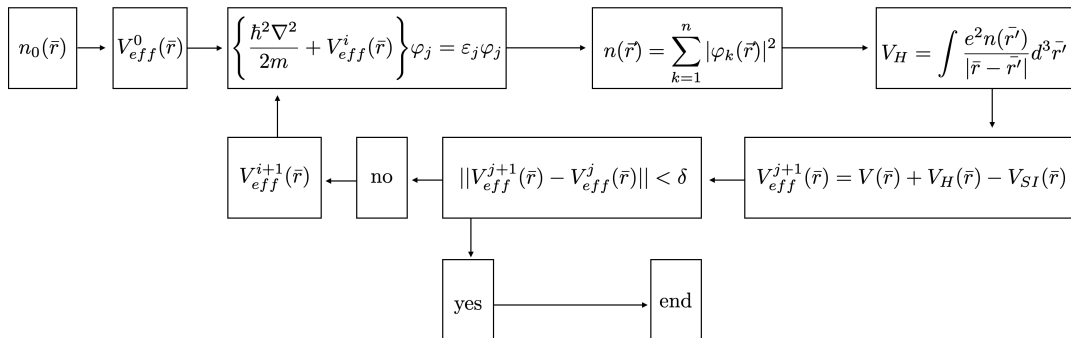
$$V_{eff}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) - V_{SI}(\vec{r})$$

von der (zunächst unbekannt) Teilchendichte $n(\vec{r})$ abhängt?
 ⇒ "Selbstkonsistenzverfahren"

The difficulty with solving this problem is that the Hartree potential connects the solutions of each of the single-particle states. In other words, this potential for particle m depends on the states of all the other $N - 1$ particles. For this reason, it is sometimes referred to as the "Self-Consistent" potential. The difficulty in solving for the N -particle state is simply that of finding a set of single particle states φ_i that together are solutions to the Hartree equation.

Starten von geratener Startladungsdichte $e^2 n_0(\vec{r})$ (z.B. aus der Superposition atomarer Ladungsdichten) und iterieren die Hartree-Gleichung, bis sich die WF (und damit das Potential) nicht mehr ändern.

Blockdiagramm des selbstkonsistenten Verfahrens zur Lösung der Hartree-Gleichung:



The approach to solving this problem numerically is essentially:

- Guess a set of single particle states, φ_i .
- Compute the Hartree potential, V_H , for each of the particles using the states guessed above.
- Solve the single-particle (Hartree) equations for the states using V_H .

- If the states obtained are the same as the states entering V_H , you are done.
- If the states obtained are different than the states entering V_H , use these as a new guess at the states.
- Repeat until convergence (solutions = guesses).

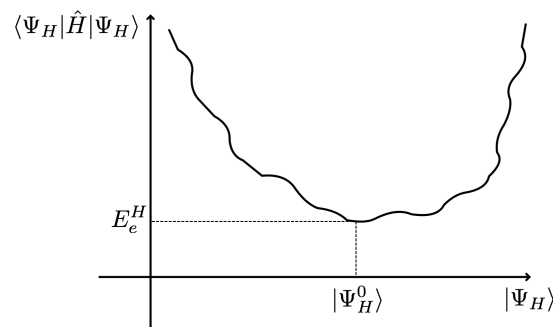
There are some subtleties in the process. The most important is that after solving for the single particle states, the new guess at the states is a mixture of the old guess from and the new solutions. If one uses the new states as the guesses, wild oscillations in the numerics often occur. Of course, the solution to the Hartree equation is not exact. The approximation used is that the solution to the problem can be written as a product of single particle states. This is the usual variational simplification, where the region of Hilbert space considered is limited by some guess as to the form of the states. Better solutions to the N -particle problem involve linear combinations of these Hartree-like basis states. This will be discussed in the next paragraph.

7.4 Hartree-Fock-Methode Hartree-Fock Method

Hartree-Verfahren: [Hartree method](#)

Minimieren [Minimize](#) $\langle \Psi_H | \hat{H} | \Psi_H \rangle$ bez. [with respect to](#) $|\Psi_H\rangle$

Problem: Raum der Funktion $|\Psi_H\rangle$, die zur Minimierung benutzt wurde, enthält die "wahre" WF gar nicht! [However, the region of the Hilbert space that is considered in the minimization does necessarily not contain the "true" solution!](#)



$|\Psi_H(\vec{r}_1 s_1, \dots, r_N s_N)\rangle$ ist symmetrisch bezüglich Vertauschung zweier Elektronen

[|Ψ_H⟩ is symmetric upon particle interchange](#)

⇒ erfüllt nicht das Pauli-Prinzip für Fermionen [does not comply with the Pauli principle](#)

⇒ Idee von Fock: Minimieren $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ über den Raum der antisymmetrischen

WF [Fock's idea: minimize $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ within the Hilbert space of antisymmetric](#)

wave functions

⇒ Ansatz: Slater-Determinante [ansatz: Slater determinant](#)

$$\begin{aligned}
 |\Psi_{HF}(r_1 s_1, \dots, r_N s_N)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1)\chi_1(1) & \cdots & \varphi_N(1)\chi_N(1) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_1(N)\chi_1(N) & \cdots & \varphi_N(N)\chi_N(N) \end{vmatrix} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \varphi_1(P)\chi_1(P) \cdots \varphi_N(P)\chi_N(P)
 \end{aligned} \tag{7.55}$$

Summe läuft über alle Permutationen [sum up over all permutations](#)

WF normiert [assume normalized wave function](#) $\langle \Psi_{HF} | \Psi_{HF} \rangle = 1$

Einteilchenorbitale orthogonal [single-particle orbitals orthogonal](#)

$$\langle \varphi_i | \varphi_k \rangle = \delta_{ik}$$

jetzt analoges Vorgehen wie bei Hartree-Näherung; berechnen [proceed in analogy to the derivation of the Hartree equations, calculate](#)

$$\begin{aligned}
 &\langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle \\
 &= \sum_{i=0}^N \sum_{\sigma_i} \int \varphi_i^*(i)\chi_{s_i}^*(i) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V(i) \right\} \varphi_i(i)\chi_{s_i}(i) d^3 \bar{r}_i \\
 &+ \frac{e^2}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \int \frac{\varphi_i^*(i)\chi_{s_i}^*(\sigma_i)\varphi_j^*(j)\chi_{s_j}^*(\sigma_j)\varphi_i(i)\chi_{s_i}(\sigma_i)\varphi_j(j)\chi_{s_j}(\sigma_j)}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} d^3 \bar{r}_i d^3 \bar{r}_j \\
 &- \frac{e^2}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \int \frac{\varphi_j^*(i)\chi_{s_j}^*(\sigma_i)\varphi_i^*(j)\chi_{s_i}^*(\sigma_j)\varphi_i(i)\chi_{s_i}(\sigma_i)\varphi_j(j)\chi_{s_j}(\sigma_j)}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} d^3 \bar{r}_i d^3 \bar{r}_j
 \end{aligned}$$

der Term $-\frac{e^2}{2}$ tritt bei Hartree nicht auf, hier zusätzlich, da ungerade Permutationen explizit eingeschlossen sind; gilt [term starting with \$-\frac{e^2}{2}\$ did not occur in the derivation of the Hartree equation, it results from the inclusion of odd permutations in the wave function; exploit](#)

$$\sum_{\sigma} \chi_{s_i}^*(\sigma)\chi_{s_j}(\sigma) = \delta_{s_i s_j}$$

⇒ Spinsummen in 1. und 2. Zeile entfallen; 3. Zeile: [summation over spins in 1st and 2nd term leads to multiplication with 1, in the 3rd term it results in:](#)

$$\sum_{\sigma_i, \sigma_j} \chi_{s_j}^*(\sigma_i)\chi_{s_i}^*(\sigma_j)\chi_{s_i}(\sigma_i)\chi_{s_j}(\sigma_j)$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\sigma_j} \left(\underbrace{\sum_{\sigma_i} \chi_{s_j}^*(\sigma_i) \chi_{s_i}(\sigma_i)}_{\delta_{s_i s_j}} \right) \chi_{s_i}^*(\sigma_j) \chi_{s_j}(\sigma_j) \\
 &= \sum_{\sigma_j} \delta_{s_i s_j} \chi_{s_i}^*(\sigma_j) \chi_{s_j}(\sigma_j) = \delta_{s_i s_j}
 \end{aligned}$$

= 1 (e_i^- und e_j^- haben gleichen Spin **have same spin**)

oder 0 (e_i^- und e_j^- haben untersch. Spin **have different spin**)

damit **altogether**

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle &= \sum_i \int \varphi_i^*(i) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + V(i) \right\} \varphi_i(i) d^3 \bar{r}_i \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \int \varphi_i^*(i) \varphi_j^*(j) \frac{e^2}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} \varphi_i(i) \varphi_j(j) d^3 \bar{r}_j d^3 \bar{r}_i \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \delta_{s_i s_j} \int \frac{\varphi_j^*(i) \varphi_i^*(j) e^2 \varphi_i(i) \varphi_j(j)}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} d^3 \bar{r}_i d^3 \bar{r}_j
 \end{aligned}$$

Summand 1 + 2: analog Hartree; Summand 3: Austauschern, neu bei HF **first and second term already known from the Hartree method, the third term is new, it is the so-called exchange term, characteristic for HF**

Bem.: Austauschterm hat neg. Vorzeichen \Rightarrow verringert die Energie im Vergleich zur Hartree-Näherung \Rightarrow HF bessere Approximation **Note: The exchange term has a negative sign, therefore it lowers the total energy in comparison to the Hartree method, that means HF is superior to the Hartree method, as expected**

Gehen jetzt weiter analog wie bei Hartree vor, minimieren $\langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle$ bezüglich der Einteilchenorbitale mit der Nebenbedingung der φ_i normiert auf 1 **Proceed further in analogy to the derivation of the Hartree equation, minimize $\langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle$ with respect to the single-particle orbitals under the constraint that the latter are normalized to 1**

\Rightarrow Minimierungsproblem für Funktional **Optimization problem for the functional below**

$$F[\varphi_j] = \left\{ \langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle - \sum_{k=1}^N \epsilon_k \langle \varphi_k | \varphi_k \rangle \right\} \quad (7.56)$$

$\frac{\delta F}{\delta \varphi_j^*} \stackrel{!}{=} 0$ führt auf Hartree-Fock-Gleichung [leads to Hartree-Fock Equation](#)

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\bar{r}) + e^2 \int \frac{n(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} d^3 \bar{r}' \right\}}_{\text{analog Hartree-Näherung same as in Hartree}} \varphi_j(\bar{r}) \\
 & - e^2 \underbrace{\sum_k \delta_{s_k s_j} \int \frac{\varphi_k^*(\bar{r}') \varphi_j(\bar{r}') \varphi_k^*(\bar{r})}{|\bar{r} - \bar{r}'|} d^3 \bar{r}'}_{V_x(j)(\bar{r}) \varphi_j(\bar{r}) \dots \text{orbital-abhängiges Austauschpot. orbital dependent exchange potential}} = \epsilon_j \varphi_j(\bar{r})
 \end{aligned} \tag{7.57}$$

Bem.: $V_x^{(j)}$ ist für jedes Teilchen unterschiedlich, beschreibt WW vom j-ten Teilchen mit anderen Elektronen gleicher Spinorientierung $s_j = s_k$

Verursacht, daß sich e^- gleichen Spins nicht beliebig nahe kommen können, d.h., daß zwei Elektronen nie in Orts- und Spinkoordinaten übereinstimmen.

- ⇒ stellt Pauli-Prinzip sicher!
- ⇒ wesentliche Verbesserung gegenüber Hartree!

Problem: Coulombabstoßung für kleine Abstände beliebig groß ⇒ auch Elektronen unterschiedlichen Spins weichen sich aus (sogennante Korrelation der Bewegung) Diese Korrelationseffekte sind in HF nicht enthalten (und bilden ein wesentliches Arbeitsgebiet der Quantenchemie sowie meiner Arbeitsgruppe).

Note: $V_x^{(j)}$ acts differently on different particles, describes interaction of jth electron with other electrons of same spin orientation $s_j = s_k$

This potential ensures that electrons of the same spin avoid each other, i.e., it ensures the no two electrons have the same spin and position coordinates.

- ⇒ enforces Pauli principle!
- ⇒ substantial improvement over Hartree!

Remaining problem: Coulomb repulsion is strong for short range ⇒ also electrons of different spin tend to avoid each other

The treatment of these so-called correlation effects is what a large part of quantum chemistry is about!

7.5 Besetzungszahlformalismus Occupation number representation

Wesentliche Motivation für Einführung der QM war die Quanten- bzw. Teilcheneigenschaft von Licht, z.B.

- Compton-Effekt
- photoelektrischer Effekt
- schwarzer Strahler

Tatsächlich behandelt wird aber im wesentlichen der Wellencharakter der Teilchen, d.h. die Schrödingergleichung.

In the introduction to elementary quantum mechanics, much of the experimental evidence presented concerns the quantum (or particle) nature of light (Compton effect, photoelectric effect, infrared catastrophe, etc.), yet the wave nature of particles and the Schrödinger equation dominate most considerations from then on.

Im folgenden entwickeln wir einen Formalismus zur Behandlung des Teilchencharakters der Wellen (sogenannte 2. Quantisierung). In this chapter we will look at the particle nature of waves and begin the development of a unified approach to fields and particles suitable for most applications but especially to condensed matter, where many of the interesting effects concern oscillatory phenomena.

Exp. Beispiele:

	Welle	Elementaranregung
• Atome im FK	Schwingungen	Phonon
• e^- im FK	Plasmawellen	Plasmon
• mag. Dipole im FK	Spinwellen	Magnon
• Atome in Flüssigkeit	Wirbel (^4He)	Roton
• em. Feld	em. Welle	Photon

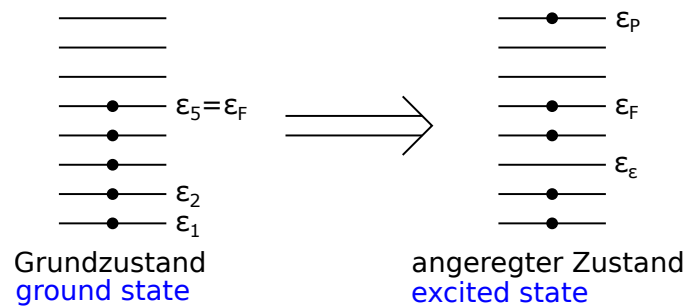
The table below shows a range of examples of waves where the quantum of energy and momentum (or elementary excitation) is known.

	Wave	Elementary excitation
• Atoms in solids	Vibrations (sound waves)	Phonon
• e^- in solids	Plasma waves	Plasmon
• Mag. dipoles in a solid	Spin waves	Magnon
• Atoms in liquids	Eddies (^4He)	Roton
• Electromag. field	Electromag. wave	Photon

Betrachten System mit Potential $U(r)$ mit Eigenzuständen $\Phi_k(r)$ und Energien ϵ_k
 Consider system characterized by potential $U(r)$ with eigenstates $\Phi_k(r)$ and eigenenergies ϵ_k

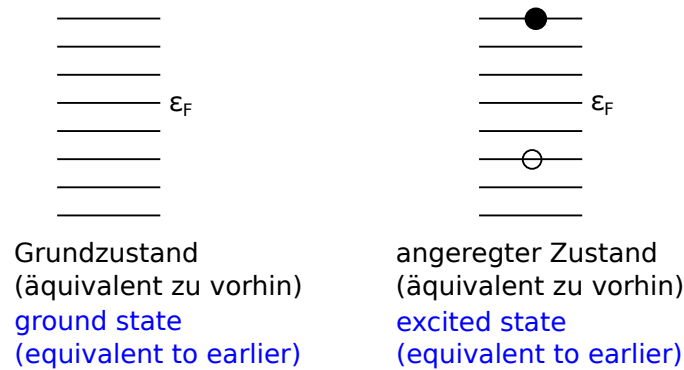
füllen System mit N Teilchen auf (betrachten im Moment keine WW zwischen den Teilchen) fill the system with N particles (assume for the moment no interaction between the particles)

Bei Fermionen erzwingt das Pauli-Prinzip eine Verteilung im Grundzustand mit je einem e^- auf einem Niveau: The Pauli principles enforces a ground state distribution with one electron per level in case of Fermions:



Die Darstellung des Systems kann vereinfacht werden, wenn wir uns auf den Grundzustand beschränken und nur Änderungen des Grundzustands verfolgen, d.h. wir...
 The representation of the system can be simplified if we restrict ourselves to pay attention only to changes to the ground state; remove Fermi sea from the picture above...

gehen in Teilchen-Loch-Bild: enter the particle-hole representation



Das Loch ist jetzt als Antiteilchen (z.B. Positron) zu verstehen, Teilchen im eigentlichen Sinne sind jetzt nun die Teilchen oberhalb der Fermi-Energie. **The hole is to be understood as an antiparticle (e.g., positron), actual particles are now the particles that are excited above the Fermi energy.**

Loch hat negative Energie **The hole has a negative energy**

$$\epsilon_K^{\text{hole}} = -\epsilon_K \quad (7.58)$$

(Loch will aufsteigen, Teilchen absteigen **The hole gains energy by moving up, the particle releases energy by moving down**)

⇒ zeitabhängige Wellenfunktion des Lochs **time-dependent antiparticle wave function**

$$\psi_+^{\text{hole}} = \varphi_K e^{-i(-\epsilon_K)t/\hbar} \quad \epsilon_K < \epsilon_F \quad (7.59)$$

$$= \varphi_K e^{i\epsilon_K t/\hbar} \quad (7.60)$$

D.h. Loch im Teilchen-Loch-Bild kann interpretiert werden als ein Teilchen, das in der Zeit rückwärts läuft. **The hole may be understood as a particle that moves back in time in the particle-hole representation.**

Gesamtwellenfunktion nicht wechselwirkender Teilchen ist das Produkt der Einteilchenwellenfunktionen, bei identischen Fermionen muß sie jedoch antisymmetrisch werden. **The many-body wave function of non-interacting particles may be written as product of the single-particle orbitals. In case of Fermions, however, it needs to be antisymmetric.**

→ Slater-Determinante **Slater determinant**

$$\Phi_{K_1, \dots, K_n}(r_1, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{K_1}(r_1) & \dots & \varphi_{K_1}(r_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{K_N}(r_1) & \dots & \varphi_{K_N}(r_N) \end{vmatrix} \quad (7.61)$$

Bem: Im Falle von WW der Teilchen untereinander können die korrekten Vielteilchenwellenfunktionen als Linearkombination von Slaterdeterminanten dargestellt werden. *In the case that the particles interact the correct many-body wave function may be written as linear combination of Slater determinants.*

Vereinfachen die Notation, indem wir nur die Besetzung der Einteilchenorbitale berücksichtigen *Simplify the notation by restricting ourselves to the occupation of the single-particle orbitals*

$$\Phi_{K_1, \dots, K_N}(r_1, \dots, r_N) \rightarrow |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (7.62)$$

mit $n_i = 0$ oder 1 (Pauli-Prinzip) *where $n_i = 0$ or 1 (Pauli principle). This is called "occupation number notation" and reminds us of the shell notation for atoms, e.g., $(1s)^2(2s)^2(2p)^1$.*

Damit angeregter Zustand von vorhin *The excited state discussed previously is thus given as*

$$|1_1, 1_2, 0_3, 1_4, 1_5, 0_6, 0_7, 1_8, \dots\rangle \quad (7.63)$$

Gehen jetzt wieder ins Teilchen-Loch-Bild und halten nur Änderungen vom Grundzustand fest. *Now in most cases of interest the systems are weakly excited, i.e., only a few of the particles change their position from that in the ground state. Move again to the particle-hole representation, note only the changes to the ground state.*

$$\Phi_0 = |0\rangle \quad \dots \quad \text{Grundzustand, Fermi-Vakuum} \quad \text{Ground state, Fermi vacuum} \quad (7.64)$$

Der angeregte Zustand ist dann *The excited state is then given as*

$$\Phi = |1_3^h, 1_8^p\rangle. \quad (7.65)$$

\nearrow
 Loch auf Niveau *hole in level 3*

\nwarrow
 Teilchen auf Niveau *particle in level 8*

In dieser Notation sehen auch die Operatoren anders aus, z.B. *Also the operators are affected by this change in presentation, consider for example*

$$\Phi_{\text{initial}} = |1_1, 0_2, 0_3, \dots\rangle \quad (7.66)$$

\downarrow - Störoperator *perturbation $V(r,p)$*

$$\Phi_{\text{final}} = |0_1, 0_2, 1_3, 0_4, \dots\rangle \quad (7.67)$$

D.h. die Wirkung des Störoperators entspricht der Vernichtung eines Teilchens in φ_1 und der Erzeugung eines Teilchens in φ_3 *The perturbation operator destructs or annihilates a particle in φ_1 and creates a particle in φ_3*

\Rightarrow definieren *define* \hat{c}_i ... vernichtet Teilchen in φ_i *annihilates particle in φ_i*
 \hat{c}_i^+ ... erzeugt Teilchen in φ_i *creates particle in φ_i*

und können durch geeignete Kombinationen der \hat{c}, \hat{c}^+ alle Operatoren ausdrücken
 may express all operators by suitable combinations of these \hat{c}, \hat{c}^+

Bem: Note: Im Prinzip nichts neues, bekannt vom harmonischen Oszillator re-
 minds us of creation and annihilation operators of the harmonic oscillator

7.6 Feldoperatoren Field Operators

Um Antisymmetrie der WF bei Vertauschung zweier Fermionen zu gewährleisten,
 definieren wir In order to enforce antisymmetric wave functions for fermions we
 define

$$\hat{c}_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i (1 - n_i)} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (7.68)$$

$$\hat{c}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (7.69)$$

mit where $\sum_i = n_1 + n_2 + \dots + n_{i-1}$

Beispiele: Examples

$$\hat{c}_i |\dots, 0_i, \dots\rangle = 0 \quad (7.70)$$

$$\hat{c}_i^+ |\dots, 1_i, \dots\rangle = 0 \quad (7.71)$$

$$\hat{c}_3 |1111100\dots\rangle = |1101100\dots\rangle \quad (7.72)$$

$$\hat{c}_4^+ |11110100\dots\rangle = -|1111100\dots\rangle \quad (7.73)$$

$$\begin{aligned} & \hat{c}_2^+ \hat{c}_3 \hat{c}_1^+ \hat{c}_2 \hat{c}_3^+ \hat{c}_1 |1100\dots\rangle \\ &= \hat{c}_2^+ \hat{c}_3 \hat{c}_1^+ \hat{c}_2 \hat{c}_3^+ |0100\dots\rangle \\ &= \hat{c}_2^+ \hat{c}_3 \hat{c}_1^+ \hat{c}_2 (-1) |01100\dots\rangle \\ &= \hat{c}_2^+ \hat{c}_3 \hat{c}_1^+ (-1) |001000\dots\rangle \\ &= \hat{c}_2^+ \hat{c}_3 (-1) |1010\dots\rangle \\ &= \hat{c}_2^+ |1000\dots\rangle \\ &= - |1100\dots\rangle \quad (\text{Teilchenaustausch particle exchange}) \end{aligned} \quad (7.74)$$

Bem.: Note: • können alle Zustände aus dem Vakuumzustand generieren:
 may generate all states from the vacuum state

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (\hat{c}_1^+)^{n_1} (\hat{c}_2^+)^{n_2} \dots |0, 0, \dots\rangle \quad (7.75)$$

- \hat{c}_i^+ hermitesch konjugiert zu c_i , klar nach \hat{c}_i^+ hermitian adjoint to c_i , see below

$$\langle \dots, \tilde{n}_i, \dots | \hat{c}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \begin{cases} 1 & \tilde{n}_i = 0 \wedge n_i = 1 \\ 0 & \text{sonst otherwise} \end{cases} \quad (7.76)$$

$$\langle \dots, \tilde{n}_i, \dots | \hat{c}_i^+ | \dots, n_i, \dots \rangle = \begin{cases} 1 & \tilde{n}_i = 1 \wedge n_i = 0 \\ 0 & \text{sonst otherwise} \end{cases} \quad (7.77)$$

$$\Rightarrow \hat{c}_i^+ = (\hat{c}_i)^+ \quad (7.78)$$

herm. conj. hermitian conjugate

d.h. aber auch, daß \hat{c}_i und \hat{c}_i^+ nicht selbstadjungiert sind, d.h. keine Observablen darstellen. this means at the same time, however, that \hat{c}_i and \hat{c}_i^+ are not self-adjoint, i.e., they do not correspond to observables

Können hermiteschen Operator aus \hat{c}_i, \hat{c}_i^+ konstruieren: may, however, construct hermitian operator from \hat{c}_i, \hat{c}_i^+ :

$$\hat{n}_i = \hat{c}_i^+ \hat{c}_i = (\hat{c}_i^+ \hat{c}_i)^+ = \hat{n}_i^+ \quad (7.79)$$

Eigenschaften von Properties of \hat{n}_i :

$$\hat{c}_i^+ \hat{c}_i |n_1, n_2, \dots, 1_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i} \hat{c}_i^+ | \dots, 0_i, \dots \rangle \quad (7.80)$$

$$= (-1)^{\sum_i + \sum_i} | \dots, 1_i, \dots \rangle \quad (7.81)$$

$$= |n_1, n_2, \dots, 1_i, \dots\rangle \quad (7.82)$$

$$\hat{c}_i^+ \hat{c}_i |n_1, n_2, \dots, 0_i, \dots\rangle = 0 |n_1, n_2, \dots, 0_i, \dots\rangle \quad (7.83)$$

$$\Rightarrow \hat{c}_i^+ \hat{c}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (7.84)$$

legt die Bezeichnungen suggests the following notation

$$\hat{n}_i = \hat{c}_i^+ \hat{c}_i \dots \quad \text{Anzahloperator} \quad (7.85)$$

number operator

$$\hat{N} = \sum_i \hat{c}_i^+ \hat{c}_i \dots \quad \text{Gesamtanzahloperator} \quad (7.86)$$

total number operator

nahe.

\hat{c}_i^+, \hat{c}_i genügen **satisfy**

Fermionischen Vertauschungsrelationen

Fermion commutation relations

$$\bullet [\hat{c}_l, \hat{c}_k^+]_+ = \hat{c}_l \hat{c}_k^+ + \hat{c}_k^+ \hat{c}_l = \delta_{lk} \quad (7.87)$$

$$\bullet [\hat{c}_l, \hat{c}_k]_+ = 0 \quad (7.88)$$

$$\bullet [\hat{c}_l^+, \hat{c}_k^+]_+ = 0 \quad (7.89)$$

Beweis: Proof: folgt aus Definition **clear from definition**

Bem.: Note: Definition ist so gewählt, daß Symmetrieeigenschaften der Vielteilchenwellenfunktion für Fermionen korrekt sind, d.h. antisymmetrisch bez. Teilchenaustausch. Können auch Bosonische Vertauschungsrelationen (Kommutator statt Antikommutator) durch geeignete Def. erhalten, Formalismus dann z.B. für Phononen anwendbar. **Definition above is chosen in such a way as to assert the correct symmetry for the Fermionic many-body wave function. May start as well from Bosonic commutation relations and apply the formalism, e.g., to photons.**

Darstellung eines allg. Operators $\hat{O}(r, p)$ representation of a general operator $\hat{O}(r, p)$

Matrixelemente müssen in beiden Bildern gleich sein, d.h. fordern **Matrix elements do not depend on the specific representation, i.e., may require**

$$O_{ij} = \int dr \varphi_i^*(r) \hat{O} \varphi_j(r) \stackrel{!}{=} \langle 0, 0, \dots, 1_i, \dots | \hat{O}^{OCC} | \dots 1_j \dots \rangle \quad (7.90)$$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{O}^{OCC} = \sum_{kl} O_{kl} \hat{c}_k^+ \hat{c}_l} \quad \begin{array}{l} \uparrow \\ \text{Operator in} \\ \text{Besetzungs-} \\ \text{zahldarstellung} \\ \text{operator in occ.} \\ \text{number repr.} \end{array} \quad (7.91)$$

Beweis: Proof:

$$\langle 0, 0, \dots, 1_i, \dots | \hat{O}^{OCC} | 0, 0, \dots, 1_j, \dots \rangle \quad (7.92)$$

$$= \sum_{kl} O_{kl} \langle 0, 0, \dots, 1_i, \dots | \hat{c}_k^+ \hat{c}_l | 0, 0, \dots, 1_j, \dots \rangle \quad (7.93)$$

$$= \sum_{kl} O_{kl} \delta_{lj} \delta_{ik} = O_{ij} \quad (7.94)$$

Bem.: Note: In analoger Weise lassen sich Ausdrücke für Vielteilchenoperatoren finden, z.B. **In a similar manner expressions for many-body operators maybe found, e.g.,**

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \hat{O}(r_i, p_i; r_j, p_j) \quad (7.95)$$

$$\hat{O}^{OCC} = \frac{1}{2} \sum_{klmn} O_{klmn} \hat{c}_l^+ \hat{c}_k^+ \hat{c}_m \hat{c}_n \quad (7.96)$$

mit **where** $O_{klmn} = \int dr \int dr' \varphi_k^*(r) \varphi_l^*(r') O(r, r'; p, p') \varphi_m(r) \varphi_n(r')$ (7.97)

Bsp: Examples: Hamiltonoperator der Form [Hamiltonian operator](#)

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + U(r_i)}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i,j} V(r_i - r_j)}_{H_1} + \underbrace{\sum_i V(r_i, p_i)}_{H_2} \quad (7.98)$$

$$\hat{H}_0^{OCC} = \sum_{k,l} \underbrace{\langle \varphi_k | \frac{p^2}{2m} + U(r) | \varphi_l \rangle}_{\epsilon_l \delta_{kl} \text{ falls } \varphi_i \text{ EV von } H_0} \hat{c}_k^+ \hat{c}_l \quad (7.99)$$

$$\hat{H}_1^{OCC} = \frac{1}{2} \sum_{klmn} V_{klmn} \hat{c}_l^+ \hat{c}_k^+ \hat{c}_m \hat{c}_n \quad (7.100)$$

mit [where](#) $V_{klmn} = \int dr \int dr' \varphi_k^*(r) \varphi_l^*(r') V(r - r') \varphi_m(r) \varphi_n(r')$ (7.101)

$$\hat{H}_2^{OCC} = \sum_{kl} V_{kl} \hat{c}_k^+ \hat{c}_l \quad (7.102)$$

mit [where](#) $V_{kl} = \int dr \varphi_k^*(r) V(r, p) \varphi_l(r)$ (7.103)

$$\Rightarrow H = \sum_k \epsilon_k \hat{c}_k^+ \hat{c}_k + \frac{1}{2} \sum_{klmn} V_{klmn} \hat{c}_l^+ \hat{c}_k^+ \hat{c}_m \hat{c}_n + \sum_{kl} V_{kl} \hat{c}_k^+ \hat{c}_l \quad (7.104)$$

Zeitabhängigkeit: [Time dependence](#)

Besetzungszahlformalismus kann sowohl im Schrödinger- als auch im Heisenbergbild verwendet werden. Konzeptuell einfacher ist oft das Heisenbergbild. Dann haben wir ein Maximum an Information aus den Zuständen entfernt und in die Operatoren gesteckt. Diese können dann die gesamte Physik vor dem Hintergrund des zeitlich konstanten Vakuumzustands beschreiben. [Occupation number formalism may be applied both within the Schrödinger as well as the Heisenberg picture. Conceptually, the latter is often more helpful. Then a maximum of information has been extracted from the states and put into the operators. These describe then the evolution of physics in front of the background consisting of the time-independent vacuum states.](#)

Im Heisenbergbild gilt [In the Heisenber picture it holds](#)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_m = [\hat{H}, \hat{c}_m] \quad (7.105)$$

mit [where](#) $\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{c}_k^+ \hat{c}_k$ (Einteilchen-Hamilton-Operatoren von vorhin [Single-particle Hamiltonian from above](#))

folgt it follows

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_m = \sum_k \epsilon_k (\hat{c}_k^+ \underbrace{\hat{c}_k \hat{c}_m}_{-\hat{c}_m \hat{c}_k} - \hat{c}_m \hat{c}_k^+ \hat{c}_k) \quad (7.106)$$

$$= - \sum_k \epsilon_k (\underbrace{\hat{c}_k^+ \hat{c}_m}_{\delta_{km} - \hat{c}_m \hat{c}_k^+} \hat{c}_k + \hat{c}_m \hat{c}_k^+ \hat{c}_k) \quad (7.107)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_m = - \sum_k \epsilon_k \delta_{km} \hat{c}_k = -\epsilon_m \hat{c}_m \quad (7.108)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{c}_m(t) = \hat{c}_m(0) e^{-i\epsilon_m t/\hbar} & (7.109) \\ \hat{c}_m^+(t) = \hat{c}_m^+(0) e^{i\epsilon_m t/\hbar} & (7.110) \end{cases}$$

(für Einteilchenhamiltonoperator
for single-particle Hamiltonian)

Damit Zeitabhängigkeit allgemeiner Operatoren Time dependence of general operators thus given as

$$\begin{aligned} \hat{O}_H^{OCC}(t) &= \sum_{kl} O_{kl} \hat{c}_k^+(t) \hat{c}_l(t) \\ &= \sum_{kl} O_{kl} \hat{c}_k^+(0) e^{i\epsilon_k t/\hbar} \hat{c}_l(0) e^{-i\epsilon_l t/\hbar} \\ &= \sum_{kl} O_{kl} \hat{c}_k^+(0) \hat{c}_l(0) e^{i(\epsilon_k - \epsilon_l)t/\hbar} \end{aligned} \quad (7.111)$$

usw. and so forth

Problem: Durch die Einführung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist die räumliche Interpretation der QM etwas verloren gegangen. Although creation and annihilation operators are, in some ways, excellent reformulations of quantum mechanics, they do suffer from the drawback of being defined in terms of eigenstates and so do not have a spatial interpretation. What is required is a form of creation and annihilation operators which will conserve the features of the occupation number representation yet allow the spatial development of the system to shown explicitly. The solution to this problem is the definition of a new operator, the field operator.

Definieren [Define](#)

Feldoperatoren [field operators](#)

$$\hat{\psi}(r, t) = \sum_m \varphi_m(r) \hat{c}_m(t) \quad (7.112)$$

$$\hat{\psi}^+(r, t) = \sum_m \varphi_m^*(r) \hat{c}_m^\dagger(t) \quad (7.113)$$

$\hat{\psi}^+(r, t)$ erzeugt Teilchen bei [creates particle at](#) r , $\hat{\psi}(r, t)$ vernichtet Teilchen bei [annihilates particle at](#), r jeweils mit Wahrscheinlichkeit gewichtet durch die ortsabhängigen φ_m [with probability where the position dependent](#) φ_m [weight the various creation and annihilation operators](#),

Eigenschaften [properties](#)

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(r, t), \hat{\psi}^+(r', t)]_+ &= \sum_{kl} \varphi_k(r) \varphi_l^*(r') \underbrace{[\hat{c}_k \hat{c}_l^\dagger + \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_k]}_{\delta_{kl}} \\ &= \sum_{kl} \varphi_k(r) \varphi_l^*(r') \delta_{kl} \\ &= \sum_k \varphi_k(r) \varphi_k^*(r') \\ &= \delta(r - r') \end{aligned} \quad (7.114)$$

Vollständigkeit [completeness](#) ↗

analog [similarly](#)

$$[\hat{\psi}(r, t), \hat{\psi}(r', t)]_+ = 0 \quad (7.115)$$

$$[\hat{\psi}^+(r, t), \hat{\psi}^+(r', t)]_+ = 0 \quad (7.116)$$

Operatoren in Feldoperatoren ausdrücken [Express operators in terms of field operators](#)

$$\hat{O}(t) = \int dr \hat{\psi}^+(r, t) \hat{O}_S(r) \hat{\psi}(r, t) \quad (7.117)$$

↖ Schrödingerbild

Beweis: Proof:

$$\begin{aligned} \int dr \hat{\psi}^+(r, t) \hat{O}_S(r) \hat{\psi}(r, t) &= \sum_{lm} \left(\int dr \varphi_l^*(r) \hat{O}(r) \varphi_m(r) \right) \hat{c}_l^+(t) \hat{c}_m(t) \\ &= \sum_{lm} O_{lm} \hat{c}_l^+(t) \hat{c}_m(t) \end{aligned} \quad (7.118)$$

Bem: Note: Insbesondere gilt **In particular it holds**

$$\hat{H}(t) = \int dr \hat{\psi}^+(r, t) \hat{H}(r) \hat{\psi}(r, t) \quad (7.119)$$

Bewegungsgleichung der Feldoperatoren **Equation of motion**

$\hat{=}$ Heisenberg'sche Bewegungsgleichung **Like any other operator, the field operator must satisfy the Heisenberg equation of motion**

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{\psi}(r, t)}{\partial t} &= [\hat{H}, \hat{\psi}(r, t)] \\ &= \int dr' [\hat{\psi}^+(r', t) \hat{H}(r') \overbrace{\hat{\psi}(r', t) \hat{\psi}(r, t)}^{-\hat{\psi}(r, t) \hat{\psi}(r', t)} - \hat{\psi}(r, t) \hat{\psi}^+(r', t) \hat{H}(r') \hat{\psi}(r', t)] \\ &= - \int dr' [\hat{\psi}^+(r', t) \hat{H}(r') \hat{\psi}(r, t) \hat{\psi}(r', t) + \hat{\psi}(r, t) \hat{\psi}^+(r', t) \hat{H}(r') \hat{\psi}(r', t)] \\ &= - \int dr' \underbrace{[\hat{\psi}^+(r', t) \hat{\psi}(r, t) + \hat{\psi}(r, t) \hat{\psi}^+(r', t)]}_{\delta(r-r')} \hat{H}(r') \hat{\psi}(r', t) \\ &= - \hat{H}(r) \hat{\psi}(r, t) \end{aligned} \quad (7.120)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(r, t) = \hat{H}(r) \hat{\psi}(r, t)} \quad (7.121)$$

D.h. Feldoperator genügt der Schrödingergleichung, erinnert damit an Schrödingerwellenfunktion, aber ist ein Operator, der im Bild des Besetzungszahlenformalismus wirkt. Großer Vorteil im Vergleich zur "gewöhnlichen" Wellenfunktionen ist, daß die Statistik des Systems über die Kommutatorbeziehungen bereits im Feldoperator korrekt enthalten ist. Hier Fermionenstatistik, aber für Bosonen läßt sich der Formalismus ähnlich darstellen. **Thus, the field operator satisfies Schrödinger's equation but acts upon the occupation number representation. This is obviously an important development. Let us consider the implications further. Since the vacuum state is an arbitrary framework and is not used explicitly, it means that all**

of the spatial and time dependence of the system now resides in the field operator whose equation of motion is the Schrödinger equation. In fact, we have come full circle, in a sense, because the field operator in many respects appears to be the Schrödinger wave function interpreted as an operator. The fact that it is an operator which acts in the occupation number representation is, however, of vital importance. The Schrödinger wave functions do not, for instance, include the statistics of the system inherent in the commutator relations. Furthermore, from the form of the field operator, its action upon a system is to add or to subtract a particle to it. In case of interacting systems this is important because by studying how the system reacts to that extra particle a great deal may be learned about it.

Bemerkungen: remarks:

- Feldoperatoren lassen sich auch axiomatisch aus Lagrangedichte des jeweiligen Feldes + Vertauschungsrelationen der quantisierten Normalkoordinaten und kanonisch konjugierten Impulse ableiten. Field operators may be axiomatic introduced based on the Lagrange density and the commutator relations of the quantized normal coordinates and conjugate momentum variables.
- Implikationen der Fermionischen Vertauschungrelationen Implications of Fermion commutation relations

$$\begin{aligned} [\hat{c}_l, \hat{c}_k^+]_+ &= \delta_{lk} \\ [\hat{c}_l, \hat{c}_k]_+ &= [\hat{c}_l^+, \hat{c}_k^+]_+ = 0 \end{aligned}$$

für Anzahloperator? for number operator?

$$\hat{n}_i = \hat{c}_i^+ \hat{c}_i$$

betrachten consider

$$\hat{n}_i^2 = \hat{c}_i^+ \underbrace{\hat{c}_i \hat{c}_i^+}_{1 - \hat{c}_i^+ \hat{c}_i} \hat{c}_i = \hat{c}_i^+ \hat{c}_i - \underbrace{(\hat{c}_i^+)^2}_{=0} \underbrace{(\hat{c}_i)^2}_{=0} = \hat{n}_i.$$

D.h. That is

$$\begin{aligned} \hat{n}_i^2 | \rangle &= n_i n_i | \rangle = n_i^2 | \rangle \\ \parallel \\ \hat{n}_i | \rangle &= n_i | \rangle \\ \Rightarrow n_i^2 &= n_i \Rightarrow n_i \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

Pauli-Prinzip Pauli exclusion principle: Two or more identical fermions cannot occupy the same quantum state within a quantum system simultaneously.

- Physikalische Bedeutung der Feldoperatoren? **Physical meaning of field operators?**

$$\hat{\psi}(r, t) := \sum_m \phi_m(r) \hat{c}_m(t)$$

$$\hat{\psi}^+(r, t) := \sum_m \phi_m^*(r) \hat{c}_m^+(t)$$

mit **with** $\psi_m(r)$... Einteilchenwellenfunktion **single-particle state**
 \hat{c}_m ... vernichtet Teilchen im ψ_m **annihilates particle in ψ_m**
 \hat{c}_m^+ ... erzeugt Teilchen im ψ_m **creates particle in ψ_m**

In der Quantenmechanik hat $\psi(r)$ keine unmittelbare physikalische Bedeutung, sondern nur $|\psi|^2$. Hier ähnlich, $\hat{\psi}^+, \hat{\psi}$ sind nicht hermitesch, d.h. keine Observablen. **No immediate physical meaning of $\psi(r)$, in contrast to $|\psi|^2$. Here similar, $\hat{\psi}^+, \hat{\psi}$ are no observables.**

$$\int dr \hat{\psi}^+(r) \hat{\psi}(r)$$

$$= \sum_{m,n} \underbrace{\int dr \phi_m^*(r) \phi_n(r)}_{\delta_{m,n}} \hat{c}_m^+(t) \hat{c}_n(t)$$

$$= \sum_{m,n} \delta_{m,n} \hat{c}_m^+ \hat{c}_n = \underbrace{\sum_n \hat{c}_n^+(t) \hat{c}_n(t)}_{\hat{N} \dots \text{Gesamtanzahloperator}}$$

\Rightarrow interpretieren $\phi^+(r)\phi(r) =: \hat{\rho}(r)$ als Teilchendichteoperator **Interprete $\phi^+(r)\phi(r) =: \hat{\rho}(r)$ as total number operator.**

- Wirkung eines Feldoperators? **What does the field operator do?**

Lassen Feldoperator auf Vakuum $|0\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle$ wirken **Consider action on vacuum state $|0\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle$**

$$\hat{\psi}^+(r) |0\rangle = \sum_m \phi_m^*(r) \hat{c}_m^+ |0\rangle$$

$$= \sum_m \phi_m^*(r) |0, 0, \dots, 1_m, 0, \dots\rangle$$

und gehen in Ortsdarstellung über **Change to position representation** $|\langle r' |$

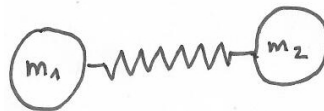
$$\begin{aligned}\langle r' | \hat{\phi}^+(r) | 0 \rangle &= \sum_m \phi_m^*(r) \underbrace{\langle r' | 0, 0, \dots, 1_m, 0, \dots \rangle}_{\phi_m(r')} \\ &= \sum_m \phi_m^*(r) \phi_m(r') \\ &= \delta(r - r') \\ &\uparrow \\ &\text{Vollst. von } \{\phi_m\} \\ &\text{completeness relation}\end{aligned}$$

\Rightarrow D.h. $\hat{\psi}^+(r)$ erzeugt ein Teilchen, das bei r lokalisiert ist. $\hat{\psi}^+(r)$ creates particle at r .

7.7 Quasiteilchen und Feynman-Diagramme Quasiparticles and Feynman diagrams

Oft ist es zielführend ein System stark wechselwirkender Teilchen in ein System schwach wechselwirkender oder entkoppelter fiktiver Teilchen zu überführen. Many-body systems often behave as if the bodies of which they are composed hardly interact at all.

Einfaches Beispiel: Simple example: Zwei Massen mit Feder verbunden Two masses held together by spring



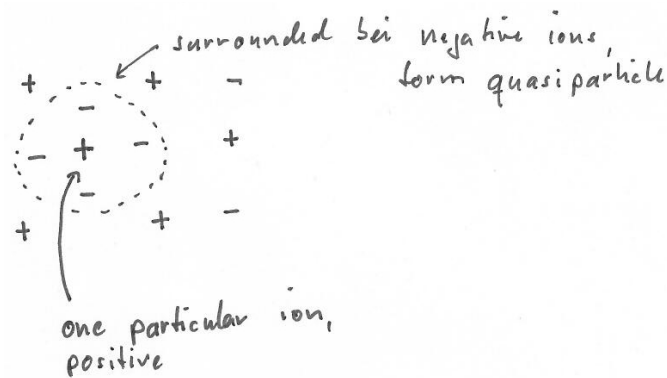
Die Massen vollführen im Gravitationsfeld beliebig komplizierte Bewegungen. Diese können aufgespalten werden in Schwerpunktsbewegung + Bewegung um den Schwerpunkt. D.h. wir haben die reale Bewegung realer Körper m_1 und m_2 transformiert in eine fiktive Bewegung eines "Schwerpunktskörpers" mit $m_1 + m_2$ und eines "Körpers mit reduzierter Masse" $m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$

If this contraption is tossed up in a gravitational field, the motion of each body considered separately is very complicated because of the interaction (spring force) between the bodies. However, we can break up the complicated motion into two independent simple motions: motion of the centre of mass and motion about the centre of mass. The centre of mass moves exactly as if it were an independent body of mass $m_1 + m_2$. So it is one of the non-interacting fictitious bodies here. The other fictitious body is a body of mass $m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$ – the so-called reduced mass – which moves independently relative to the centre of mass. Thus the system acts as if it were composed of two non-interacting fictitious bodies.

In der Vielteilchenphysik spricht man in diesem Zusammenhang von Quasiteilchen. Reale Teilchen in wechselwirkenden Vielteilchensystemen sind von einer Wolke von "gestörten" Nachbarpartikeln umgeben. Zusammen bilden sie das sogenannte Quasiteilchen. Die Eigenschaften des Quasiteilchens können von denen des realen Teilchens abweichen. Quasiteilchen können endliche Lebensdauer haben.

In many-body physics one speaks in this context of quasiparticles. These arise from the fact that when a real particle moves through the system, it pushes or pulls on its neighbours and thus becomes surrounded by a 'cloud' of agitated particles. The real particle plus its cloud is the quasiparticle. It should be remarked that the quasi particle is in an excited energy level of the many-body system. Hence it is referred to as an 'elementary excitation' of the system.

Beispiel: Example Elektrolyt aus positiven und negativen Ionen An electrolyte solution composed of an equal number of positive and negative ions moving about.

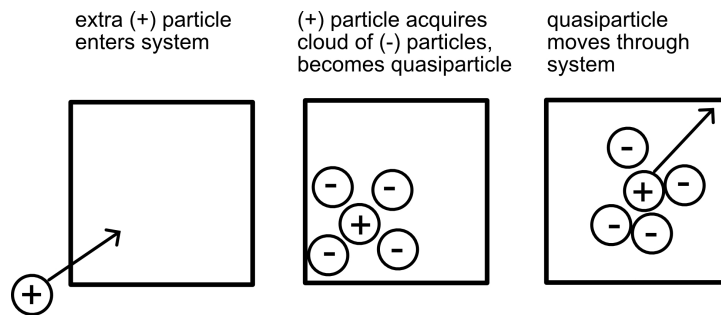


Jedes reales Teilchen bildet: **Any real particle forms simultaneously**

- (a) den 'Kern' eines Quasiteilchens und ist **the 'core' of a quasiparticle and**
- (b) 'Mitglied' einer Abschirmwolke **a transient 'member' of the cloud of several other quasiparticles**

⇒ Quasiteilchenkonzept macht nur Sinn, wenn man sich auf wenige Quasiteilchen beschränkt **Obviously the quasiparticle concept is a useful one if the number of quasiparticles remain small – there is no purpose in reducing one many-body problem to another one.**

⇒ Definieren Quasiteilchen im Rahmen eines Experiments, bei dem ein Extrateilchen zum System hinzugefügt wird und man dann die Bewegung dieses Extrateilchens im System betrachtet. **In order to concentrate attention on just a single quasiparticle at a time, it is convenient to define quasiparticles in terms of an experiment in which one adds an extra particle to the system, and observes the behaviour of this extra particle as it moves through the system.**



Irgendwann wird das Quasiteilchen durch Streuprozesse seinen Impuls ändern. **If the quasi-ion shown above has a certain momentum it will propagate undisturbed an average time before undergoing a collision with another quasi-ion which scatters it out of its momentum state.** ⇒ endliche Lebensdauer
 Hence quasiparticles have a finite lifetime.

⇒ Infolge der Abschirmwolke hat das Quasiteilchen im Vergleich zum realen Teilchen eine 'effektive' oder 'renormierte' Masse. *Because of the average coat of particles on its back, the quasiparticle may have an 'effective' or 'renormalized' mass which is different from that of the bare particle.*

⇒ Das Quasiteilchen hat auch eine andere Energie. *This implies that free quasiparticles (i.e., not in an externally applied field) have a new energy.*

$$E_{qp} = \frac{p^2}{2m^*}, E_{bare} = \frac{p^2}{2m}$$

Die Energiedifferenz *The energy difference* $E_{qp} - E_{bare} = E_{self}$ wird als 'Selbstenergie' des Quasiteilchens bezeichnet. *is called the 'self-energy' of the quasiparticle.*

The term 'self-energy' comes from the interpretation that the bare particle interacts with the many-body system, creating the cloud, and the cloud in turn reacts back on the particle, disturbing its motion. Thus the particle is, in a sense, interacting with itself via the many-body system, and changing its own energy.

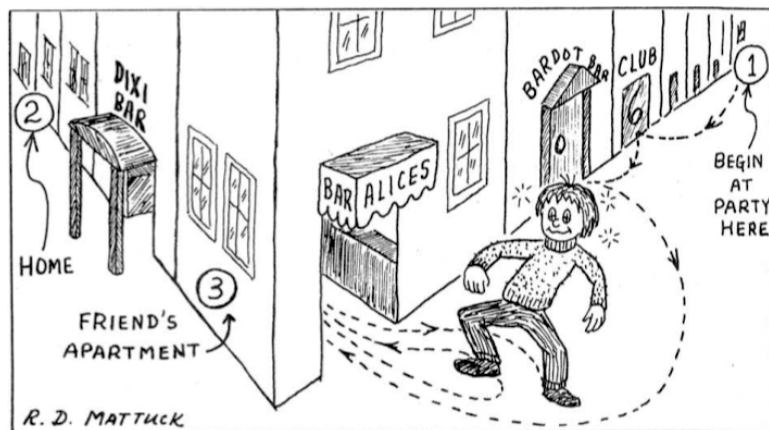
Bemerkungen: remarks:

- Effektive Massen von Elektronen in Festkörpern. Hier übernehmen die ortsfesten Ionen die Rolle der Abschirmwolke. *In a solid the positive ions form a regular periodic lattice so that electrons move in a periodic force field due to the attractive Coulomb interaction between the ions and the electron. Since the lattice is assumed fixed, there is no 'moving cloud' of lattice ions following the electron. Nevertheless, it turns out that even these stationary lattice ions are capable of 'clothing' the electron, and we find that for a perfect lattice, there is an effective mass.*
- Austausch- und Korrelationslöcher um Elektronen im Metall, das heißt im Elektronengas. *Because of the repulsive Coulomb interaction an electron in a uniform electron gas repels other electrons away from it, so we get an 'empty space' near the electron and repelled electrons further away. The empty space has positive charge charge, since the positive charge background is exposed in this region. If we now consider two electrons that are far enough apart so that their clouds do not overlap much, then we see that because of the shielding the two quasi-electrons will interact only weakly. This is why metals generally behave as if their electrons were independent: It is not real electrons but rather quasi-electrons one is looking at.*
- Quasiteilcheneigenschaften sind oft von größerem Interesse als die Eigenschaften des tatsächlichen Teilchens. *Very often quasiparticle properties are far more interesting than the properties of the bare particles.*

Einführung in Feynman-Diagramme
Introduction to Feynman diagrams

We have seen that many-body systems consisting of strongly interacting real particles can often be described as if they were composed of weakly interacting fictitious particles: quasiparticles. The question now is, how can we calculate the properties of these fictitious particles, e.g., their effective mass and lifetime? Very often Green's function or propagators – introduced earlier for the single-particle systems – are the method of choice. Propagators can be calculated by solving the chain of differential equations they satisfy. Another general, systematic and in fact picturesque way to calculate propagators is with the aid of Feynman diagrams. Just to get an idea of what these diagrams are, consider the following simple example given in the textbook by Richard Mattuck: A man who has had too much to drink (see below), leaves a party at point 1 and on the way to his home at point (2), he can stop off at one or more bars – Alice's Bar (A), Bardot Bar (B), Club Six Bar (C), ... ,etc. He can wind up either at his own home (2), or at any one of his friend's apartments, (3), (4), etc. We ask for the probability $P(2,1)$ that he gets home.

“The drunken man” (siehe Abb. unten) verläßt eine Party am Punkt (1) und will nach Hause (2). Unterwegs besteht die Möglichkeit der Einkehr in: Alice's Bar (A), Bardot Bar (B), Club Six (C). Alternative Endpunkte sind die Apartments seiner Freunde (3), (4), usw. Gesucht ist die Wahrscheinlichkeit $P(2,1)$, daß er nach Hause findet.

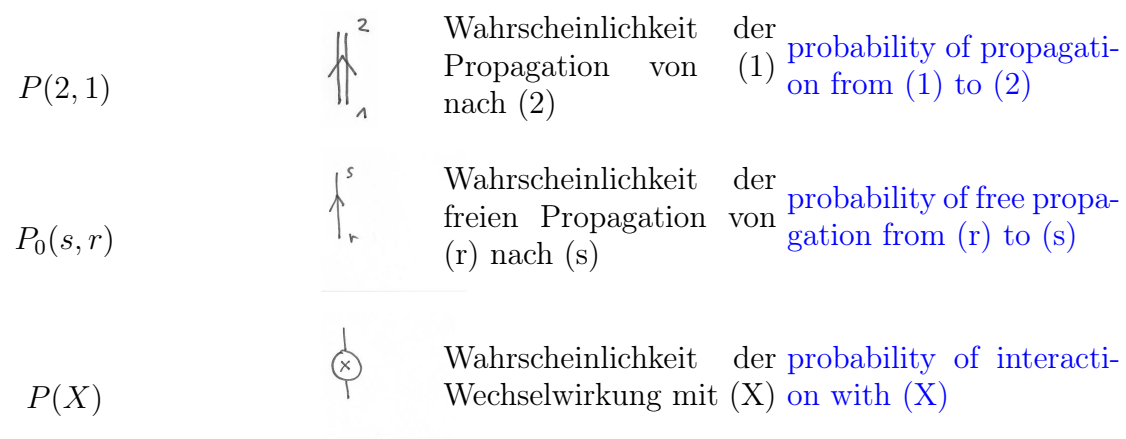


The probability $P(2,1)$ is given by the sum of the probabilities for all the different ways he can propagate from (1) to (2) interacting with various bars.

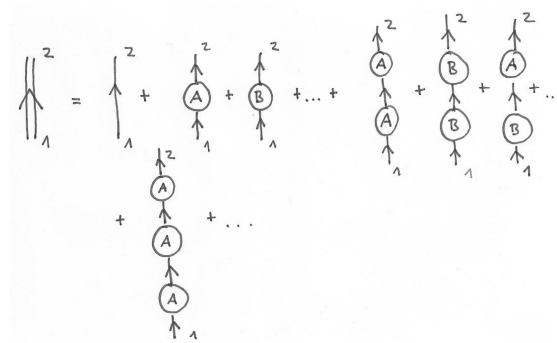
$\hat{=}$ Summe der Wahrscheinlichkeiten für alle möglichen Wege von (1) nach (2) unter Einschluß aller möglichen Wahrscheinlichkeiten mit diversen Bars.

$$\begin{aligned}
 P(2, 1) &= P_0(2, 1) \dots \text{direkter Heimweg, freie Propagation free propagation} \\
 &+ P_0(A, 1)P(A)P_0(2, 1) \dots \text{einfache Einkehr in (A) stop off at bar (A)} \\
 &+ P_0(B, 1)P(B)P_0(2, B) \dots \text{einfache Einkehr in (B) stop off at bar (B)} \\
 &+ P_0(A, 1)P(A)P_0(B, A)P(B)P_0(2, B) \\
 &\quad \dots \text{Einkehr in (A) und (B) stop off at bar (A) and (B)} \\
 &+ \dots
 \end{aligned}$$

Wir übersetzen die Reihe in eine graphische Darstellung, entsprechend der Notation unten. The expression above is an example of a 'perturbation series', since each interaction with a bar 'perturbs' the free propagation of the drunken man. To make it easier to read we use the 'picture dictionary' below and translate the series into picture form.

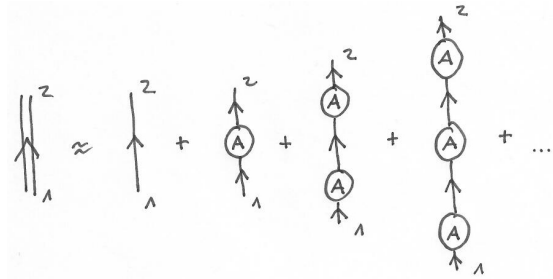


damit ergibt sich: using this dictionary the series can be drawn thus:



Die Reihe kann approximiert werden, indem man die wichtigsten Typen von Wechselwirkungen aufsummiert. Das bezeichnet man als partielle Summation. Annahme: Unser Klient hat eine besondere Affinität zu Alive's Bar, dann:

The series maybe evaluated approximately by selecting the most important types of terms in it and summing them to infinity. This is called partial summation. Suppose the man is in love with Alice, so that $P(A)$ is large, and all other $P(X)$'s are small. Then the series may be approximated by a sum over just repeated interactions with Alice's Bar:



Das entspricht: Using the above dictionary, this can be translated into functions:

$$\begin{aligned}
 P(2, 1) &\approx P_0(2, 1) + P_0(A, 1)P(A)P_0(2, A) \\
 &+ P_0(A, 1)P(A)P_0(A, A)P(A)P_0(2, A) \\
 &+ \dots \\
 \text{sei: assume: } P_0(2, 1) &= P_0(2, A) = P_0(A, 1) = P_0(A, A) \\
 &= c
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{damit: then } P(2, 1) &= c + c^2P(A) + c^3P^2(A) + \dots \\
 &= c\{1 + cP(A) + c^2P^2(A) + \dots\}.
 \end{aligned}$$

Wir wollen nun die geometrische Reihe in $cP(A)$ ausnutzen: The series in brackets is geometric and can be summed exactly

$$P(2, 1) = c \left\{ \frac{1}{1 - cP(A)} \right\} = \frac{1}{1/c - P(A)}.$$

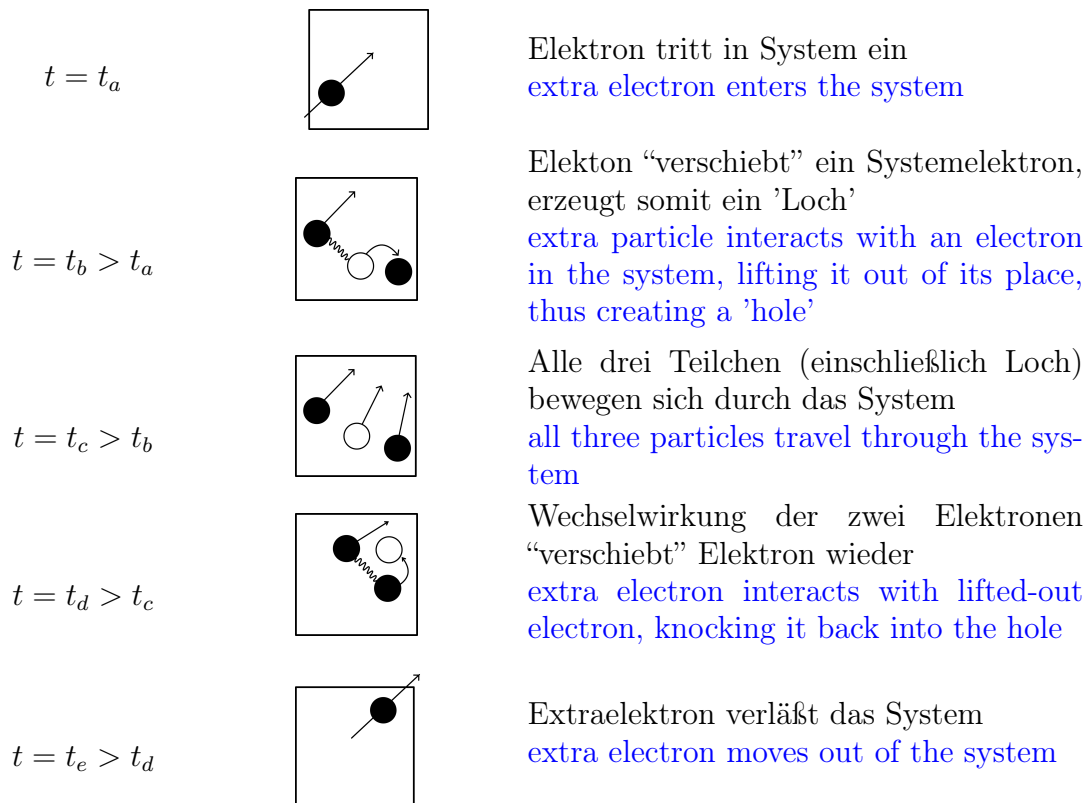
Analog dazu in der diagrammatischen Darstellung: Note that since each diagram elements stands for a factor, we could have done the calculation completely diagrammatically:

$$\begin{aligned}
 \left| \uparrow \right\rangle &\approx \left| \uparrow \right\rangle \times \left[1 + \left(\uparrow \text{ in circle } A \right) + \left(\uparrow \text{ in circle } A \right)^2 + \left(\uparrow \text{ in circle } A \right)^3 + \dots \right] \\
 &= \left| \uparrow \right\rangle \times \frac{1}{1 - \left(\uparrow \text{ in circle } A \right)} \\
 &= \frac{1}{\left| \uparrow \right\rangle^{-1} - \left(\uparrow \text{ in circle } A \right)}
 \end{aligned}$$

Bemerkung: remark

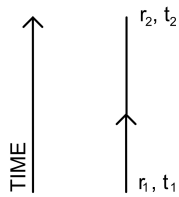
Partielle Summation ist besonders hilfreich bei starken Wechselwirkungen. [The partial summation method is extremely useful in dealing with the strong interaction between particles in the many-body system.](#)

Beispiel Elektronengas illustration for electron gas

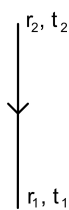


Diagrammatische Übersetzung [To represent this sequence of events diagrammatically](#)

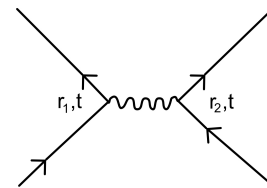
cally, let us imagine that time increases in the upward-going direction and use the following diagram elements



freier Elektronenpropagator **propagator for free propagation**
 $(r_1, t_1) \rightarrow (r_2, t_2)$

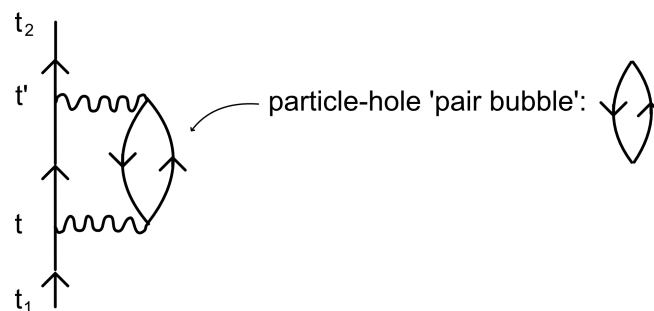



Loch \simeq Teilchen, das sich rückwärts in der Zeit bewegt **propagator for hole (electron moving backwards)**
 $(r_1, t_1) \rightarrow (r_2, t_2)$




Teilchen bei r_1 wechselwirkt mit Teilchen bei r_2 zur Zeit t **probability for a particle at r_1 interacting with a particle r_2 at time t**

Zusammengenommen liefern die Ereignisse oben die Wahrscheinlichkeitsamplitude **The probability amplitude for the above sequence of events can be represented by the diagram**

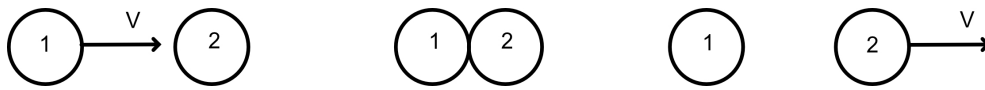


Das Teilstück  wird als Selbstenergieterm bezeichnet, es zeigt das Teilchen mit sich selbst wechselwirken vermittels eines Elektron-Loch-Paares, welches es im Vielteilchensystem erzeugt hat.

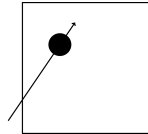
The piece of diagram  is called a 'self-energy part' because it shows the particle interacting with itself via the particle-hole pair it created in the many-body medium.

Eine andere Möglichkeit der Wechselwirkung ist ein Impulsübertrag analog zum Billardball-Experiment. **Another sequence of events which can occur involves only one interaction in which the incoming electron at r interacts with another particle**

at r' and changes place with it. This is analogous to billiard ball 1 striking billiard ball 2 and transferring all its momentum to 2.

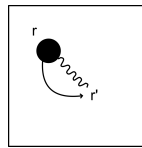


$t = t_a$



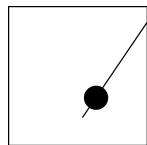
Elektron tritt in das System ein. Extra particle enters at time t_a

$t = t_b > t_a$



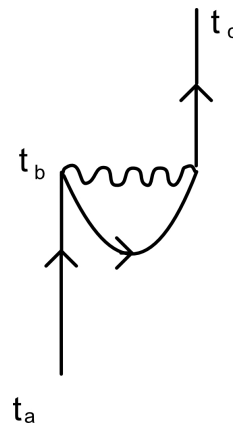
Elektron bei r wechselwirkt mit Elektron bei r' , tauschen Zustände. At time t_b the particle is at r and interacts with particle at r' and changes place with it.

$t = t_c > t_b$

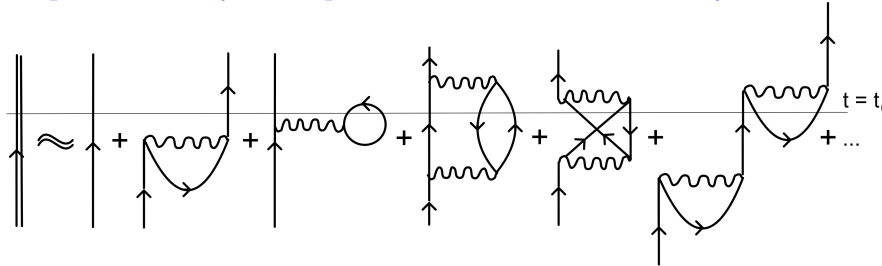


Extrarteilchen verläßt das System. Extra particle leaves the system at time t_c .

In der diagrammatischen Darstellung sieht es wie folgt aus: The sequence may be drawn diagrammatically as a so-called 'open oyster' diagram:

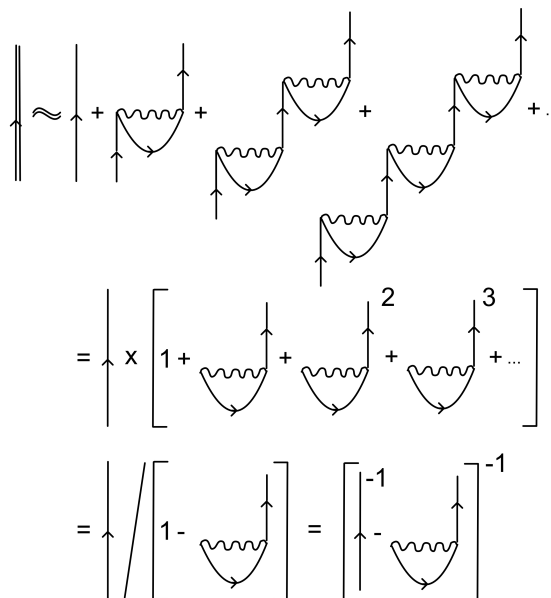


Insgesamt sind viele weitere Prozesse möglich. Zum einem Zeitpunkt $t = t_0$ können daher zusätzlich zum eigentlichen Extrateilchen noch beliebig viele durch dieses Teilchen angeregte Teilchen und Löcher existieren. **The total single-particle propagator is the sum of all amplitudes for all possible ways the particle can propagate through the system. This will include the above processes, repetitions of them, plus an infinite number of others. Thus, at a time $t = t_0$ there may be in addition to the bare particle many more particles and holes created by it.**



That is, the diagram shows all the configurations of particles and holes which may be kicked up by the bare particle as it churns through the many-body system. If we now compare with the picture of the quasiparticle introduced above, we see that the diagrams reveal the content of the ever-changing cloud of particles and holes surrounding the bare particle and converting it into a quasiparticle.

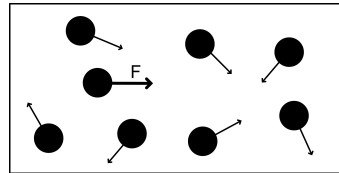
Der Gesamtpropagator kann approximiert werden durch eine partielle Summation über besonders relevante Prozesse, z.B. offene Austerdiagramme. **Just as in the drunken man case, the propagator here may be calculated approximately by doing a partial sum. For example, we can sum over all diagrams containing repeated open oyster parts.**



Für das Elektronengas entspricht dies gerade der Hartree-Fock-Approximation.
 For the electron gas, this is the Hartree-Fock approximation.

Quasiteilchenpropagator **Quasiparticle propagator**

Betrachten zunächst ein klassisches Vielteilchensystem. **Consider the propagator for classical quasiparticle**



Bewegung eines Teilchens unter Einwirkung einer konstanten externen Kraft F vom Startpunkt r_1 . **Motion of one particle subject to constant external force F starting at r_1 in a many-body system.**

Ohne Kollision erfolgt die freie Propagation durch: **If there are no collisions with other particles, the movement or propagation of the particle to the point r_2 at time t_2 is described by:**

$$r_2 - r_1 = \frac{1}{2} \frac{F}{m} (t_2 - t_1)^2$$

Infolge der Wechselwirkungen mit dem anderen Teilchen sind nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich, daher definieren wir den klassischen Propagator als $P(r_2, r_1; t_2, t_1)$ Wahrscheinlichkeitsdichte (im Ortsraum), daß ein ursprünglich im Ruhezustand bei r_1 zur Zeit t_1 zum System hinzugefügtes Teilchen zum Zeitpunkt t_2 bei r_2 ist.

In the interacting case, collisions take place, and the particle will follow a highly irregular path. The best one can do in this situation is talk about the probability of the particle going from one point to another. Define the classical propagator $P(r_2, r_1; t_2, t_1)$ as probability density that if a particle at rest is put into the system at (r_1, t_1) then will be found at r_2 at a later time t_2 .

Für $t_2 < t_1$ definieren wir **For $t_2 < t_1$ we define**

$$P(r_2, r_1; t_2, t_1) = 0 \quad \text{für for} \quad t_2 < t_1.$$

Für freie Propagation ergibt sich der freie Propagator: **In the absence of interactions, the free propagator P will be a surface which is equal zero everywhere except on the line $r_2 - r_1 = \frac{1}{2} \frac{F}{m} (t_2 - t_1)^2$. i.e., the Dirac δ -function:**

$$P_0(r_2, r_1; t_2, t_1) = \delta\left\{(r_2 - r_1) - \frac{1}{2} \frac{F}{m} (t_2 - t_1)^2\right\}.$$

Das ist entsprechend einer Fläche der Newton'schen Bewegung eines Teilchens unter Krafteinfluß. Infolge der Wechselwirkung mit dem anderen Teilchen wird die Bewegung verzögert sein: **If interactions between particles are now allowed to occur, the motion will be delayed:**

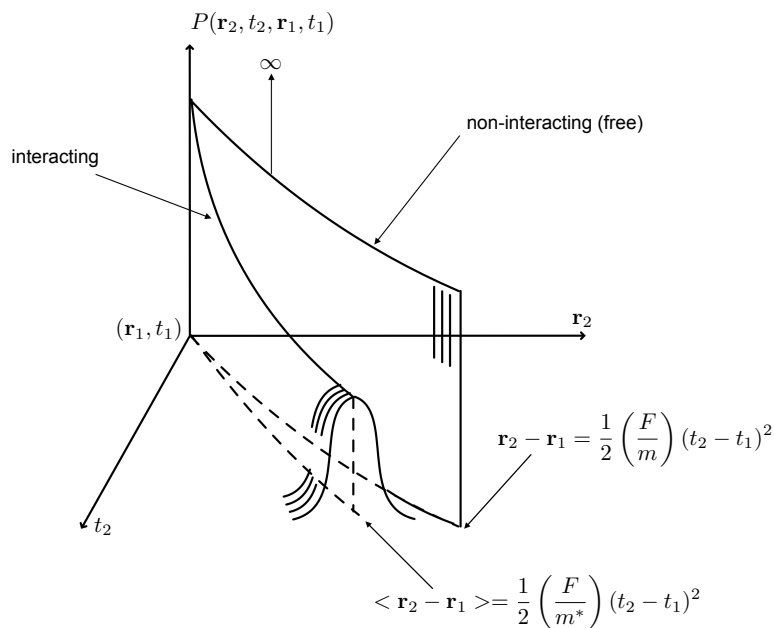
$$m \rightarrow m^* > m$$

m^* ... Quasiteilchenmasse **quasiparticle mass**

und es sind zusätzlich nur Wahrscheinlichkeitsaussagen über Aufenthalt im Ortsraum möglich: **Moreover, the surface will be spread out with the maximum probability given by:**

$$\langle r_2 - r_1 \rangle = \frac{1}{2} \frac{F}{m^*} (t_2 - t_1)^2.$$

Mit $\langle r_2 - r_1 \rangle$ als Quasiteilchenkoordinate, dort ist P maximal. **Here $\langle r_2 - r_1 \rangle$ is the coordinate of a quasiparticle with effective mass m^* .**



⇒ Bewegung verzögert, Wahrscheinlichkeit läuft breit.

Oft fällt die Wahrscheinlichkeit exponentiell, d.h. **Because of the 'spreading out' of the particle position, P_{max} will first fall infinitely rapidly from its value ∞ at $t_2 = t_1$, then more slowly. Often this decay is exponential,**

$$P_{max}(r_2, r_1; t_2, t_1) \sim e^{-(t_2-t_1)/\tau},$$

dann entspricht τ der Quasiteilchenlebensdauer. and τ may be identified as the quasiparticle lifetime.

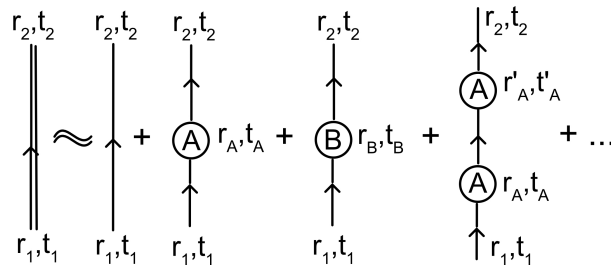
Die Berechnung von P geschieht durch die Einführung von Streuwahrscheinlichkeiten mit den anderen Teilchen im System. The calculation of P requires to consider the scattering efficiencies with the other particles in the system.

$$P \left\{ (r_1 \rightarrow r_A), (\text{Streuung an scattering with A}), (r_A \rightarrow r_2) \right\} \\ = P_0(r_A, r_1) P(A) P_0(r_2, r_A).$$

Wir müssen über alle Pfade summieren und erhalten dann den Ausdruck The total probability, $P(r_2, r_1; t_2 - t_1)$ is just the sum of the probabilities for the various paths. Thus we find

$$P(r_2, r_1; t_2 - t_1) = P_0(r_2, r_1; t_2 - t_1) + \\ + \int_{t_1}^{t_2} dt_A P_0(r_A, r_1; t_A - t_1) P(A) P_0(r_2, r_A; t_2 - t_A) + \\ + \underbrace{\int dt_B + \int dt_C + \dots}_{\text{Streucentren}} + \underbrace{\iint + \dots + \iiint + \dots}_{\text{Mehrfachstreuung}}.$$

In diagrammatischer Darstellung wäre dies dann The diagrammatic expansion becomes



Die Auswertung der Faltungsintegrale wird durch die Fouriertransformation in die Frequenzdomäne erleichtert. Hierfür schreiben wir The unpleasant integrals may be removed by noticing that they all have the form of folded products. This means they can be converted into simple products by a Fourier transformation.

$$P_0(r_j, r_i; t_j - t_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t_j - t_i)} P_0(r_j, r_i; \omega),$$

dann gilt [Thus](#)

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} dt_A P_0(r_A, r_1; t_A - t_1) P(A) P_0(r_2, r_A; t_2 - t_1) \\
 = & \int_{-\infty}^{\infty} dt_A \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega(t_A - t_1)} P_0(r_A, r_1; \omega') \right\} \times \dots \\
 \dots & \times P(A) \times \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t_2 - t_A)} P_0(r_2, r_A; \omega') \right\} \times \\
 = & \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\omega \int d\omega' P_0(r_A, r_1; \omega') P(A) \times \\
 & \times P_0(r_2, r_A; \omega) e^{i(\omega' t_1 - \omega t_2)} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dt_A e^{it_A(\omega' - \omega)}}_{2\pi\delta(\omega' - \omega)} \\
 = & \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t_2 - t_1)} P_0(r_A, r_1; \omega) P(A) P_0(r_2, r_A; \omega)
 \end{aligned}$$

Durch die Fouriertransformation in den Frequenzraum werden aus den Faltungsintegralen Produkte. Dadurch vereinfacht sich der Ausdruck zu [This simplifies the expression for the total probability](#)

$$P(r_2, r_1; \omega) = P_0(r_2, r_1; \omega) + P_0(r_A, r_1; \omega) P(A) P_0(r_2, r_A; \omega) + \dots$$

Betrachten jetzt quantenmechanische Quasiteilchen [Now consider quantum mechanics](#)

Wir führen einen Quantenpropagator G ein, er entspricht einer Wahrscheinlichkeitsdichte. Dadurch ist die Wahrscheinlichkeit durch [Consider now the quantum propagator \$G\$. It is a probability amplitude with the corresponding probability given by](#)

$$|G|^2 = G^* G$$

gegeben. Für den klassischen Fall können wir die Wahrscheinlichkeiten (d.h. Pfade) summieren [In the classical case we could add the probabilities](#)

$$P(2, 1)_{\text{class.}} = P(A) + P(B) + P(C) + \dots$$

Jetzt kommt es zu Interferenzeffekten [In the quantum case, the total probability amplitude is the sum of the probability amplitudes for each process taken separately](#)

$$\begin{aligned}
 G(2, 1) &= G(A) + G(B) + \dots \\
 P(2, 1)_{qm} &= G^*G \\
 &= \underbrace{|G(A)|^2}_{P(A)} + \underbrace{|G(B)|^2}_{P(B)} \\
 &+ \underbrace{G(A)^*G(B) + G(B)^*G(A)}_{\text{Interferenzterme}} + \dots
 \end{aligned}$$

Because of the interference terms the quantum probability is not just the sum of the probabilities for the individual processes, in contrast to the classical case.

Beispiel: Abregung eines Atoms durch Photonemission. Möglich ist ein direkter Übergang $i \rightarrow f$ oder ein Übergang in einen Zwischenzustand $m : i \rightarrow m \rightarrow f$. [A familiar example of this is the decay of an atom from a state \$i \rightarrow f\$ either directly, or via the intermediate state \$m : i \rightarrow m \rightarrow f\$.](#)

Es gilt dabei [Thus we obtain using \$P\(i \rightarrow f\) = A^*A\$](#)

$$\begin{aligned}
 &= |A(i \rightarrow f) + A(i \rightarrow m \rightarrow f)|^2 \\
 &= |A(i \rightarrow f)|^2 + |A(i \rightarrow m \rightarrow f)|^2 \\
 &+ A^*(i \rightarrow f)A(i \rightarrow m \rightarrow f) + \\
 &+ A^*(i \rightarrow m \rightarrow f)A(i \rightarrow f)
 \end{aligned}$$

mit A als Wahrscheinlichkeitsamplitude. [where \$A\$ is the probability density](#)

Definieren den Quanten-Propagator durch [Define quantum propagator by](#)

$$iG(r_2, r_1; t_2 - t_1)_{t_2 > t_1} = iG^R(r_2, r_1; t_2 - t_1)$$

= Die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß sich ein zum Zeitpunkt t_1 bei r_1 , während sich das System im Grundzustand befand, hinzugefügtes Teilchen bei t_2 am Ort r_2 befindet.

= probability amplitude that if at time t_1 we add a particle at point r_1 to the interacting system in its ground state, then at time t_2 the system will be in its ground state with an added particle at r_2 .

Bemerkungen: remarks

- bei Systemen identischer Teilchen wird es sich nicht notwendigerweise um dasselbe Teilchen handeln **It is not necessary the 'same' particle which is observed at t_2 , since this has no meaning in the system of identical particles**
- anstelle von Ortseigenzuständen können wir mit beliebigen Einteilchenzuständen $\Phi_k(r)$ operieren **may work with arbitrary single-particle states**
 $iG^R(k_2, k_1; t_2 - t_1)$ = Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, das Teilchen welches bei t_1 in $\Phi_{k_1}(r)$ hinzugefügt wird, zur Zeit t_2 in $\Phi_{k_2}(r)$ ist. **$iG^R(k_2, k_1; t_2 - t_1)$ = probability amplitude that if at time t_1 we add a particle in $\Phi_{k_1}(r)$ then at time t_2 the system will be in its ground state with an added particle in $\Phi_{k_2}(r)$**
- Für $t_2 \leq t_1$ gelte **For $t_2 \leq t_1$ we define**

$$iG^R(k_2, k_1; t_2 - t_1) = 0$$

Beispiel: Freies Teilchen Example: Free particle

$$H = H_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$$

$$\Phi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ikr} \quad ; \quad \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Gesucht ist der freie Propagator G_0^R **Let us determine the free propagator G_0^R**

bei $t = t_1$ gilt $\psi(r, t_1) = \Phi_{k_1}(r)$. **At $t = t_1$ it holds $\psi(r, t_1) = \Phi_{k_1}(r)$.**

Nach zeitabhängiger Schrödingergleichung gilt für $t = t_2$ **By the time-dependent Schrödinger equation, we find that**

$$\psi(r, t_2) = \Phi_{k_1}(r) e^{-\frac{i\epsilon_{k_1}}{\hbar}(t_2 - t_1)}.$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Teilchen in Φ_{k_2} ist, ist durch die Projektion gegeben **The probability amplitude for the particle being in state Φ_{k_2} given by**

$$\int dr \psi(r, t_2) \Phi_{k_2}^*(r) = e^{-\frac{i\epsilon_{k_1}}{\hbar}(t_2-t_1)} \underbrace{\int dr \Phi_{k_2}^*(r) \Phi_{k_1}(r)}_{\delta_{k_1 k_2}}.$$

Damit [Thus](#)

$$G_0^R(k_2, k_1; t_2 - t_1) = -i \underbrace{\Theta(t_2 - t_1)}_{\text{Stufenfunktion}} e^{-\frac{i\epsilon_{k_2}}{\hbar}(t_2-t_1)} \delta_{k_2 k_1}.$$

Mit der Definition [By means of the definition](#)

$$G_0^R(k; t_2 - t_1) = -i \Theta(t_2 - t_1) e^{-\frac{i\epsilon_k}{\hbar}(t_2-t_1)}$$

folgt [we see that](#)

$$G_0^R(k_2, k_1; t_2 - t_1) = \delta_{k_2 k_1} G_0^R(k_1; t_2 - t_1).$$

Dieses Ergebnis wird Fouriertransformiert [Convenient to work with the Fourier transform](#)

$$G_0^R(k, \omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Theta(\tau) e^{-\frac{i\epsilon_k \tau}{\hbar}} e^{i\omega \tau} \quad (7.122)$$

$$= - \left. \frac{e^{i(\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar})\tau}}{\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar}} \right|_0^{\infty} \quad (7.123)$$

$$= \frac{1}{\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar}} - \underbrace{\frac{e^{i(\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar})\infty}}{\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar}}}_{\substack{\text{nicht definiert,} \\ \text{Ausdruck oszilliert}}} \quad (7.124)$$

Modifizieren deshalb G^R [The last term is not well defined. In order to get around this difficulty, we slightly modify the expression by multiplying the propagator with the factor \$e^{-\delta\(t_2-t_1\)} = e^{-\delta\tau}\$ and obtain](#)

$$G_0^R(k, \tau) = -i \Theta(\tau) e^{-i(\epsilon_k - i\delta)\tau/\hbar}$$

mit infinitesimalem δ , es folgt [This results in](#)

$$G_0^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar} + i\frac{\delta}{\hbar}} - \frac{e^{i(\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar} + i\frac{\delta}{\hbar})\infty}}{\underbrace{\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar} + i\frac{\delta}{\hbar}}_{\rightarrow 0}}$$

d.h. i.e.

$$G_0^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \frac{\epsilon_k}{\hbar} + i\frac{\delta}{\hbar}}. \quad (7.125)$$

Erinnern wir uns an Abschn. 6.3. Dort wurde die retardierte Greensche Funktion definiert [Remember definition of retarded Green's function in paragraph 6.3](#)

$$G^R(r, r'; E) = \sum_n \frac{\psi_n(r)\psi_n^*(r')}{E - E_n + i\delta}.$$

D.h. der Propagator des freien Teilchens scheint ein Spezialfall der früher eingeführten Greenfunktion zu sein. [It seems as if the free propagator is a special case of the Green's function introduced earlier.](#)

Beweis: Proof: Schrödinger Gleichung für freies Teilchen definiert G_0 : [G₀ determined by Schrödinger equation for free particle:](#)

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} \underbrace{G_0(r, r'; t - t')} &= \hbar \delta(r - r') \delta(t - t') \\ G_0(r - r'; t - t') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk e^{ik(r-r')} G_0(k; t - t') \\ \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk \left\{ \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} e^{ik(r-r')} G_0(k; t - t') & \\ &= \hbar \underbrace{\delta(r - r')} \delta(t - t') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk e^{ik(r-r')} \\ \Rightarrow \left\{ \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} \underbrace{G(k; t - t')}_{G_0(k; t - t') = i\Theta(t - t') e^{-i\epsilon_k(t - t')/\hbar}} &= \hbar \delta(t - t') \end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir den oben berechneten Propagator eingesetzt. Nach Produktregel folgt [In the last step we used the propagator from above and obtain](#)

$$\left\{ \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} (\Theta(t-t')) \right] \cdot e^{-i\epsilon_k(t-t')/\hbar} \right. \\
 \left. + i\hbar \Theta(t-t') i \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\epsilon_k(t-t')/\hbar} \right\} = \hbar \delta(t-t')$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\epsilon_k G_0 = \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} G_0}$

damit verbleibt [it remains](#)

$$\underbrace{e^{-i\epsilon_k(t-t')/\hbar} \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Theta(t-t')}_{\delta(t-t')} = \hbar \delta(t-t')$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\delta(t-t')}$

(es gilt [it holds](#) $f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)$)

□

D.h. der intuitiv eingeführte Propagator ist tatsächlich die hier zuständige Greenfunktion! [The propagator introduced here empirically is indeed the Green's function for the free particle. Note that the above expression is equivalent to Eq. 6.78 in k-space.](#)

Now consider the propagator in the case of interactions. Quasiparticles act like free particles except that they have a new energy ϵ'_k instead of ϵ_k , and a lifetime τ_k . Therefore we expect that if the added particle behaves like quasiparticle, the single particle propagator will have the same form as the free propagator except for the replacement of ϵ_k by ϵ'_k and the inclusion of an exponential decay factor with time constant τ_k . In a Fermi system, because of the Pauli principle, each state can hold at most one particle. Therefore, if state k is already partially (or fully) occupied, the probability amplitude that we can add an extra particle in state k will be less than 1. Hence we have to multiply by a factor $Z_k \leq 1$. This gives us

$$G_{quasi}^R(k, t_2 - t_1) = -i Z_k e^{-i\epsilon'_k(t_2-t_1)} e^{-(t_2-t_1)/\tau_k}$$

This has the Fourier transform

$$G_{quasi}^R(k, \omega) = \frac{Z_k}{\omega - \frac{\epsilon'_k}{\hbar} + i\tau_k^{-1}} \quad (7.126)$$

For these expressions to be sensible it is evident that the lifetime of the quasiparticles must be long, so that the width of the energy levels, τ_k^{-1} is much less than the values of the energies themselves, i.e.,

$$\tau_k^{-1} \ll \epsilon'_k.$$

Bedeutung des δ ? δ zunächst eingeführt um die Unbestimmtheit des Integrals 7.124 zu reparieren. Vergleich von Gl. 7.125 und 7.126 zeigt, daß $\frac{\hbar}{\delta} \hat{=}$ Lebensdauer des Quasiteilchens. Mit $\lim \delta \rightarrow 0$ betrachten wir den Grenzfall der unendlichen Lebensdauer

Comparison of Eqs. 7.125 and 7.126 also provides a physical interpretation of δ introduced ad hoc to get around the problem of the oscillations in the integral 7.124: It is the inverse of the quasiparticle lifetime.

7.8 Vielteilchen-Greenfunktion Many-body Green's function

Definition definition

Im Sinne der anschaulichen Interpretation der Propagatoren im Abschn.7.7 fragen wir jetzt nach der Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Teilchen mit Spin α welches bei (r, t) zu einem N-Teilchensystem hinzugefügt wird, mit dem Spin β bei (r', t') wieder erscheint. Now we ask about the probability that a particle of spin α that has been added to a N-particle system at (r, t) appears with spin β at (r', t')

D.h. betrachten Sequenz That is, we envisage the following train of events

- | | | | |
|-------|------------------------------------------------------------------------------|-----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (i) | $ N \rangle$ | ... | N-Teilchensystem im Grundzustand ground state of system |
| (ii) | $\hat{\psi}_\alpha^+(r, t) N \rangle$ | ... | Teilchen bei (r,t) mit Spin α hinzugefügt ground state of system with particle added at (r,t) with spin α |
| (iii) | $\hat{\psi}_\beta^+(r', t') \hat{\psi}_\alpha^+(r, t) N \rangle$ | ... | Teilchen mit Spin β bei (r',t') von N+1 - Teilchensystem entfernt particle removed at (r',t') with spin β from N+1 state |
| (iv) | $\langle N \hat{\psi}_\beta(r', t') \hat{\psi}_\alpha^+(r, t) N \rangle$ | ... | Überlapp mit dem ursprünglich System, d.h. Wahrscheinlichkeit für diesen Prozeß overlap of system after perturbation with the original ground state |

Ähnlich könnte man auch die Propagation eines Loches betrachten Similarly the system in the absence of one of its particles (or the presence of a "hole") could be

described by

$$\langle N | \hat{\psi}_\beta^+(r', t') \hat{\psi}_\alpha(r, t) | N \rangle. \quad (7.127)$$

Wir führen den Zeitordnungsoperator T ein. Both of the above expressions have little physical meaning unless the time t' is later than t , otherwise they become noncausal. It is convenient to define a time-ordering operator T

$$T[\hat{\psi}_\alpha(r, t) \hat{\psi}_\beta^+(r', t')] = \begin{cases} \hat{\psi}_\alpha(r, t) \hat{\psi}_\beta^+(r', t') & \text{für } t > t', \\ -\hat{\psi}_\beta^+(r', t') \hat{\psi}_\alpha(r, t) & \text{für } t < t'. \end{cases}$$

Damit wird die Vielteilchen-Greenfunktion It allows incorporate the two expressions for an added and subtracted particle into one expression for the many-body Green's function

$$G_{\alpha\beta}(r, t; r' t') = -i \langle N | T[\hat{\psi}_\alpha(r, t) \hat{\psi}_\beta^+(r', t')] | N \rangle \quad (7.128)$$

definiert. Für $t > t'$ beschreibt (7.128) die Bewegung eines Teilchens von $(r', t') \rightarrow (r, t)$. For $t > t'$ $G_{\alpha\beta}(r, t; r' t') = -i \langle N | [\hat{\psi}_\alpha(r, t) \hat{\psi}_\beta^+(r', t')] | N \rangle$ describes the motion of an added particle from $(r', t') \rightarrow (r, t)$.

$G_{\alpha\beta}(r, t; r' t') = -i \langle N | [\hat{\psi}_\beta(r', t')^+ \hat{\psi}_\alpha(r, t)] | N \rangle$ beschreibt für $t < t'$ die Propagation eines Lochs von $(r, t) \rightarrow (r', t')$. $G_{\alpha\beta}(r, t; r' t') = -i \langle N | [\hat{\psi}_\beta(r', t')^+ \hat{\psi}_\alpha(r, t)] | N \rangle$ describes for $t < t'$ the motion of an added hole from $(r, t) \rightarrow (r', t')$.

Im folgenden kombinieren wir Spin und Ortskoordinate. As a matter of convenience, we include in the following the spin index as one of the variables.

$$\begin{aligned} r, \alpha &\rightarrow x \\ r', \beta &\rightarrow x' \\ \sum_{Spin} \int dr &\rightarrow \int dx \end{aligned}$$

Und schreiben kompakt [This leads to](#)

$$\boxed{G(x, t; x', t') = -i \langle N | T[\hat{\psi}(x, t)\hat{\psi}^+(x', t')] | N \rangle} \quad (7.129)$$

Beziehung zur Einteilchen-Greenfunktion? [The definition 7.128 looks at first view very little like the Green's function we met in chapter 6.](#)

Betrachten nichtwechselwirkende Fermionen, die alle Zustände bis zur Fermi-Energie besetzen. [Consider, however, fermions occupying states up to some maximum level \$m_F\$](#)

$$\begin{aligned} \text{Grundzustand } \text{ground state } | N \rangle &= \prod_{m < m_F} \hat{c}_m^+ | 0 \rangle \\ \text{Feldoperator } \text{field operator } \hat{\psi}(x, t) &= \sum_m \phi_m(x) e^{-i\epsilon_m t/\hbar} \hat{c}_m. \end{aligned}$$

Mit diesem Ansatz gehen wir in die Greenfunktion hinein [Substituting in Eq. 7.128 we have](#)

$$\begin{aligned} G(x, t; x', t') &= -i \sum_{lm} \phi_m(x) \phi_l^*(x') e^{-i(\epsilon_m t - \epsilon_l t')/\hbar} \\ &\underbrace{\langle N | \hat{c}_m \hat{c}_l^+ | N \rangle \Theta(t - t')}_{\neq 0 \text{ nur für } m=l \text{ und } m > m_F} - \underbrace{\langle N | \hat{c}_l^+ \hat{c}_m | N \rangle \Theta(t' - t)}_{\neq 0 \text{ nur für } m=l \text{ und } m < m_F} \end{aligned}$$

d.h. [so that](#)

$$\begin{aligned} G(x, t; x', t') &= -i \sum_{m > m_F} \phi_m(x) \phi_m^*(x') e^{-i\epsilon_m(t-t')/\hbar} \cdot \Theta(t - t') \\ &\quad + i \sum_{m < m_F} \phi_m(x) \phi_m^*(x') e^{-i\epsilon_m(t-t')/\hbar} \cdot \Theta(t' - t) \end{aligned}$$

damit entsteht eine Summe von 2 Einteilchen-Greenfunktionen, die jeweils zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen unterscheiden. Ein Vergleich mit Abschn. 6.3 liefert [The many-body Greens's function reverts to a form of the single-particle Green's function, which differentiates between the occupied and unoccupied states. There is a simple relationship between the time-ordered, advanced and retarded Green's functions](#)

$$G(x, t; x', t') = G^A(x, t; x', t') + G^R(x, t; x', t'). \quad (7.130)$$

Polstellen der Greenfunktion [energy structure](#)

Müssen Zeitabhängigkeit in Energieabhängigkeit transformieren. [One of the main attributes of the Green's function of Chap. 6 is that its poles are the eigenvalues of the governing equation. Let us see how this property carries over to the Green's function 7.128. First we must transform our time-dependent Green's function into an energy-dependent one.](#)

Die Schrödingergleichung in der Eigenwertdarstellung lautet [If \$\hat{H}\$ is the Hamiltonian of the system we have](#)

$$\hat{H} | N \rangle = E_N^0 | N \rangle$$

mit E_N^0 als Grundzustandsenergie des N-Teilchensystems. [where \$E_N^0\$ is the ground-state energy.](#)

Für stationäres \hat{H} folgt [assuming that \$\hat{H}\$ is not an explicit function of time](#)

$$\hat{\psi}(x, t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\psi}(x) e^{-i\hat{H}t/\hbar}.$$

und damit in Greenfunktion und Hermitezität von H ausnutzen [Substituting into Eq. 7.128](#)

$$iG(x, t; x', t') = e^{iE_n^0(t-t')/\hbar} \langle N | \hat{\psi}(x) e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\hat{H}t'/\hbar} \hat{\psi}^+(x') | N \rangle \Theta(t - t') \\ - e^{-iE_n^0(t-t')/\hbar} \langle N | \hat{\psi}^+(x') e^{-i\hat{H}t'/\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\psi}(x) | N \rangle \Theta(t' - t)$$

Führen eine vollständige Basis von M - Teilchenzuständen $\{| M, j \rangle\}$ ein [Introduce the complete set of states with M particles with \$| M, j \rangle\$, where j is a general label to describe the possible excited states](#)

$$\hat{H} | M, j \rangle = E_M^j | M, j \rangle.$$

Nun nutzen wir die Vollständigkeit aus [Exploit the completeness](#)

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}t/\hbar} e^{i\hat{H}t'/\hbar} &= \sum_j e^{-i\hat{H}t/\hbar} |M, j\rangle \langle j, M| e^{i\hat{H}t'/\hbar} \\ &= \sum_j e^{-iE_M^j(t-t')/\hbar} \underbrace{|M, j\rangle \langle j, M|}_1. \end{aligned}$$

Hiermit wird die Greenfunktion zu [and obtain](#)

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{i} \sum_j e^{i(E_N^0 - E_M^j)(t-t')/\hbar} \langle N | \hat{\psi}(x) | M, j\rangle \langle j, M | \hat{\psi}^+(x) | N\rangle \Theta(t-t') \\ &\quad - \frac{1}{i} \sum_j e^{-i(E_N^0 - E_M^j)(t-t')/\hbar} \langle N | \hat{\psi}^+(x) | M, j\rangle \langle j, M | \hat{\psi}(x) | N\rangle \Theta(t'-t) \end{aligned}$$

d.h. die Greenfunktion hängt nur von der Zeitdifferenz $\tau = t - t'$ ab [The Green's function is now explicitly only a function of the time difference \$\tau = t - t'\$](#)

$$G(x, t; x', t') = G(x, x'; \tau).$$

können das Ergebnis fouriertransformieren [an energy transform follows as](#)

$$G(x, x'; \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau/\hbar} G(x, x'; \tau)$$

müssen dabei wieder ein infinitesimales $i\delta$ einführen und erhalten

$$\begin{aligned} G(x, x'; \omega) &= \sum_j \left\{ \frac{\langle N | \hat{\psi}(x) | M, j\rangle \langle j, M | \hat{\psi}^+(x') | N\rangle}{\omega - (E_M^j - E_N^0)/\hbar + i\delta/\hbar} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\langle N | \hat{\psi}^+(x') | M, j\rangle \langle j, M | \hat{\psi}(x) | N\rangle}{\omega + (E_M^j - E_N^0)/\hbar - i\delta/\hbar} \right\}. \end{aligned} \quad (7.131)$$

where the infinitesimals $\pm i\delta$ reflect the time ordering, cf. [Chapt. 6.3](#)

Betrachten beide Terme einzeln [Let us consider the two terms separately](#)

- Betrachten nun 1. Term **1st term**

$$\left. \begin{array}{l} \langle N \quad | \quad \hat{\psi}(x) \quad | M, j \rangle \\ \langle j, M \quad | \quad \hat{\psi}^+(x') \quad | N \rangle \end{array} \right\} \neq 0 \text{ nur für } \text{only for } M = N + 1$$

$\Rightarrow E_M^j$ ist eine Energie des $N + 1$ -Teilchen-Systems $\Rightarrow E_M^j$ is an energy level of the (N+1)-particle state

Wenn wir die Grundzustandsenergie als E_n^0 bezeichnen, erhalten wir **If we write the ground-state energy as E_n^0 , then we have**

$$E_M^j - E_n^0 = E_{N+1}^j - E_{N+1}^0 + E_{N+1}^0 - E_N^0$$

wobei $E_{N+1}^0 - E_N^0$ die minimale Energie ist, um ein Teilchen zum System hinzuzufügen, d.h. das chem. Potential μ . **Here, the expression $E_{N+1}^0 - E_N^0$ is the minimum possible energy to add one particle to the N-particle state, and so is the chemical potential or Fermi energy μ .**

Die j -te Anregungsenergie des (N+1)-Zustands ist gegeben durch **The j th excitation energy of the (N+1)-particle state is given by**

$$E_{N+1}^j - E_{N+1}^0 = \epsilon_{N+1}(j)$$

- betrachten den 2. Term von G **2nd term**

$$\left. \begin{array}{l} \langle N \quad | \quad \hat{\psi}^+(x') \quad | M, j \rangle \\ \langle j, M \quad | \quad \hat{\psi}(x) \quad | N \rangle \end{array} \right\} \neq 0 \text{ nur für } \text{only for } M = N - 1$$

Die analoge Energieumformung geschieht wie oben **write similarly as above**

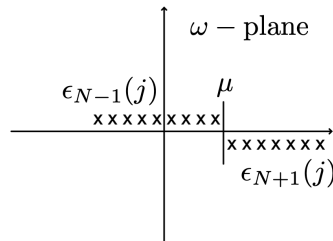
$$E_{N-1}^j - E_N^0 = \underbrace{E_{N-1}^j - E_{N-1}^0}_{\epsilon_{N-1}(j)} + \underbrace{E_{N-1}^0 - E_N^0}_{-\mu}$$

damit wird insgesamt (7.131) zu **can now write our energy-dependent Green's function as**

$$G(x, x'; \omega) = \sum_j \left\{ \frac{\langle N | \hat{\psi}(x) | N+1, j \rangle \langle j, N+1 | \hat{\psi}^+(x') | N \rangle}{\omega - (\epsilon_{N+1}(j) + \mu)/\hbar + i\delta/\hbar} - \frac{\langle N | \hat{\psi}^+(x') | N-1, j \rangle \langle N-1, j | \hat{\psi}(x) | N \rangle}{\omega + (\epsilon_{N-1}(j) - \mu)/\hbar - i\delta/\hbar} \right\}.$$

D.h. die N-Teilchen- Greenfunktion hat Polstellen bei den angeregten Zuständen des $(N \pm 1)$ - Teilchensystems. Damit können die Polstellen von G z.B. als Elektronenaffinität bzw. Ionisierungsenergien von Festkörpern interpretiert werden. Thus, the N-particle Green's function has poles at the excited states of the $(N \pm 1)$ -particle system, i.e., $\hbar\omega = \mu + \epsilon_{N+1}(j) - i\delta$ and $\hbar\omega = \mu - \epsilon_{N+1}(j) + i\delta$

Energiestruktur der Greenfunktion in komplexer Ebene The resulting energy structure is indicated below. We see that the chemical potential provides a clear separation point for the system, above which the poles are below the real axis and correspond to the $(N+1)$ -particle system, while below this energy only the $(N-1)$ -particle excitation energy poles appear and these are above the real axis.



Lehman-Darstellung **Lehman representation**

Wechselwirkungs- und Streuprozesse mit anderen Teilchen im System \Rightarrow kontinuierliche Energieverteilung anstatt diskrete Niveaus, d.h. $\epsilon_{N \pm 1}(j) \rightarrow \omega'$. Once we have introduced interactions there will be many ways of dividing a momentum k among the particles. The interactions will ensure that the momentum is spread among the other particles. Thus, the state label j will be more of a continuous variable than a discrete set of states, i.e., $\epsilon_{N \pm 1}(j) \rightarrow \omega'$.

mit Fouriertransformation in den k-Raum perform the momentum transformation

$$G(k, \omega) = \int G(x - x', \omega) \exp -ik(x - x')d(x - x') \quad (7.132)$$

erhalten wir **end obtain**

$$G(k, \omega) = \int_0^{\infty} d\omega' \left\{ \frac{A(k, \omega')}{\omega - \omega' - (\mu + i\delta)/\hbar} - \frac{B(k, \omega')}{\omega + \omega' - (\mu + i\delta)/\hbar} \right\}$$

$A(k, \omega), B(k, \omega)$... Spektralfunktion [spectral weight functions](#)

die Lehman-Darstellung der Greenfunktion. [the Lehman representation of the Green's function.](#)

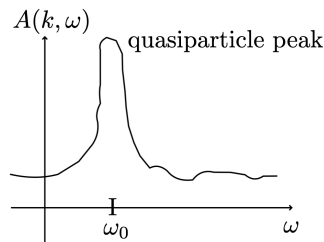
Für nichtwechselwirkende Teilchen ergeben sich die Spektralfunktionen $A(k, \omega), B(k, \omega)$ als [For the non-interacting system we have](#)

$$A(k, \omega) = \delta(\omega' - (E(k) + \mu)/\hbar)$$

$$B(k, \omega) = \delta(\omega' + (E(k) - \mu)/\hbar)$$

(vergleiche mit Abschn. 7.7 [cf., Chap. 7.7](#))

Die scharfe Energien freier Teilchen werden durch Wechselwirkung spektral verbreitert. [Interactions lead to a broadening as shown below.](#)



Die visuelle Inspektion der Lehman-Darstellung der Greenfunktion erlaubt die Identifikation von eventuell vorhandenen Quasiteilchen. [If we evaluate the Green's function in the Lehman representation and find something which resembles a delta function, i.e., an isolated peak, then we have identified a quasiparticle.](#)

Bewegungsgleichung [Equation of motion \(EOM\) for the Green's function](#)

$$G(x_1, t_1; x_2, t_2) = \frac{1}{i} \langle N | T[\hat{\psi}(x_1, t_1)\hat{\psi}^+(x_2, t_2)] | N \rangle \quad (7.133)$$

$$\frac{\partial}{\partial t_1} G = \frac{1}{i} \langle N | \left(\frac{\partial}{\partial t_1} T \right) [\hat{\psi}(x_1, t_1)\hat{\psi}^+(x_2, t_2)] | N \rangle \quad (7.134)$$

$$+ \frac{1}{i} \langle N | \left[\frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\psi}(x_1, t_1)\hat{\psi}^+(x_2, t_2) \right] | N \rangle$$

Zeitableitung des Zeitordnungsoperators ? [derivative of the time ordering operator?](#)

Einschub: Ableitung der Sprungfunktion [insertion derivative of the step function](#)

$$F(t) := \int_{-\infty}^t \delta(x - t') dx = \begin{cases} 1 & \text{für } t > t' \\ 0 & \text{für } t < t' \end{cases} = \Theta(t - t')$$

D.h. [i.e.](#)

$$\frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t') = \frac{d}{dt} F(t) \underbrace{=} \delta(t - t')$$

Hauptsatz der
Integralrechnung

Damit kehren wir zurück in Gleichung (7.134) [Use this in Eq. \(7.134\)](#)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t_1} (T[\hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2)]) \\ &= \frac{\partial}{\partial t_1} \left(\Theta(t_1 - t_2) \hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) - \Theta(t_2 - t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) \hat{\psi}(x_1, t_1) \right) \\ &= \delta(t_1 - t_2) \hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) - \Theta(t_1 - t_2) \frac{\partial \hat{\psi}(x_1, t_1)}{\partial t_1} \hat{\psi}^+(x_2, t_2) \\ & \quad + \delta(t_1 - t_2) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) \hat{\psi}(x_1, t_1) - \Theta(t_2 - t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) \frac{\partial \hat{\psi}(x_1, t_1)}{\partial t_1} \\ &= \delta(t_1 - t_2) \underbrace{\left(\hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) + \hat{\psi}^+(x_2, t_2) \hat{\psi}(x_1, t_1) \right)}_{\delta(x_1 - x_2) \dots \text{Kommutator für Feldoperatoren}} \\ & \quad + T \left[\frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) \right] \\ &= \delta(t_1 - t_2) \delta(x_1 - x_2) + T \left[\frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) \right] \end{aligned}$$

Die Bewegungsgleichung für den Feldoperator im Heisenbergbild lautet [EOM of field operator in Heisenberg representation](#)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\psi}(x_1, t_1) = [\hat{H}, \hat{\psi}(x_1, t_1)]. \quad (7.135)$$

Wir nehmen jetzt den speziellen Fall eines Fermigas mit Coulombwechselwirkungen an, d.h. [Assume now the particular case of a Fermi gas with Coulomb interaction, i.e.,](#)

$$\hat{H}(x_1, t_1) = \overbrace{\hat{H}_0}^{\text{Ein-Elekt.-Hamiltonop.}} + \underbrace{\nu(x_1, x_2)}_{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|r_1-r_2|}} \delta(t_2 - t_1)$$

und drücken \hat{H} durch den Feldoperator aus [express and express \$\hat{H}\$ in terms of the field operator, cf. Eq. \(7.119\)](#)

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int \hat{\psi}^+(x, t) \hat{H}_0(x) \hat{\psi}(x, t) dx \\ &+ \int \hat{\psi}^+(x, t) \hat{\psi}^+(x', t') \nu(x, x') \delta(t - t') \hat{\psi}(x', t') \hat{\psi}(x, t) dx dx' \end{aligned}$$

Mit diesem \hat{H} gehen wir nun in die Bewegungsgleichung für den Feldoperator (7.135) unter Verwendung der Kommutatorrelationen [Enter now the EOM \(7.135\)](#)

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{\psi}(x_1, t_1) = [\hat{H}_0(x_1) + \int \nu(x_1, x_3) \hat{\psi}^+(x_3, t_1) \hat{\psi}(x_3, t_1) dx_3] \hat{\psi}(x_1, t_1)$$

Mit dieser Zeitableitung gehen wir in die [Bewegungsgleichung für G](#) [This time derivative is substituted in the EOM of G](#)

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_0(x_1) \right] G(x_1, t_1, x_2, t_2) & (7.136) \\ & + i \int \nu(x_1, x_3) \langle N | \hat{\psi}^+(x_3, t_1) \hat{\psi}(x_3, t_1) \hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2) | N \rangle dx_3 \\ & = \hbar \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2) \end{aligned}$$

Unter dem Integral taucht eine Bildung von 2 Erzeugern und 2 Vernichtern auf, d.h. die Propagation von zwei Teilchen wird beschrieben, spezielle Form einer 2-Teilchen-Greenfunktion. [The presence of two creation and two annihilation field operators means that it must describe the propagation of two particles. It is in fact a special case of the two-particle Green's function defined as](#)

$$G_2(x_1 t_1, x_2 t_2, x_3 t_3, x_4 t_4) = (i)^2 \langle N | T[\hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}(x_3, t_3) \hat{\psi}^+(x_4, t_4) \hat{\psi}^+(x_2, t_2)] | N \rangle$$

Approximative Lösung in Hartree-Näherung Hartree approximation

untersuchen *investigate*

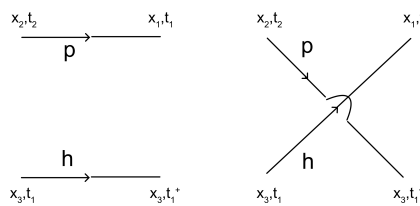
$$\langle N | T[\hat{\psi}^+(x_3, t_1) \hat{\psi}(x_3, t_1^+) \hat{\psi}(x_1, t_1) \hat{\psi}^+(x_2, t_2)] | N \rangle$$

given the ordering of the field operators it is required that $t_1^+ = t_1 + \delta$

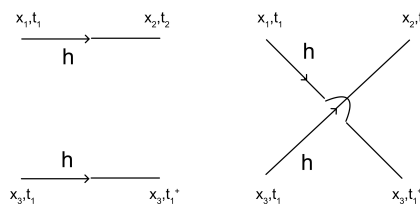
- falls in case $t_1 > t_2$:

$$\begin{aligned} \text{Teilchen particle } (x_2 t_2) &\rightarrow \begin{cases} (x_1 t_1) \\ \text{oder or} \\ (x_3 t_1^+) \end{cases} \\ \text{Loch hole } \left. \begin{matrix} (x_1 t_1) \\ \text{oder or} \\ (x_3 t_1^+) \end{matrix} \right\} &\rightarrow (x_3 t_1). \end{aligned}$$

Graphisch *schematic*



- falls in case $t_1 < t_2$ propagieren 2 Löcher *two holes propagate*



Wir machen die Approximation, daß die Löcher/Teilchen unabhängig von einander propagieren, d.h. wir machen einen Produktansatz für die 2-Teilchen-Greenfunktion. We do not know how the particles and holes propagate. The first obvious choice is to allow each particle to propagate independently according to

the single-particle Green's function. Since there are two particles involved, we are making the separation

$$G_2 \rightarrow G_1 \times G_1$$

und erlauben alle oben dargestellten Prozesse. Damit ergibt sich and allow for all the processes shown schematically above. This leads to

$$-\langle N | T... | N \rangle = G(x_1 t_1, x_2 t_2) G(x_3 t_1, x_3 t_1^+) + \underbrace{G(x_1 t_1, x_3 t_1^+) G(x_3 t_1, x_2 t_2)}_{\substack{\text{Austausch-Term, wird vernachlässigt} \\ \text{exchange term, will be neglected}}}$$

Damit gehen wir nun in die Bewegungsgleichung für G 7.136
 Substitute this in the EOM for G 7.136

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_0(x_1) + i \underbrace{\int \nu(x_1, x_3) G(x_3, t_1, x_3, t_1^+) dx_3}_{\substack{V_H(x_1 t_1) \dots \text{Hartreepotential,} \\ \text{d.h. Wechselwirkung mit elektrost.} \\ \text{Feld aller Elektronen} \\ \text{Hartree potential}}} \right\} G(x_1 t_1, x_2 t_2) = \hbar \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2)$$

und erhalten damit die Bewegungsgleichung für die Greenfunktion des Fermi-Gases in der Hartree-Approximation
 and thus obtain the Hartree approximation as one-half of the lowest order of approximation to the equation of motion

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_0(x_1) - V_H(x_1, t_1) \right\} G(x_1, t_1; x_2, t_2) = \hbar \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2)$$

(7.137)

Bemerkung: Die Mitnahme des Austausch-Terms führt zu einem nichtlokalen Operator, der sogenannten Hartree-Fock-Näherung, vgl. Kap. 7.4. Diese ist oft Startpunkt für Molekülberechnungen aber für Festkörper ist diese Näherung im allgemeinen aber eher schlechter als Hartree.

Comment: The next step would be to take both terms for the two-particle Green's

function. The exchange term then gives rise to a nonlocal operator. It is, in fact, the Green's function variation of the exchange interaction appearing in the Hartree-Fock equation, cf. Chapter 7.4. Thus, we have two approximations to the solution of Eq. 7.136 at the same level. The Hartree approximation is apparently mathematically less justified than the Hartree-Fock approximation. Still, at least for solids, the Hartree approximation gives a much better description of many properties.

Wir suchen einen systematischen Zugang zur Greenfunktion mit kontrollierbarem Konvergenzverhalten. Das ist bei der Hierarchie von Greenfunktionen eher nicht gegeben, z.B. ist die Hartree-Fock-Näherung manchmal schlechter als Hartree, obwohl zumindest mathematisch viel besser gerechtfertigt.

Having dealt with the two-particle Green's function in this way, the obvious next stage could be to carry on up the hierarchy, but this becomes rapidly far too complicated. Keeping track of all the possible terms is very difficult and not necessarily justified, as we have just seen comparing Hartree and Hartree-Fock approximations

⇒ Betrachten im folgenden die Selbstenergie Consider the self-energy

Ansatz: Erweitern (7.137) um ein externes Potential Suppose we have solved the infinite series of equations and look for a solution in the form

$$\begin{aligned} & \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(x_1) - \underbrace{\phi(x_1, t_1) - V_H(x_1, t_1)}_{-V(x_1, t_1)} \right\} G(x_1, t_1; x_2, t_2) \\ & - \int \sum (x_1, t_1; x_3, t_3) G(x_3, t_3; x_2, t_2) dx_3 dt_3 \\ & = \hbar \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2) \end{aligned}$$

Der Selbstenergieoperator $\sum(x_1, t_1; x_3, t_3)$ enthalte jetzt alle Wechselwirkungseffekte.

The operator $\sum(x_1, t_1; x_3, t_3)$ is called the self-energy operator and includes all of the interaction effects within itself.

Was ist die formale Begründung für die Bezeichnung der Selbstenergie? Wir fouriertransformieren unseren Ansatz in den Frequenzraum Why is it called 'self energy'? We transform to the energy-dependent form

$$\begin{aligned} & [\omega - \hat{H}_0(x_1) - V(x_1, \omega)] G(x_1, x_2, \omega) - \int \sum (x_1, x_3, \omega) G(x_3, x_2, \omega) dx_3 \\ & = \delta(x_1 - x_2). \end{aligned}$$

In Matrix-Notation sieht dies wie folgt aus [If we write this in matrix form, cf. Chapt. 6.2, we have](#)

$$\begin{aligned} (\omega \mathbb{1} - H_0 - V)G - \Sigma G &= \mathbb{1} \\ \Rightarrow G^{-1} &= (\omega \mathbb{1} - H_0 - V - \Sigma). \end{aligned}$$

Für nichtwechselwirkende Fermi-Gase gilt [The noninteracting Fermi gas \(i.e., without \$\Sigma\$ \) equation has a solution](#)

$$\begin{aligned} G_0^{-1} &= (\omega \mathbb{1} - H_0 - V) \\ \Rightarrow G^{-1} &= G_0^{-1} - \Sigma. \end{aligned} \tag{7.138}$$

D.h. die Pole der Greenfunktion (Anregungsenergien) werden durch die Selbstenergie verschoben, durch die Einbeziehung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Sind damit im Einklag mit der Begriffsbildung aus dem Kapitel 7.7.

[The poles of the Green's function \$G\$ \(or zeros of the inverse \$G^{-1}\$ \) are moved in energy by \$\Sigma\$ from those of the noninteracting Green's function \$G_0\$. Thus, the self-energy may be considered as a contribution to the energy of the excitations of the system from the interaction effects.](#)

Bemerkung: Die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen sind gemittelt auch schon im Hartree-Potential enthalten, deshalb wird dieses von manchen Autoren zur Selbstenergie geschlagen.

[Comment:](#) Some authors define the self-energy to include the Hartree potential. We do not do this here because in most respects the Hartree potential is a one-electron effective potential and in almost all practical calculations is, approximately at least, contained in the one-electron part of the Hamiltonian.

7.9 Fundamentales Gleichungssystem [Hedin fundamental equations](#)

Wir vereinfachen die Notation [We simplify the notation](#)

$$(x_1, t_1) \longrightarrow (1), (x_1, t_1^+) \longrightarrow (1^+), (x_2, t_2) \longrightarrow (2)$$

Damit wird eine kompakte Darstellung der Bewegungsgleichung (7.137) zu [This transform Eq. \(7.137\) to](#)

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(x_1) - V(1) \right\} G(1, 2) - \int \Sigma(1, 3) G(3, 2) d3 = \hbar \delta(1 - 2) \tag{H0}$$

wobei [where](#)

$$V(1) = \underbrace{\phi(1)}_{\text{externes Potential}} + \underbrace{V_H(1)}_{\text{Hartree-Potential}} \quad (7.139)$$

Andererseits gilt die Bewegungsgleichung [On the other hand, with an external potential \$\phi\$ the basic equation of motion is](#)

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(x_1) - \phi(1) \right\} G(1, 2) + i \int \nu(1, 3) G_2(1, 2, 3, 3^+) d3 = \hbar \delta(1 - 2).$$

Es gilt [It holds](#)

$$-\hbar \frac{\delta G(1, 2)}{\delta \phi(3)} = G_2(1, 2, 3, 3^+) - G(1, 2)G(3, 3^+).$$

Beweisidee: Abhängigkeit des Grundzustand $|N\rangle$ und des Feldoperators $\hat{\psi}$ vom externen Potential explizit ausdrücken, in Definition der Greenfunktion einsetzen, Funktionalableitung ausrechnen.

Proof idea: Both the ground state $|N\rangle$ and the field operator $\hat{\psi}$ contain implicitly the effect of the external potential ϕ . Extract the dependence and make it explicit. Substitute it into the Green's function definition. Evaluate the functional derivative.

Einsetzen für G_2 liefert die Bewegungsgleichung [Substituting for \$G_2\$ leads to](#)

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - H_0(x_1) - \phi(1) \right\} G(1, 2) - i\hbar \int \nu(1, 3) \frac{\delta G(1, 2)}{\delta \phi(3)} d3 + i \underbrace{\int \nu(1, 3) G(3, 3^+) d3}_{-V_H(1)} G(1, 2) = \hbar \delta(1 - 2)$$

Vergleich mit (H0) unter Beachtung von (7.139) liefert [Comparison with \(H0\) in conjunction with \(7.139\) shows that](#)

$$\int \Sigma(1, 3) G(3, 2) d3 = i\hbar \int \nu(1, 3) \frac{\delta G(1, 2)}{\delta \phi(3)} d3. \quad (7.140)$$

Die inverse Greenfunktion erfüllt [The inverse of the Green's function is defined by the identity](#)

$$\int G^{-1}(1, 3)G(3, 2) d3 = \delta(1 - 2) \Leftrightarrow G^{-1}G = I$$

[Then we can write](#)

$$\frac{\delta I}{\delta \phi} = 0 = \frac{G^{-1}G}{\delta \phi} = \frac{G^{-1}}{\delta \phi}G + G^{-1} \frac{G}{\delta \phi} \Rightarrow \frac{\delta G}{\phi} = -G \frac{\delta G^{-1}}{\delta \phi}G$$

d.h. [i.e.](#)

$$\frac{\delta G(1, 2)}{\delta \phi(3)} = - \int G(1, 4) \frac{\delta G^{-1}(4, 5)}{\delta \phi(3)} G(5, 2) d4 d5, \quad (7.141)$$

dies in (7.140) eingesetzt ergibt [Substituting this into 7.140 leads to](#)

$$\int \Sigma(1, 3) G(3, 2) d3 = -i\hbar \int \nu(1, 3) G(1, 4) \frac{\delta G^{-1}(4, 5)}{\delta \phi(3)} G(5, 2) d3 d4 d5.$$

Diese Gleichung erfordert, daß gilt [Obviously we have](#)

$$\Sigma(1, 2) = -i\hbar \int \nu(1, 4) G(1, 3) \frac{\delta G^{-1}(3, 2)}{\delta \phi(4)} d3 d4$$

Wir haben hiermit einen Ausdruck für die Selbstenergie gewonnen, der sich nach Potenzen des nackten Coulombpotentials ν entwickeln läßt. Es zeigt sich jedoch, daß diese Reihenentwicklung sehr langsam konvergiert, da die Elektronen im Festkörper durch die Abschirmung eine deutlich schwächere Wechselwirkung spüren. [This constitutes a formal solution of the problem when taken with Eq. \(7.139\).](#) The self-energy can be expanded in terms of ν . However, since this interaction is very strong and long range, one has to go to very high order in the series.

Das Gesamtpotential setzt sich aus externem Potential ϕ und dem Response der

Elektronen, d.h. dem Hartreepotential zusammen [The potential function \$V\$ is composed of the external potential and the Hartree potential](#)

$$V(x_1, t_1) = \phi(x_1, t_1) + \int \nu(x_1, x_2) \rho(x_2, t_1) dx_2.$$

Die Veränderung im externen Potential $\delta\phi$ ändert auch die Elektronendichte. Es ergibt sich [A change in the external potential \$\delta\phi\$ changes the charge density by \$\delta\rho\$ and will result in](#)

$$\delta V(x_1, x_2) = \delta\phi(x_1, t_1) + \int \nu(x_1, x_2) \delta\rho(x_2, t_1) dx_2$$

eine durch Abschirmung modifizierte Änderung des Gesamtpotentials. [i.e., a modified total potential that accounts for screening effects.](#)

Wir definieren nun die [inverse dielektrische Funktion \$\epsilon^{-1}\$](#) durch [We now define the inverse of the dielectric response as](#)

$$\epsilon^{-1}(1, 2) = \frac{\delta V(1)}{\delta\phi(2)}.$$

Mit δV von oben folgt [Substituting \$\delta V\$ we obtain](#)

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(1, 2) &= \delta(1 - 2) + \int \nu(x_1, x_3) \frac{\delta\rho(x_3, t_1)}{\delta\phi(x_2, t_2)} dx_3 \\ \Leftrightarrow \epsilon^{-1} &= \mathbf{1} + v \frac{\delta\rho}{\delta\phi} \\ &= \mathbf{1} + v \frac{\delta\rho}{\delta V} \underbrace{\frac{\delta V}{\delta\phi}}_{\epsilon^{-1}} \\ &= \mathbf{1} + v \frac{\delta\rho}{\delta V} \epsilon^{-1} \\ \Leftrightarrow \epsilon &= \mathbf{1} - v \frac{\delta\rho}{\delta V} \end{aligned} \tag{7.142}$$

Über die inverse dielektrische Funktion läßt sich das abgeschirmte Coloumbpotential [Next we introduce the the screened Coulomb interaction via](#)

$$W(1, 2) = \int \epsilon^{-1}(1, 3) \nu(3, 2) d3$$

$$\Leftrightarrow W = \epsilon^{-1} \nu$$

einführen. Wir definieren eine Polarisationsfunktion mittels [and define a polarisation propagator as](#)

$$\epsilon(1, 2) = \delta(1, 2) - \int \nu(1, 3) P(3, 2) d3$$

d.h. [or, in matrix notation](#)

$$\epsilon = \mathbb{1} - \nu P.$$

Der Vergleich mit (7.142) zeigt, daß $P = \frac{\delta \rho}{\delta V}$ bzw. ausgeschrieben [Comparison with Eq. \(7.142\) shows that \$P = \frac{\delta \rho}{\delta V}\$, i.e.,](#)

$$P(1, 2) = \frac{\delta \rho(1)}{\delta V(2)} = -i \frac{\delta G(1, 1^+)}{\delta V(2)}.$$

P entspricht unserer Vorstellung einer Polarisationsfunktion in der Tat. Unter Ausnutzung von (vgl. Gl. (7.141)) [Exploiting \(cf. Eq. 7.141\)](#)

$$\frac{\delta G(1, 2)}{\delta \phi(3)} = - \int G(1, 4) \frac{\delta G^{-1}(4, 5)}{\delta \phi(3)} G(5, 2) d4 d5$$

ergibt sich [one obtains](#)

$$P(1, 2) = i \int G(1, 3) \frac{\delta G^{-1}(3, 4)}{\delta V(2)} G(4, 1^+) d3 d4.$$

Wir führen als “Abkürzung” die Vertexfunktion Γ ein
[The functional derivative \$\frac{\delta G^{-1}}{\delta V}\$ appears so often that it is given a special name - the vertex function \$\Gamma\$](#)

$$\Gamma(1, 2, 3) := -\hbar \frac{\delta G^{-1}(1, 2)}{\delta V(3)}$$

und schreiben damit [thus we write](#)

$$P(1, 2) = -\frac{i}{\hbar} \int G(1, 3) \Gamma(3, 4, 2) G(4, 1^+) d3 d4. \quad (\text{H1})$$

Die Selbstenergie sieht dann wie folgt aus [With these definitions we return to the self-energy](#)

$$\begin{aligned} \Sigma(1, 2) &= -i\hbar \int \nu(1, 4) G(1, 3) \frac{\delta G^{-1}(3, 2)}{\delta \phi(4)} d3 d4 \\ &= -i\hbar \int \nu(1, 4) G(1, 3) \underbrace{\frac{\delta G^{-1}(3, 2)}{\delta V(5)}}_{-\frac{1}{\hbar} \Gamma(3, 2, 5)} \underbrace{\frac{\delta V(5)}{\delta \phi(4)}}_{\epsilon^{-1}(5, 4)} d3 d4 d5 \\ &= i \int \underbrace{\nu(1, 4) \epsilon^{-1}(5, 4)}_{W(1, 5)} G(1, 3) \Gamma(3, 2, 5) d3 d4 d5, \end{aligned}$$

d.h. [i.e.](#),

$$\Sigma(1, 2) = i \int W(1, 4) G(1, 3) \Gamma(3, 2, 4) d3 d4. \quad (\text{H2})$$

Invertierung der Bewegungsgleichung (H0) liefert [Inverting the EOM \(H0 leads to](#)

$$G^{-1} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 - V - \Sigma$$

d.h. [resulting in](#)

$$\Gamma(1, 2, 3) = -\frac{\delta G^{-1}(1, 2)}{\delta V(3)} = \delta(1-2)\delta(2-3) + \frac{\delta \Sigma(1, 2)}{\delta V(3)}.$$

Ausnutzen von [Exploit](#)

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma}{\delta V} &= \frac{\delta \Sigma}{\delta G} \underbrace{\frac{\delta G}{\delta V}}_{-\Gamma} \\ &= + \frac{\delta \Sigma}{\delta G} G \Gamma G \end{aligned}$$

führt auf [and write](#)

$$\Gamma(1, 2, 3) = \delta(1 - 2)\delta(2 - 3) + \int \frac{\delta \Sigma(1, 2)}{\delta G(4, 5)} G(4, 6) G(7, 5) \Gamma(6, 7, 3) d4d5d6d7.$$

(H3)

Aus $\epsilon = \mathbb{1} - vP$ und $\epsilon W = v$ folgt $(\mathbb{1} - vP)W = v$, d.h. $W = v + vPW$,
 ausgeschrieben

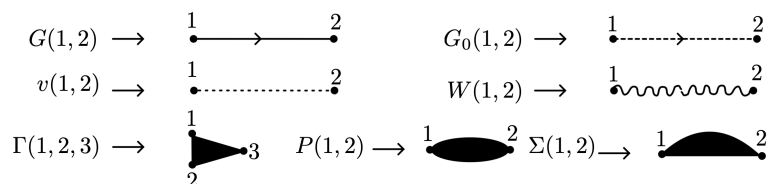
[From \$\epsilon = \mathbb{1} - vP\$ and \$\epsilon W = v\$ it follows that \$\(\mathbb{1} - vP\)W = v\$, i.e., \$W = v + vPW\$,
 or](#)

$$W(1, 2) = v(1, 2) + \int \nu(1, 3)P(3, 4)W(4, 2) d3 d4.$$

(H4)

(H1) bis (H4) bilden zusammen mit der Bewegungsgleichung der Greenschen Funktion (H0) das sogenannte fundamentale Gleichungssystem oder die Hedinschen Gleichungen, die formal eine exakte Lösung des Vielteilchenproblems sind.
[The formal solution to the interaction problem consists now of the set of five equations \(H0\) to \(H4\).](#)

Diagrammatische Übersetzung [Diagrammatic interpretation](#)



mit der Regel über interne Vertizes zu integrieren wird aus der Dyson-Gleichung der Greenfunktion **If we have the general rule that all internal vertices are integrated over, the Hedin equations read**

$$(H0) \rightarrow \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} = \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} + \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} \text{---} \overset{3}{\bullet} \text{---} \overset{4}{\bullet}$$

weitere gilt **and**

$$(H1) \rightarrow \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} = \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{3}{\bullet} \text{---} \overset{4}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet}$$

$$(H2) \rightarrow \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} = \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{3}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} \text{---} \overset{4}{\bullet}$$

$$(H4) \rightarrow \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} = \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} + \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{3}{\bullet} \text{---} \overset{4}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet}$$

Selbstenergie in GW-Approximation [GW approximation to the self-energy](#)

Das Fundamentale Gleichungssystem kann iterativ gelöst werden. Dazu startet man bei der Vertexfunktion **Start from (H3)**

$$\Gamma(1, 2, 3) = \delta(1 - 2)\delta(2 - 3) + \int \frac{\delta\Sigma(1, 2)}{\delta G(4, 5)} G(4, 6)G(7, 5)\Gamma(6, 7, 3) d4d5d6d7,$$

und vereinfacht diese zu **and simplify it to**

$$\Gamma(1, 2, 3) = \delta(1 - 2)\delta(2 - 3).$$

Mit dieser Näherung geht man in den Ausdruck für die Selbstenergie (H2) ein, welcher sich vereinfacht zu **With this approximation we enter (H2) which simplifies to**

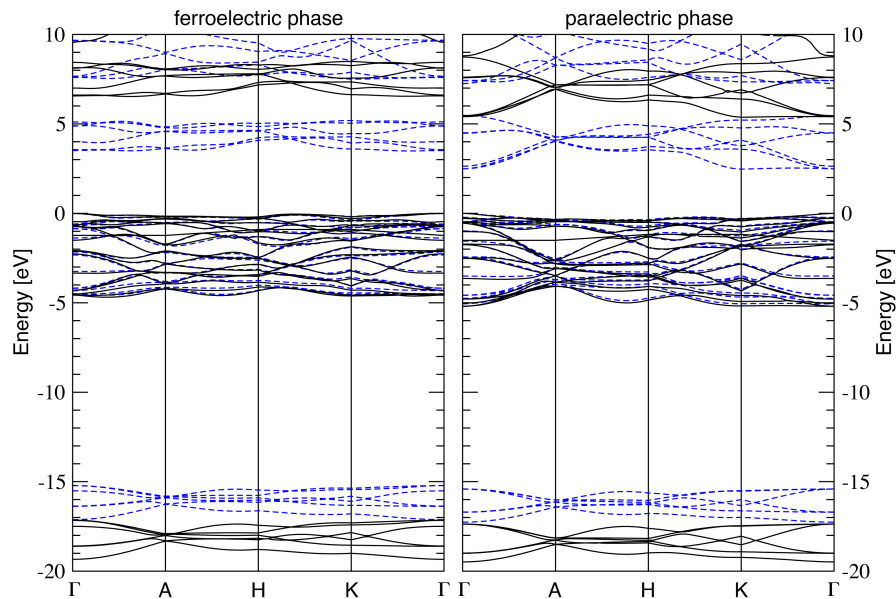
$$\Sigma(1, 2) = iG(1, 2) W(1, 2).$$

or graphically

$$\Sigma = \text{---} \overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet}$$

Das ist die sogenannte *GW*-Näherung der Selbstenergie. This is the so-called *GW* approximation to the self-energy.

Quasiparticle effects calculated within the *GW* approximation typically lead to a pronounced opening of the fundamental gap of semiconductors or the molecular HOMO-LUMO gap with respect to calculations assuming independent particles. This is the result of the self-energy shift, see Eq. 7.138. Shown below are corresponding calculations for lithium niobate, a frequently used optical material.



*Band structures of ferro- (left) and paraelectric lithium niobate (right) calculated within the independent-particle approximation (blue dashed lines) and using self-energy corrections calculated within the *GW* approximation (black solid lines). From W.G. Schmidt et al. Phys. Rev. B **77**, 035106 (2008).*