

Vorlesungsskript zur TP V

Frank Wilhelm-Mauch

17. Juli 2012

Vorwort

TBD

Teil I

Quantenmechanik für
Fortgeschrittene

Kapitel 1

Pfadintegrale

1.1 Definitionen und Konzepte ... muss nachgetragen werden

1.2 Quadratische Wirkung

1.2.1 Freies Teilchen und harmonischer Oszillator - wird nachgetragen

1.2.2 Vorfaktor vereinfacht - die deWitt-Morette Determinante

Für ein Teilchen mit quadratischer Wirkung wurde das entstehende Gaußsche Pfadintegral ausgerechnet und ergibt

$$\langle x_f | \hat{U}(t) | x_i \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar f(t)}} \exp(iS_{cl}/\hbar)$$

wobei S_{cl} die Wirkung entlang des klassischen Pfades ist und der Gelfand-Yaglom-Faktor f , der durch das Ausintegrieren aller Gaußschen Integrale entlang des Weges entsteht, das Anfangswertproblem

$$m\ddot{f} + c(t)f = 0 \quad f(0)=0, \dot{f}(0)=1 \quad (1.1)$$

löst. Hier ist $c(t)$ der Vorfaktor von $x^2/2$ in der Lagrangefunktion.

Wenn die Lagrangefunktion nicht von vornherein quadratisch ist, insbesondere für ein Teilchen in einem allgemeinen Potenzial

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)$$

entwickeln wir entlang der klassischen Lösung

$$S \simeq S_{cl} + \delta^2 S$$

wo wir genutzt haben, dass die klassische Lösung x_{cl} das Hamiltonsche Prinzip erfüllt, $\delta S|_{cl} = 0$. Entwicklung der klassischen Lagrangefunktion liefert für $y = x - x_{cl}$

$$\delta^2 S = \int dt \left(\frac{m}{2} \dot{y}^2 - \frac{1}{2} V''(x_{cl}) y^2 \right)$$

die linearen Terme heben sich mittels der Newtonschen Bewegungsgleichung weg. Damit ist im Sinne der obigen Rechnung $c(t) = V''(x_{cl}(t))$. Der Ausdruck für den Propagator gilt weiterhin, denn im Rahmen der Semiklassik ist die Wirkung ja weiterhin quadratisch!

Statt einer neuen Differenzialgleichung können wir dies auch mithilfe der De-Witt-Morette Determinante rechnen. Zu ihrer Konstruktion betrachten wir zunächst den Differenzialgleichungsteil von Gl. (1.1) und ignorieren die Anfangsbedingung. Offensichtlich ist $f_1(t) = \dot{x}_{cl}(t)$ eine Lösung, denn aus der Newtonschen Bewegungsgleichung $\ddot{x}_{cl} + V'(x_{cl}(t)) = 0$ erhalten wir die entsprechende Dgl durch weiteres Differenzieren nach der Zeit. Aber f_1 erfüllt nicht automatisch die Anfangsbedingung in Gl. (1.1). Wir benötigen eine zweite, linear unabhängige Lösung. Diese ist

$$f_2(t) = f_1(t) \int_0^t \frac{dt'}{f_1^2(t')}.$$

Wir können nämlich prüfen, dass $\dot{f}_2(t) = \dot{f}_1(t) \int_0^t \frac{dt'}{f_1^2(t')} + \frac{1}{f_1(t)}$ und damit

$$\ddot{f}_2(t) = \ddot{f}_1(t) \int_0^t \frac{dt'}{f_1^2(t')} + \frac{\dot{f}_1(t)}{f_1^2(t)} - \frac{\dot{f}_1(t)}{f_1^2(t)} = -c(t) f_2(t)$$

wobei wir genutzt haben, dass f_1 die betreffende Gleichung löst. Wir können jetzt leicht überprüfen, dass das vollständige Anfangswertproblem gelöst wird von $f(t) = f_1(0) f_2(t)$. Damit haben wir schon $f(t)$ durch die klassische Lösung ausgedrückt und müssen keine weitere Differenzialgleichung mehr lösen. Jetzt wollen wir diesen Ausdruck noch durch gängigere physikalische Größen ausdrücken.

Dazu berechnen wir

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_f} = \frac{\partial p(x_f)}{\partial x_i}.$$

Diesen Ausdruck können wir weiter umformen. Für ein Teilchen gilt

$$p(x_f) = \sqrt{2m(E - V(x_f))} \quad (1.2)$$

also

$$\frac{\partial p(x_f)}{\partial x_i} = \frac{m}{p(x_f)} \frac{\partial E}{\partial x_i}$$

Mit der in der ersten Übung gezeigten Identität aus dem Hamilton-Jacobi-Kalkül finden wir

$$\frac{\partial E}{\partial x_i} = - \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial t_f} = \frac{\partial p(x_i)}{\partial t_f} = \frac{m}{p(x_i)} \frac{\partial E}{\partial t_f}$$

Wobei wir im letzten Schritt die Auflösung (1.2) verwendet haben. Aus dem gleichen Ausdruck erhalten wir

$$t_f - t_i = \int dt = m \int \frac{dx}{p} = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_i}^{x_f} \frac{dx}{\sqrt{E-V(x)}}$$

woraus wir folgern können

$$\frac{\partial E}{\partial t_f} = \left(\frac{\partial t_f}{\partial E} \right)^{-1} = \left(-m \int_{x_i}^{x_f} \frac{dp}{p^2} \frac{\partial p}{\partial E} \right)^{-1} = \left(-m^2 \int_{x_i}^{x_f} \frac{dp}{p^3} \right)^{-1} = \left(-\frac{1}{m} \int_{t_i}^{t_f} \frac{dt}{\dot{x}_{\text{cl}}^2} \right)^{-1}$$

Damit haben wir das Integral in f_2 ausgedrückt und können alles zusammenbauen zu

$$f^{-1}(t_f) = \frac{1}{m} \left(-\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_f} \right)$$

Dieser Ausdruck heißt die Witt-Morette-Determinante (nach der mathematischen Physikerin Cécile de Witt-Morette). Damit ist der Propagator zu einer (exakt oder näherungsweise) quadratischen Wirkung

$$\langle x_f | \hat{U}(t) | x_i \rangle = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar m} \left(\frac{\partial^2 S_{\text{cl}}}{\partial x_i \partial x_f} \right)} \exp(iS_{\text{cl}}/\hbar)$$

Das sieht also aus wie anständige Störungstheorie in den Abweichungen von der klassischen Lösung - die niedrigste nichttriviale Ordnung (also Semiklassik) wird ausgedrückt durch rein klassische Größen.

1.2.3 Die Phase des des semiklassischen Propagators

Der Ausdruck $\frac{\partial^2 S_{\text{cl}}}{\partial x_i \partial x_f} = mf^{-1}$ ist (als klassische Größe) reell, hat aber zunächst ein unbestimmtes Vorzeichen. Da daraus eine Wurzel gezogen wird, müssen wir seine Vorzeichenwechsel diskutieren. Diese geschehen immer dann, wenn f eine Nullstelle hat. Diese Stellen heißen konjugierte Punkte und treten z.B. auf, wenn $\dot{x}_{\text{cl}} = 0$ ist. Wir können sie auch als Fokuspunkte im Phasenraum, also Punkte, an denen sich viele mögliche Trajektorien treffen, ansehen. Bei kurzen Strecken, $x_f \rightarrow x_i$ ist die Bewegung ähnlich eines freien Teilchens, dann ist $f > 0$. Wenn wir S als Funktion von x_f anschauen, beginnt es also positiv, wird am nächsten Fokuspunkt negativ etc. Wir wollen die komplexe Wurzel so interpretieren, dass der Propagator als Funktion des Endpunkts stetig ist, also benutzen wir eine schraubenförmige Riemann-Fläche. Kurz und gut, wenn die klassische Trajektorie n Fokuspunkte hat, dann

$$\langle x_f | \hat{U}(t) | x_i \rangle = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar m} \left| \frac{\partial^2 S_{\text{cl}}}{\partial x_i \partial x_f} \right|} e^{-in\pi/2} \exp(iS_{\text{cl}}/\hbar) \quad (1.3)$$

Wenn Ihnen die Fokuspunkte ungewohnt vorkommen: Die Interpretation einer analogen Größe wird später sehr klar sein.

1.2.4 Energieabhängiger Propagator

Die Pfadintegrale, die wir bisher ausgerechnet haben, spielen sich immer zwischen zwei festgelegten Raumzeit-Punkten ab, entsprechend dem Lagrange-Variationsproblem in der klassischen Mechanik. In der konventionellen Formulierung der Quantenmechanik (und in Experimenten) interessieren wir uns eher für die Festlegung der Energie und des Anfangspunktes. Dies können wir übertragen in der Form

$$\begin{aligned} \langle x_f | \hat{U}(E) | x_i \rangle &= \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar} \langle x_f | \hat{U}(t) | x_i \rangle \\ &= \sum_n \int_0^\infty dt e^{i(E-E_n)t/\hbar} \langle x_f | \phi_n \rangle \langle \phi_n | x_i \rangle \\ &= \sum_n \frac{i}{E_n - E} \phi_n^*(x_i) \phi_n(x_f) \end{aligned} \quad (1.4)$$

wobei wir benutzt haben, dass die Energie-Eigenzustände $|\phi_n\rangle$ eine vollständige Basis sind und der Zeitentwicklungsoperator in ihnen diagonal ist, $\hat{U}(t) = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|e^{-iE_n t/\hbar}$. Wir sehen, dass dieser Zeitentwicklungsoperator Pole an den Eigenenergien des Systems hat, und dass das Residuum an diesen Polen erlaubt, die Wellenfunktionen $\phi_n(x)$ abzulesen.

1.2.5 Semiklassischer Propagator bei fester Energie

Um jetzt Näherungen an E_n und ϕ_n auf semiklassischem Niveau zu erhalten, bauen wir die Gleichungen (1.3) und (1.4) zusammen zu

$$\langle x_f | \hat{U}_{\text{WKB}}(E) | x_i \rangle = \int_0^\infty dt \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar m} \left| \frac{\partial^2 S_{\text{cl}}}{\partial x_i \partial x_f} \right|} e^{-in\pi/2} \exp(i[S_{\text{cl}} + Et]/\hbar) \quad (1.5)$$

Der Index WKB wird benutzt, weil unser Ergebnis äquivalent zur semiklassischen Wenzel-Kramers-Brillouin-Näherung sein wird.

Die Zeitintegration können wir in der Sattelpunktsnäherung durchführen. Warum? Wenn wir bei festen Anfangs- und Endpunkten die Zeit etwas ändern, ändern wir die klassische Trajektorie. Im semiklassischen Regime ändern wir damit die Wirkung um viele \hbar , d.h., der Integrand ist in der Tat stark oszillierend. Die Bedingung an den Sattelpunkt ist

$$E = -\frac{\partial S(t_0)}{\partial t}. \quad (1.6)$$

Damit ist das Sattelpunktsintegral

$$\langle x_f | \hat{U}_{\text{WKB}}(E) | x_i \rangle = \sqrt{\frac{i}{2\pi\hbar}} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 S_{\text{cl}}}{\partial x_i \partial x_f} \right|} e^{i\frac{Et_0 + S_{\text{cl}}(t_0)}{\hbar}} e^{-i\frac{n\pi}{2}} \int_0^\infty dt e^{\frac{i}{2\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} (t-t_0)^2} \quad (1.7)$$

Das ist ein einfaches Gaußintegral (der übliche semiklassische Limes garantiert, dass t_0 groß genug ist, so dass der fehlende negative Teil des Integrationsintervalls keine Rolle spielt). Wenn wir dieses Berechnen, tritt im Vorfaktor der Ausdruck $\sqrt{\tilde{D}}$ auf, wobei

$$\sqrt{\tilde{D}} = \frac{\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_i \partial x_f}}{\frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial t^2}} \quad (1.8)$$

ist. Zur Umformung dieses Ausdrucks bringen wir die Phase des Integrals (1.5) bzw. des energieabhängigen Propagators (1.7), $W(x_i, x_f, E) = Et + S$. Aufgrund der Sattelpunktsbedingung (1.6) ist der Übergang von E zu W eine Legendretransformation, und wir können damit ähnlich vorgehen, wie bei Ableitungen in der Thermodynamik, wobei E und t ein Paar konjugierter Variable bilden. Damit ist auch

$$\frac{\partial W}{\partial E} = t \quad (1.9)$$

Ferner können wir ausrechnen

$$\frac{\partial S}{\partial x_f} \Big|_t = \frac{\partial W}{\partial x_f} \Big|_t - \frac{\partial E}{\partial x_f} \Big|_t t = \frac{\partial W}{\partial x_f} + \frac{\partial W}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial x_f} \Big|_t - \frac{\partial E}{\partial x_f} \Big|_t t = \frac{\partial W}{\partial x_f} \quad (1.10)$$

wobei wir im letzten Schritt (1.9) verwendet haben. Das Gleiche gilt für $\frac{\partial S}{\partial x_i}$. Dadurch ermutigt, machen wir uns an die zweiten Ableitungen

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_f} \Big|_t = \frac{\partial^2 W}{\partial x_i \partial x_f} + \frac{\partial^2 W}{\partial x_f \partial E} \frac{\partial E}{\partial x_i}$$

Zur Umformung dieses Ausdrucks brauchen wir nicht die Hilfsidentität

$$\frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x_i} \Big|_t = \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x_i} + \frac{\partial^2 W}{\partial^2 E} \frac{\partial E}{\partial x_i} = 0$$

wobei sich das letzte Gleichzeichen aus Gl. (1.9) ergibt. Beide Formeln zusammgeführt erhalten wir

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_f} \Big|_t = \frac{\partial^2 W}{\partial x_i \partial x_f} - \frac{\partial^2 W}{\partial x_f \partial E} \frac{\partial^2 W}{\partial x_i \partial E} \left(\frac{\partial^2 W}{\partial^2 E} \right)^{-1} \quad (1.11)$$

Jetzt kümmern wir uns um die zweite Ableitung

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = -\frac{\partial E}{\partial t} = -\left(\frac{\partial t}{\partial E} \right)^{-1} = -\left(\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \right)^{-1} \quad (1.12)$$

wo wir Gln. (1.6) und (1.9) benutzt haben. Damit können wir aus Gleichungen (1.8)(1.11)(1.12) \tilde{D} als Determinante schreiben

$$\tilde{D} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 W}{\partial x_i \partial x_f} & \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x_i} \\ \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x_f} & \frac{\partial^2 W}{\partial E^2} \end{vmatrix}.$$

Nun wollen wir diesem Ausdruck physikalisches Leben einhauchen. Wir starten von der Hamilton-Jacoby-Gleichung für die Hamiltonfunktion H

$$E = H\left(\frac{\partial W}{\partial x_f}, x_f\right) \quad p_f = \frac{\partial W}{\partial x_f}$$

Diese differenzieren wir nach x_i

$$\frac{\partial H}{\partial p_f} \frac{\partial^2 W}{\partial x_i \partial x_f} = \dot{x}_f \frac{\partial^2 W}{\partial x_i \partial x_f} = 0$$

wobei wir die Hamiltonsche Bewegungsgleichung genutzt haben. Damit verschwindet ein Term in \tilde{D} . Der andere kann umgeformt werden mit

$$\frac{\partial}{\partial E} \frac{\partial W}{\partial x_{i/f}} = \mp \frac{\partial p_{i/f}}{\partial E} = \mp \left(\frac{\partial E}{\partial p_{i/f}}\right)^{-1} = \mp \frac{1}{\dot{x}_{i/f}}$$

also $\tilde{D} = (\dot{x}_i \dot{x}_f)^{-1}$. Die Diskussion über die Phase des Propagators ist analog zu der oben. Die Punkte, an denen \tilde{D} das Vorzeichen wechselt sind jetzt die, an denen \dot{x} verschwindet, also die klassischen Umkehrpunkte. Deren Zahl nennen wir \tilde{n} .

Bisher haben wir immer den Beitrag *eines* einzigen klassischen Pfades zum semiklassischen Propagator aufgeschrieben. Wir sehen, dass das insbesondere bei konstanter Energie zu kurz gesprungen ist: Bei einer gebundenen Bewegung, z.B., kehrt das System periodisch zum Ausgangspunkt zurück. Damit gibt es unendlich viele Pfade, numeriert durch j und wir haben

$$\langle x_f | \hat{U}_{\text{WKB}}(E) | x_i \rangle = \sum_j \frac{1}{\sqrt{\dot{x}_{i,j} \dot{x}_{f,j}}} e^{-i\tilde{n}_j \pi/2} e^{iW_j/\hbar} \quad (1.13)$$

Bevor wir die Pfade weiter klassifizieren, wollen wir uns die Wirkungsbeiträge $W_j(x_i, x_f, E)$ anschauen. Wir integrieren

$$W_j = \int_{x_0}^{x_f} dx_f \frac{\partial W}{\partial x_f} + \int_{x_0}^{x_i} dx_i \frac{\partial W}{\partial x_i} + \text{const.}$$

für einen beliebigen Bezugspunkt x_0 und nutzen Gleichung (1.10) zur um zu sehen

$$\frac{\partial W}{\partial x_{f/i}} = \frac{\partial S}{\partial x_{f/i}} = \pm p_{f/i} = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}$$

wobei im letzten Schritt noch Energieerhaltung genutzt wurde. Wir definieren $w(x, E) = \int_{x_0}^x dx' \sqrt{2m(E - V)}$ und schreiben damit $W_j = w(x_f, E) - w(x_i, E)$ bis auf eine globale Phase.

Jetzt wollen wir für eine gebundene Bewegung zwischen zwei Umkehrpunkten x_L und x_R mit $x_L \leq x \leq x_R$ diskutieren und wählen $x_0 = x_L$. Für die Wirkung eines vollen Umlaufs definieren wir

$$J = 2 \oint dx p(x, E) = 2 \oint dx \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (1.14)$$

Wir können vier primitive Pfade ausmachen:

1. Direkte Bewegung $x_i \rightarrow x_f$, $W_1(0) = w(x_f) - w(x_i)$
2. Bewegung über den linken Umkehrpunkt $x_i \rightarrow x_L \rightarrow x_f$, $W_2(0) = w(x_f) + w(x_i) + \frac{\pi}{2}$
3. Bewegung über den rechten Umkehrpunkt $x_i \rightarrow x_R \rightarrow x_f$, $W_3(0) = J - w(x_f) - w(x_i) + \frac{\pi}{2}$
4. Bewegung über beide Umkehrpunkte $x_i \rightarrow x_L \rightarrow x_R \rightarrow x_f$, $W_4(0) = J + w(x_f) + w(x_i) + \pi$

Wenn noch zusätzlich n periodische Umläufe dazukommen, kommt noch n mal die Wirkung J dazu, sowie $n\pi$ wegen der zwei Umkehrpunkte pro Umlauf, und wir finden für $j = 1 \dots 4$ $W_j(n) = W_j(0) + n(J - \pi\hbar)$. Da die Eigenschaften von Anfangs- und Endpunkt nicht von der Zahl der Umläufe abhängen, können wir damit Gleichung (1.13) ausbuchstabieren als

$$\begin{aligned} \langle x_f | \hat{U}_{\text{WKB}}(E) | x_i \rangle &= \sum_{j=1}^4 \frac{1}{\sqrt{\dot{x}_{i,j} \dot{x}_{f,j}}} e^{iW_j(0)/\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} e^{i(J/\hbar - \pi)n} \\ &= \sum_{j=1}^4 \frac{1}{\sqrt{\dot{x}_{i,j} \dot{x}_{f,j}}} e^{iW_j(0)/\hbar} \frac{1}{1 - e^{i(J/\hbar - \pi)}} \end{aligned}$$

wobei wir am Ende eine geometrische Reihe aufsummiert haben. Die Konvergenz einer solchen geometrischen Reihe auf dem komplexen Einheitskreis erfordert es, J einen infinitesimalen positiven Imaginärteil zu geben. Nach Gleichung (1.4) interessieren uns die Pole dieses Ausdrucks, die auftreten bei $J(E_n) = 2\pi\hbar(n + 1/2)$. Diese Bedingung lässt sich mittels (1.14) interpretieren als die an eine stehende Welle: Die Strephasen an den Rändern π und die über den Bereich der Bewegung integrierte Wellenzahl J müssen sich zu einer ganzen Zahl Wellenzüge addieren. Das Residuum des letzten Terms ist die Umlaufzeit τ_n

$$\begin{aligned} \frac{1}{\frac{\partial}{\partial E} [1 - e^{i(J/\hbar - \pi)}] |_{J=2\pi\hbar(n+1/2)}} &= \left(-i \frac{\partial J}{\partial E} \right)^{-1} = i \left(\frac{\partial}{\partial E} \oint dx \sqrt{2m(E - V(x))} \right)^{-1} \\ &= i \left(\oint dx \sqrt{\frac{m}{2(E_n - V(x))}} \right)^{-1} = i/\tau_n. \end{aligned}$$

Als nächstes brauchen wir den Wir brauchen noch den Vorfaktor

$$\dot{x}_{i/f} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(x_{i/f}))}$$

der erfreulicherweise nur von Anfangs und Endpunkten abhängt, nicht aber von der Trajektorie j . Jetzt müssen wir noch die $e^{iW_j(0)/\hbar}$ aufsummieren. Dies können wir als Produkt von Sinusfunktionen schreiben

$$\langle x_f | \hat{U}_{\text{WKB}}(E) | x_i \rangle = i\hbar \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_n \frac{1}{E - E_n} \frac{1}{\tau_n} \frac{2 \sin\left(\frac{w(x_i, E_n)}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right)}{(E_n - V(x_i))^{1/4}} \frac{2 \sin\left(\frac{w(x_f, E_n)}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right)}{(E_n - V(x_f))^{1/4}}.$$

Durch Vergleich mit (1.4) können wir leicht die semiklassischen Wellenfunktionen ablesen. Wir können das wie folgt interpretieren: Die Wellenfunktion ist eine Ebene Welle mit ortsabhängiger Wellenzahl $k = \partial w / \partial x$. Dies sollte gelten, wann immer das Potenzial sich langsam, adiabatisch, verändert verglichen mit der effektiven Wellenlänge - sonst gäbe es Beugungserscheinungen. Die lokale Aufenthaltswahrscheinlichkeit steigt je langsamer das Teilchen klassisch ist bis zu einer integrierbaren (Wurzel-) Singularität an den klassischen Umkehrpunkten. Diese Niveau der Quantenmechanik heißt auch Wenzel-Kramers-Brillouin (WKB)-Theorie. WKB haben allerdings eine asymptotische Entwicklung von Differenzialgleichungen zur Herleitung verwendet.

1.2.6 Semiklassische Streutheorie, Tunneln

1.3 Pfadintegrale in der statistischen Mechanik

Integration über alle verfügbaren Zwischenzustände, wie wir sie für Pfadintegrale gesehen haben, ist nichts neues: In der Statistischen Mechanik macht man das auch so. Im kanonischen Formalismus ist die Zustandssumme $Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right)$ wobei $\beta = (k_B T)^{-1}$ die mit der Boltzmannkonstante skalierte Temperatur ist. Dieser Ausdruck hat eine bemerkenswerte Ähnlichkeit mit dem Zeitentwicklungsoperator, allerdings in (formal) imaginärer Zeit

$$Z = \int dx \langle x | \hat{U}(-i\hbar\beta) | x \rangle$$

wobei die Integration über x sämtliche Freiheitsgrade des statistischen Systems beinhaltet. Die analytische Fortsetzung des Zeitentwicklungsoperators in imaginäre Zeit ist ein beliebter Rechenrick in der Quantenstatistik und heißt Wick-Rotation. Wir setzen jetzt einfach die Pfadintegralformel für den Zeitentwicklungsoperator ein und erhalten folgende Kurzschreibweise

$$Z = \oint_{x(0)=x(i\hbar\beta)} \mathcal{D}x(\tau) e^{-S_E[x(\tau)]/\hbar} \quad (1.15)$$

wobei wir definiert haben, dass \oint bedeutet, dass wir über alle geschlossenen Pfade (aber mit dann beliebigem Anfangspunkt) integrieren. S^E heißt euklidische Wirkung des Systems. Sie geht aus der normalen Wirkung durch die Einführung von Imaginärzeit hervor. Wir sehen gleich Beispiele.

1.3.1 Pfadintegrale für das ideale Gas

Für das ideale (nichtwechselwirkende) Gas mit N Teilchen nennen wir die Zustandssumme Z_N und sie faktorisiert $Z_N = (Z_1)^N$, wobei in Gleichung (1.15) das die Variable $x(\tau)$ Einteilchenpfade beschreibt und die Euklidische Wirkung

$$S^E = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\partial x}{\partial \tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right)$$

Erliegen Sie nicht der Versuchung, den Integranden für den Hamilton zu halten! Es ist zwar tatsächlich ein Pluszeichen zwischen kinetischer und potenzieller Energie, allerdings sind die Variablen weiterhin Koordinate und Geschwindigkeit, nicht Koordinate und Impuls. Wir könnten mit dieser Wirkung z.B. Semiklassik betreiben. Das funktioniert wie oben, allerdings findet die Bewegungsgleichung jetzt im umgedrehten Potenzial $-V(x)$ statt. Alles konvergiert viel schneller - wo sich vorher Integranden wegoszillieren mussten liefert hier der reelle Exponent ein einfaches Abfallen. Wir können es aber noch simpler machen: Für ideale Gase aus dem Lehrbuch haben wir ja überhaupt kein Potenzial, $V = 0$, und das Pfadintegral ist einfach das für das freie Teilchen auf einem periodischen Pfad - und der einzige periodische klassische Pfad des freien Teilchens ist der, der einfach am Anfangspunkt sitzt. Damit haben wir für das ideale Gas ohne Potenzial

$$Z_1 = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}}$$

wie gewohnt. Wenn das Potenzial jetzt in der Umgebung dieses Punktes sich nur schwach verändert, dann ist die führende Korrektur einfach die Wirkung entlang dieses trivialen periodischen Pfades und wir erhalten

$$Z_1 = \int dx \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}} e^{-\beta V(x)}$$

woraus wir z.B. leicht die barometrische Höhenformel ableiten könnten. Korrekturen dazu, z.B. der Fluktuationsbeitrag in der Semiklassik, führen zur Wigner-Kirkwood-Entwicklung. Das wollen wir aber nicht vertiefen.

1.3.2 Berechnung von Erwartungswerten

In der statistischen Mechanik einfacher Systeme muss man oft nicht viel mehr als die Zustandssumme ausrechnen, weil sich alles andere aus ihr ergibt. Wir können z.B. den Erwartungswert der Energie immer so bestimmen

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(\hat{H} e^{-\beta \hat{H}} \right) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right) = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}$$

Man sagt, wir nehmen die Zustandssumme als Erzeugendenfunktion für den Erwartungswert der Energie. Das geht nicht immer gut, z.B. könnten wir nicht ohne weiteres den Erwartungswert der Koordinate x ausrechnen. Was folgt lässt sich auf die meisten anderen Observablen verallgemeinern: Wir erweitern die euklidische Wirkung wie folgt

$$S^E \rightarrow S_j^E = S^E + S^j \quad S^j = \int d\tau \, x(\tau) j(\tau) \quad (1.16)$$

hier nennen wir $j(\tau)$ das Quellfeld zu $x(\tau)$. Daraus können wir wiederum mittels (1.15) eine Wirkung $Z[j]$ ausrechnen, die wir das Erzeugendenfunktional für x nennen. Der Charme dieser Konstruktion liegt darin, dass wir durch

die Addition dieses linearen Terms die Wirkung nicht komplizierter machen - wenn sie quadratisch war, bleibt sie quadratisch. Natürlich ist das Quellfeld nur ein Hilfskonstrukt und darf im endgültigen Ausdruck nicht vorkommen. In der Tat können wir eine beliebige n - Punkt Korrelationsfunktion schreiben als

$$\begin{aligned} G^{(n)}(\tau_1, \dots, \tau_n) &= \langle x(\tau_1) \dots x(\tau_n) \rangle = \oint |\mathcal{D}x(\tau) x(\tau_1) \dots x(\tau_n) e^{-S_j^E[x,j]/\hbar} \\ &= \lim_{j \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial x(\tau_1)} \dots \frac{\partial}{\partial x(\tau_n)} Z[j] \end{aligned}$$

1.3.3 Erwartungswerte für den thermischen harmonischen Oszillator

Wir betrachten jetzt diese Konstruktion am Beispiel des harmonischen Oszillators. Dieser steht sinnbildlich für alle quadratischen Wirkungen und führt uns zu dem in der Störungstheorie wichtigen Wick-Theorem. Die nach (1.16) erweiterte Wirkung lässt sich weiter in klassische und Fluktuationsterme aufteilen. Wir schreiben das Erzeugendenfunktional getrennt in klassische Beiträge und Fluktuationen als

$$Z[j] = e^{-S_{cl}^E F}$$

Hier ist wichtig, dass wir als klassischen Pfad den nehmen, der nicht durch j gestört ist - das ist einfacher und praktischer bei der Berechnung von Erwartungswerten. Damit schreiben wir einfach

$$S_{cl}^j = - \int dx x_{cl}(\tau) j(\tau).$$

Der fluktuierende Anteil kann geschrieben werden als

$$S_{fl} = \frac{m}{2} \int d\tau d\tau' \delta x(\tau) D(\tau, \tau') \delta x(\tau') + \int d\tau \delta x(\tau) j(\tau)$$

Hier haben wir den künstlich aufgeblasenen Differenzialoperator

$$D = (-\partial_\tau^2 - \omega^2) \delta(\tau - \tau')$$

eingeführt, indem wir einmal parziell integriert haben. Dies wollen wir quadratisch ergänzen. Dazu benutzen wir die Greensche Funktion des harmonischen Oszillators G , die gerade das Inverse von D im Sinne

$$\int dt_3 D(t_1, t_3) G(t_3, t_2) = \delta(t_1 - t_2)$$

ist. Die quadratische Ergänzung ist dann

$$\delta \tilde{x} = \delta x + \frac{1}{m} \int d\tau G(\tau, \tau') j(\tau').$$

Da keine Umskalierung stattfindet ist das Integralmaß dasselbe, $\mathcal{D}\delta x = \mathcal{D}\delta\tilde{x}$ und nach der quadratischen Ergänzung bleibt die Wirkung

$$S_{\text{fl}} = \int d\tau d\tau' \left[\frac{m}{2} \delta\tilde{x}(\tau) D(\tau, \tau') \delta\tilde{x}(\tau') - \frac{1}{2m} \delta x(\tau') G(\tau', \tau) \delta x(\tau) \right].$$

Damit können wir die Gaußintegrale für $\delta\tilde{x}$ wie gewohnt ausintegrieren und erhalten die gewohnte Fluktuationsamplitude und insgesamt

$$Z[j] = Z e^{-S_{\text{cl}}^j/\hbar} \exp\left(-\frac{1}{2m} \int d\tau d\tau' \delta x(\tau') G(\tau', \tau) \delta x(\tau)\right)$$

Damit können Sie z.B. das Wick-Theorem beweisen (Übung).

Wir schauen und jetzt das ganze explizit für den thermischen Oszillator an, indem wir die Ergebnisse für Realzeit analytisch fortsetzen. Der Vorfaktor, berechnet bei $j = 0$ konstruiert sich aus

$$\langle x_f | \hat{U}(-i\hbar\beta) | x_i \rangle = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi\hbar\sinh\hbar\omega\beta}} e^{-S_{\text{cl}}^E/\hbar}$$

mit

$$S_{\text{cl}}^E = \frac{M\omega}{2\sinh\hbar\omega\beta} [(x_f^2 + x_i^2) \cosh\hbar\omega\beta - 2x_f x_i]$$

Für die Zustandssumme brauchen wir $x_i = x_f$ und müssen über die Spur bilden. Wir nützen dass $\cosh x - 1 = \cosh^2\left(\frac{x}{2}\right)$, berechnen das Gaußintegral und finden als Zustandssumme $Z = (2\sinh\hbar\omega/2)^{-1}$. Für den klassischen Quellbeitrag haben wir aus einer einfachen Zerlegung der klassischen Trajektorie die Darstellung

$$S_{\text{cl}}^j = -\frac{m\omega}{\sinh\hbar\omega\beta} [x_f (e^{-\beta\hbar\omega} A_e - B_e) + x_i (e^{-\beta\hbar\omega} A_e - B_e)]$$

wobei wir die 'Fouriertransformierten'

$$\begin{aligned} A_e &= \frac{1}{m\omega} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{-\omega\tau} j(\tau) \\ B_e &= \frac{1}{m\omega} \int_0^{\hbar\omega} d\tau e^{-\omega(\hbar\beta-\tau)} j(\tau) \end{aligned}$$

definiert haben. Bei der Greensfunktion müssen wir beachten, dass sie die Randbedingungen $G(\tau, 0) = G(i\hbar\beta, 0) = 0$ erfüllt. Dies erreichen wir durch entsprechendes Addieren freier Lösungen. Am Ende des Tages steht da mit der periodischen Greensfunktion

$$G(\tau) = \frac{1}{2\omega} \frac{\cosh\omega(|\tau| - \hbar\beta/2)}{\sinh\hbar\omega\beta/2}$$

der Ausdruck

$$Z[j] = Z \exp\left(-\frac{1}{2m} \int d\tau d\tau' G(\tau - \tau') j(\tau) j(\tau')\right)$$

Damit können wir z.B. ausrechnen den Erwartungswert von x^2 als

$$\langle x(\tau)x(\tau) \rangle = -\frac{1}{2m}G(0) = \frac{1}{4m\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) = \frac{1}{4m\omega} (1 + 2n_B(\omega))$$

wobei $n_B(\omega)$ die Bosefunktion ist. Das ist das nach dem Gleichverteilungssatz erwartete Ergebnis.

Kapitel 2

Zweite Quantisierung

2.1 Mehrteilchenzustände

Die abstrakten Quantenzustände eines einzelnen Systems schreiben wir in Diracnotation $|\psi\rangle$. Diese Zustände sind Elemente eines Hilbertraums \mathcal{H} . Alle solche Vektoren können wir als Linearkombination von Basisvektoren $\{|n\rangle\}$ schreiben. Um die Basis eines Vielteilchenzustands (aus unterscheidbaren Quantensystemen) zu schreiben können wir z.B. einfach einen Produktzustand schreiben in folgenden äquivalenten Schreibweisen

$$|n_1\rangle|n_2\rangle\cdots \equiv |n_1\rangle\otimes|n_2\rangle\cdots \equiv |n_1n_2\dots\rangle \quad (2.1)$$

hierbei sind die $|n_i\rangle$ Basisvektoren der verschiedenen Komponentensysteme (deren Basis natürlich nicht die gleiche sein muss, stellen Sie sich z.B. einen Spin und ein Teilchen vor). Den Hilbertraum, aus dem diese Zustände genommen sind, nennt man Tensorproduktraum und schreibt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots$. Als Beispiel können Sie sich zwei Spin-1/2 anschauen, deren jeweilige Basiszustände $|0\rangle$ und $|1\rangle$ sind. Die Basis des zwei-Spin-Systems ist dann $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Das ist aber nicht die einzige Basis. Populär ist z.B. die Bell-Basis $\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \right\}$.

Schauen wir uns jetzt ein System aus N identischen Teilchen an, z.B. Elektronen, Protonen, Photononen, W-Bosonen etc. Wenn wir seinen Zustand im Ortsraum darstellen (das Argument würde in jeder Basis gelten, ist in der Ortsbasis aber am transparentesten), so muss der Zustand nach obigem Argument als Wellenfunktion mit $3N$ Koordinaten geschrieben werden

$$\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

Wenn die Teilchen identisch sind heißt das, dass man sie nicht unterscheiden kann, d.h. für beliebige i, j muss gelten

$$|\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N)|^2 = |\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N)|^2$$

das heißt, beim Vertauschen von zwei Teilchen kann die Wellenfunktion höchstens einen Phasenfaktor aufsammeln

$$\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = \phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N) e^{i\phi} \quad (2.2)$$

Das Spin-Statistik-Theorem sagt jetzt, dass für Bosonen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) $\phi = 0$ ist, während für Fermionen (Teilchen mit halbzahligem Spin) $\phi = \pi$. Wir werden keinen detaillierten Beweis vorlegen, werden aber sehen, dass der Fermionische Fall zwanglos aus der relativistischen Theorie von Elektronen, der Diracgleichung, folgt. Warum können keine anderen Phasen auftreten? Heuristisch können wir sehen, dass das zweimalige Vertauschen von Teilchen äquivalent ist dazu, ein Teilchen um ein anderes herumzubewegen. Nach Gleichung (2.2) entsteht dabei eine Phase von 2ϕ . Eine solche geschlossene Trajektorie können wir, indem wir in die dritte Dimension ausweichen, aber kontinuierlich zu einem Punkt zusammenziehen, d.h. vernichten. Darum darf sich bei einem solchen Doppeltausch nichts ändern und es muss gelten $2\phi = 0 \pmod{2\pi}$. Damit gibt es nur die beiden schon genannten Möglichkeiten. Beachten Sie: In zwei Dimensionen funktioniert dieses Argument nicht. In der Tat treten in zweidimensionalen Systemen, z.B. im fraktionalen Quanten-Hall Effekt, auch andere Phasen, typischerweise gebrochenezahlige Vielfache von π . Die entsprechenden (quasi) Teilchen heißen Anyonen.

Wir sehen als direkte Konsequenz dieser Symmetrie das Pauli-Prinzip für Fermionen. Wenn $\vec{r}_i = \vec{r}_j$ und $\phi = \pi$, dann folgt aus Gl. (2.2) dass

$$\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}, \dots, \vec{r}, \dots, \vec{r}_N) = -\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}, \dots, \vec{r}, \dots, \vec{r}_N) = 0.$$

Wie bauen wir jetzt eine Basis aller erlaubten Zustände für Fermionen und Bosonen auf? Wir starten wieder von der Produktbasis Gl. (2.1) und machen sie antisymmetrisch. Ein total antisymmetriertes Produkt kann man als Determinante schreiben

$$|i_1 i_2 \dots i_N\rangle = \det \begin{pmatrix} \phi_1(\vec{r}_{i_1}) & \phi_2(\vec{r}_{i_1}) & \dots & \phi_N(\vec{r}_{i_1}) \\ \phi_1(\vec{r}_{i_2}) & \phi_2(\vec{r}_{i_2}) & \dots & \phi_N(\vec{r}_{i_2}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\vec{r}_{i_N}) & \phi_2(\vec{r}_{i_N}) & \dots & \phi_N(\vec{r}_{i_N}) \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

diese heißt Slaterdeterminante. Wir sehen automatisch, dass wenn ein Indexpaar der i_j gleich ist, verschwindet die Determinante. Für Bosonen nehmen wir die Slater-Permutante, d.h. anstatt in der Entwicklung der Größe noch mit dem Signum der entsprechenden Permutation der Zeilen zu multiplizieren, addieren wir einfach alle Terme.

Dies sind sehr umständliche Zustände! Sie werden durchaus z.B. in der theoretischen Chemie verwendet. Allerdings sind die Operatoren, die in der Quantenmechanik als Observable, insbesondere im Hamilton, auftreten, meist viel einfacher, da sie entweder Ein- oder Zweiteilchencharakter haben. Wir suchen deshalb eine Schreibweise, die die (Anti)Symmetrie des Zustandes natürlich enthält und zu einfachen Ausdrücken für diese Operatoren führt.

2.2 Zweite Quantisierung, Grundbegriffe

Wenn wir zurück auf die Slaterdeterminante Gl. (2.3) schauen sehen wir, dass tatsächlich nicht zugeordnet kann, welches Elektron (gegeben durch seine Position in der Liste $\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N$) in welchem Zustand ist sondern nur, welche Basiszustände $\{i_1, \dots, i_N\}$ wir ausgewählt haben - es zählen die Werte, nicht die Reihenfolge dieser Quantenzahlen. Wir können also $|i_1 i_2 \dots i_N\rangle$ direkt als Zustand interpretieren, in dem wir je ein Fermion in jeden der Basiszustände $|i_1\rangle \dots |i_N\rangle$ einsetzen. Wir interpretieren den Raum sämtlicher solcher Zustände als neuen Hilbertraum, genannt Fockraum. Dieser Fockraum ist direkt mit der Wahl der Einteilchenbasis verbunden und enthält Zustände beliebiger Teilchenzahl N . Zustände der Bauart $|i_1 i_2 \dots i_N\rangle$ nennen wir Fockzustände. Sie sind orthogonal und vollständig und wir können natürlich Superpositionen zwischen ihnen bilden. Den Zustand, der kein teilchen enthält, nennen wir (Fock)-Vakuum.

Sie haben schon einmal einen Fockraum gesehen - beim quantenmechanischen Harmonischen Oszillator. Dessen Anregungszustand $|n\rangle$ interpretieren wir so, dass n Teilchen genannte Phononen vorhanden sind. Zur genauen Behandlung solcher Wechselwirkungsfelder kommen wir später. Analog zum harmonischen Oszillator definieren wir Erzeugungs- und Vernichtoperatoren (Auf- und Absteiger) für die Teilchenzahl in verschiedenen Moden. So entsteht

$$|i_1, \dots, i_N\rangle = \hat{a}_{i_1}^\dagger \dots \hat{a}_{i_N}^\dagger |\text{Vac}\rangle.$$

Wir können uns die Wirkung so vorstellen, dass wir hintereinander unsere Teilchen in die Zustände $i_N, i_{N-1}, \dots, i_2, i_1$ einfüllen. Wir wollen nun die Ununterscheidbarkeit sicher stellen, d.h. für Bosonen soll es egal sein, in welcher Reihenfolge wir die Zustände besetzen. Das wird garantiert durch

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \quad i \neq j.$$

d.h. diese Operatoren kommutieren, $[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0$ für $i \neq j$. Für Fermionen wollen wir, dass das Einfüllen von Teilchen das Vorzeichen ändern, also gilt dann

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger = -\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \quad i \neq j.$$

Hier sagt man, dass die Operatoren antikommutieren. Wir definieren den Antikommutator zwischen zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} als

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

Damit ist für Fermionen in verschiedenen Einteilchenzuständen $\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$ für $i \neq j$. Wir werden später die gesamte (Anti-)Kommutatoralgebra dieser Operatoren im Detail konstruieren.

Wie sehen jetzt Einteilchen-Operatoren in dieser Schreibweise aus. Ein Einteilchen-Operator \hat{O} kann durch unsere Basiszustände durch seine Matrixdarstellung

$$\left(\langle k | \hat{O} | l \rangle \right)_{kl}$$

vollständig charakterisiert werden. In zweitquantisierter Schreibweise schreiben wir diese Einteilchenzustände als

$$|k\rangle \mapsto \hat{a}_k^\dagger |\text{Vac}\rangle \equiv |1_k\rangle.$$

Damit können wir postulieren, dass wir in zweiter Quantisierung den Operator darstellen können als

$$\hat{O} = \sum_{kl} O_{kl} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \quad O_{kl} = \langle k | \hat{O} | l \rangle.$$

In der Tat können wir so schreiben, dass

$$\langle 1_k | \hat{O} | 1_l \rangle = O_{kl} = \langle k | \hat{O} | l \rangle.$$

Eine Interpretation dieses Ausdrucks ist also, dass der Operator ein Teilchen vom Zustand l in den Zustand k streut. Eine wichtige Anwendung ist der Hamiltonoperator für nichtwechselwirkende Teilchen in der Hamilton. Wir nehmen als Basiszustände die Impulseigenzustände. Damit ist die kinetische Energie

$$\hat{T} = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad \epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

und der gesamte Hamilton

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \sum_{kl} V_{kl} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l.$$

Wenn zwei Teilchen wechselwirken (mit einem von der Statistik unabhängigen Potenzial) $V(\vec{r} - \vec{r}')$ wechselwirken, können wir Matrixelemente definieren

$$V_{klmn} = \int d^3r d^3r' \phi_k^*(\vec{r}) \phi_l^*(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \phi_m(\vec{r}') \phi_n(\vec{r})$$

und der Beitrag zum Hamilton ist entsprechend

$$\sum_{klmn} V_{klmn} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n.$$

Dieser Ausdruck kann als Streuung von Teilchen aus den Orbitalen m und n in die Orbitale k und l interpretiert werden.

2.3 Operatoralgebra für Fermionen

Welche Anforderungen an die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren stellen wir? Wenn bei der Anwendung auf einen beliebigen Zustand zwei Teilchen vertauscht werden, soll er sich dafür ein Minuszeichen einhandeln, z.B. in einer Sequenz

$$|1100\rangle \rightarrow |0110\rangle \rightarrow |1010\rangle \rightarrow |1100\rangle.$$

In anderen Worten sollte für entsprechende Indizes gelten

$$\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 |1100\rangle = -1. \quad (2.4)$$

Außerdem soll gelten, dass die Anwendung von \hat{a}_i^\dagger null ergibt, wenn Zustand i besetzt ist, ebenso die Anwendung von \hat{a}_i wenn er unbesetzt ist. Dies wird geleistet, wenn wir fordern, dass

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\Sigma_i} (1 - n_i) |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (2.5)$$

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\Sigma_i} n_i |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (2.6)$$

wobei $\Sigma_i = \sum_{j_i} n_i$ die Summe der Besetzungszahlen. Damit können wir Gl. (2.4) leicht nachrechnen. Im Unterraum, der von den Zuständen

$$|n_1, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots\rangle$$

und $|n_1, \dots, n_{i-1}, 1, n_{i+1}, \dots\rangle$ aufgespannt wird, haben die beiden Operatoren die Darstellung

$$\hat{a}_i^\dagger = (-1)^{\Sigma_i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{a}_i = (-1)^{\Sigma_i} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

bilden also ein hermitesch konjugiertes Paar. Der Operator

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = (-1)^{2\Sigma_i} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = n_i \hat{1}_2$$

misst die Besetzungszahl von Zustand i .

Tatsächlich brauchen wir uns die komplizierten Ausdrücke (2.5),(2.6) gar nicht zu merken. Wir können zeigen, dass die folgenden Fermion-Antikommutationsrelationen gelten

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger\} &= \delta_{lk} \\ \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger\} &= \{\hat{a}_k, \hat{a}_l\} = 0. \end{aligned}$$

Diese Relationen sind ausreichend, die o.g. Eigenschaften zu erfüllen, z.B. folgt automatisch das Pauli-Prinzip aus

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger = -\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger = 0.$$

Wir können auch Gl. 2.4 nachprüfen

$$\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 = \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 = -\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2 \hat{n}_1 = -\hat{a}_3 \hat{a}_3^\dagger \hat{n}_2 \hat{n}_1 = (\hat{n}_3 - 1) \hat{n}_2 \hat{n}_1$$

Wir haben hier die Basis k nicht spezifiziert. Eine spezielle Basis, die besondere Beachtung verdient, ist die Ortsdarstellung \vec{r} . Hier ist eine Notation üblich, in der Vernichter als $\Psi(\vec{r})$ und der Erzeuger als $\Psi^\dagger(\vec{r})$. Der Antikommutator ist, da diese Basis kontinuierlich ist

$$\{\Psi(\vec{r}), \Psi^\dagger(\vec{r}')\} = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}').$$

In der Ortsdarstellung hat $\hat{\rho}(\vec{r}) = \Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r})$ die Bedeutung einer lokalen Teilchendichte. Der Hamiltonoperator wechselwirkender Teilchen in einem externen Potenzial kann geschrieben werden als

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int d^3r \Psi(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \Psi^\dagger(\vec{r}) \Psi^\dagger(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') \Psi(\vec{r})\end{aligned}$$

wobei der Vorfaktor am Wechselwirkungsterm die Doppelzählung kompensiert.

2.4 Bosonen

Bevor wir uns die Algebra von Bosonen in zweiter Quantisierung anschauen fragen wir uns, welche Bosonen die Natur überhaupt zu bieten hat. Unter den Elementarteilchen ist die Aufteilung klar: Materiebausteine (Protonen, Neutronen, Elektronen) sind Fermionen mit Spin 1/2. Die Kräfte zwischen ihnen werden durch Bosonen vermittelt - die elektromagnetische durch Photonen (eine besondere Spezies von Spin-1 Teilchen), die schwache Wechselwirkung durch W- und Z-Bosonen, die starke durch Gluonen. Wir wissen zwar nicht, ob es eine Quantentheorie der Gravitation gibt und wie sie aussieht, aber wir wissen, dass wenn es sie gibt, sie durch den Austausch von Gravitonen mit Spin 2 vermittelt wird. Es gibt aber auch zusammengesetzte Bosonen, z.B. in Atomkernen, in Cooper-Paaren (Spin 0). Diese sind sogenannte "hardcore"-Bosonen - wenn wir sie in allen, auch internen, Quantenzahlen übereinstimmen lassen, kommt der Fermionische Charakter der zugrundeliegenden Teilchen zum Tragen in Form einer starken Abstoßung. Wir konzentrieren uns hier auf elementare Bosonen, insbesondere Photonen, die wir als Anregungsquanten harmonischer Oszillatoren kennenlernen werden. Vorher geben wir aber die grundlegenden Relationen für bosonische Operatoren \hat{b}_i und \hat{b}_i^\dagger . Wir fordern hier aus der Ununterscheidbarkeit, dass es nicht auf die Reihenfolge ankommt, mit der Bosonenzustände besetzt werden, und dabei soll diesmal kein Minuszeichen auftreten. Außerdem ist für einen Zustand mit n_i Bosonen die Wahrscheinlichkeitsamplitude, irgendein Boson zu entfernen, gerade $\sqrt{n_i}$. Damit haben wir

$$\hat{b}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$$

Um daraus die richtige Wahrscheinlichkeit zu machen, muss

$$\hat{b}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle$$

sein. Damit, und weil die verschiedenen i paarweise unabhängig sind, haben wir die vom (System von) harmonischen Oszillatoren bekannten Kommutatorrelationen

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij} \tag{2.7}$$

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0. \tag{2.8}$$

2.5 Bosonische Anregungen einer linearen Kette

Die Kommutatorrelationen (2.7)(2.8) entsprechen denen unabhängiger harmonischer Oszillatoren (HOs). Einzelne HOs sind z.B. realisiert durch die Schwingung eines Teilchens in einem harmonischen Potenzial, wie es z.B. aufgrund einer Hookeschen Feder oder der Linearisierung eines allgemeineren Potenzials um einen stabilen Punkt entsteht. Als elementares Beispiel gekoppelter Oszillatoren betrachten wir eine lineare Kette von Massenpunkten mit Masse M , die durch Federn mit der Federkonstante K gekoppelt sind und in der Ruhelage den Abstand l haben. Der Hamilton ist also

$$\hat{H} = \sum_i \left[\frac{\hat{p}_i^2}{2M} + \frac{K}{2} (\hat{x}_i - \hat{x}_{i+1})^2 \right]. \quad (2.9)$$

Hier sind \hat{x}_i und \hat{p}_i Koordinate (relativ zur Ruhelage) und Impuls des i ten Teilchens und wir nehmen periodische Randbedingungen an, d.h., die Perlschnur der Massenpunkte ist zu einem geschlossenen Torus zusammengeschnitten. Wie immer ist der kanonische Kommutator $[\hat{x}_n, \hat{p}_m] = i\hbar\delta_{nm}$. Unsere Vorgehensweise ist jetzt für klassische und quantenmechanische Systeme weitestgehend analog: Da der Hamilton quadratisch ist, suchen wir eine Normalmodentransformation, die die Terme entkoppelt. Dies gelingt mit

$$\hat{x}(k) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} \hat{x}(q) e^{-iqkl} \quad \hat{p}(k) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} \hat{p}(q) e^{-iqkl} \quad (2.10)$$

wobei l der Gleichgewichtsabstand der Massenpunkte ist. Die Funktionen sind $2\pi/l$ -periodisch und wir beschränken uns auf die erste Brillouinzone, $|k| \leq \pi/l$. Diese sind orthogonal

$$\frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{\pi/l} dk e^{ik(q-q')} = \delta_{qq'}.$$

Die in Gl. (2.10) definierten Operatoren sind nicht hermitesch (da komplexe Fouriertransformierte), wir können daraus aber dennoch einen kanonischen Kommutator konstruieren

$$[\hat{x}(k), \hat{p}(-k')] = \sum_{q,r} [\hat{x}(q), \hat{p}(r)] e^{i(k'r-kq)} = i\hbar \sum_q e^{iq(k'-k)l} = \frac{2\pi}{l} i\hbar \delta(k-k'). \quad (2.11)$$

Analog zum harmonischen Oszillator konstruieren wir die Leiteroperatoren

$$\hat{a}(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{M\omega_k}{\hbar}} \hat{x}(k) + i \frac{1}{\sqrt{M\omega_k\hbar}} \hat{p}(k) \right] \quad (2.12)$$

$$\hat{a}(-k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{M\omega_k}{\hbar}} \hat{x}(k) - i \frac{1}{\sqrt{M\omega_k\hbar}} \hat{p}(k) \right]. \quad (2.13)$$

Hier haben wir angenommen, dass die Dispersionsrelation ω_k symmetrisch ist, $\omega_k = \omega_{-k}$. Daraus, und mit Gl. (2.11) können wir den kanonischen Kommutator $[\hat{a}(k), \hat{a}^\dagger(k')] = \frac{2\pi}{l} \delta(k - k')$ verifizieren. Die Umkehrung von Gl. (2.12)(2.13) ist

$$\begin{aligned}\hat{x}(k) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_k}} (\hat{a}(k) + \hat{a}^\dagger(-k)) \\ \hat{p}(k) &= -i\sqrt{\frac{M\omega_k\hbar}{2}} (\hat{a}(k) - \hat{a}^\dagger(-k)).\end{aligned}$$

Wir wählen diese Ansätze, um den Hamilton Gl. (2.9) zu diagonalisieren. Dazu muss ω_k geeignet gewählt werden. Wir setzen an für die kinetische Energie \hat{T} , das freie Potenzial \hat{V}_1 und das Wechselwirkungspotenzial \hat{V}_2

$$\begin{aligned}\hat{T} &= \sum_q \frac{\hat{p}^2(q)}{2M} = \frac{l^2}{8\pi^2 M} \sum_q \int dk dk' e^{iq(k+k')} \hat{p}(k) \hat{p}(k') \\ &= \frac{l}{4\pi M} \int dk \hat{p}(k) \hat{p}(-k) - \frac{l\hbar}{8\pi} \int dk \omega_k [\hat{a}(k) - \hat{a}^\dagger(-k)] [\hat{a}(-k) - \hat{a}^\dagger(k)] \\ \hat{V}_1 &= \frac{K}{2} \sum_q (x_q^2 + x_{q+1}^2) = K \sum_q x_q^2 \\ &= \frac{Kl^2}{4\pi^2} \int dk dk' \sum_q e^{iql(k+k')} \hat{x}(k) \hat{x}(k') \\ &= \frac{Kl}{2\pi} \int dk \hat{x}(k) \hat{x}(-k) \\ &= \frac{Kl\hbar}{4\pi M} \int \frac{dk}{\omega_k} [\hat{a}(k) + \hat{a}^\dagger(-k)] [\hat{a}(-k) + \hat{a}^\dagger(k)] \\ \hat{V}_2 &= -K \sum_q \hat{x}_q \hat{x}_{q+1} = -\frac{K}{2} \sum (\hat{x}_q \hat{x}_{q+1} + \hat{x}_q \hat{x}_{q-1}) \\ &= -\frac{Kl^2}{8\pi^2} \int dk dk' \sum_q e^{iql(k+k')} (e^{ik'l} + e^{-ik'l}) \tilde{x}(k) \tilde{x}(k') \\ &= -\frac{Kl}{4\pi} \int dk \cos(kl) \hat{x}(k) \hat{x}(-k).\end{aligned}$$

Damit sind \hat{V}_1 und \hat{V}_2 um einen Faktor $-\cos kl$ verschieden. Wenn wir wählen

$$\frac{\omega_k}{2} = \frac{K}{M\omega_k} (1 - \cos kl)$$

dann fallen in der Summe alle gemischten Terme der Struktur $\hat{a}\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger$ weg, während die anderen verdoppeln. Damit ist

$$\hat{H} = \frac{l\hbar}{2\pi} \int dk \omega_k \hat{a}^\dagger(k) \hat{a}(k) + \text{const.} \quad (2.14)$$

wobei die Konstante die Nullpunktsenergie sämtlicher k - Moden beinhaltet, also unendlich ist. Wir können die Dispersionsrelation noch umformen in

$$\omega_k = \sqrt{\frac{2K}{M} (1 - \cos kl)} = 2\sqrt{\frac{K}{M} \left| \sin \frac{kl}{2} \right|}.$$

Wir wollen die Schritte noch einmal Revue passieren lassen: Wir haben hier gleichzeitig die Normalmoden $\tilde{x}(k)$ gefunden und ihre Dispersionsrelation ω_k bestimmt. Das hätten wir rein klassisch machen können. Die Einführung von $\hat{a}(k)$ und $\hat{a}^\dagger(k)$ entspricht der Einführung von Leiteroperatoren beim harmonischen Oszillator. Auch dies hätten wir zunächst klassisch machen können, bis zu dem Schritt, an dem wir $(a\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger a)/2$ zu $a^\dagger a + 1/2$ umgeformt haben. Diese Vorgehensweise - Identifizieren von Normalmoden, Umformung der Gesamtenergie, dann Quantisierung, werden wir auch beim elektromagnetischen Feld anwenden.

2.6 Photonen

In diesem Kapitel betrachten wir einen etwas oberflächlichen Zugang zur Quantenelektrodynamik. Immerhin wird der Feldquantisierung normalerweise eine ganze Spezialvorlesung gewidmet.

2.6.1 Elektrodynamik in der Coulombbeichung

Die beiden homogenen Maxwellgleichungen $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ und $\nabla \times \vec{E} + \dot{\vec{B}} = 0$ können wir automatisch erfüllen, wenn wir die Felder durch Potenziale ausdrücken,

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad \vec{E} = -\nabla\phi - \dot{\vec{A}}. \quad (2.15)$$

Wir haben jetzt sechs Freiheitsgrade (je drei Komponenten von \vec{E} und \vec{B}) durch vier Freiheitsgrade ersetzt. Das ist einer mehr als nötig, was uns die Eichfreiheit liefert. In dieser Vorlesung arbeiten wir ausschließlich in der Coulombbeichung

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0. \quad (2.16)$$

In dieser können wir schreiben

$$\rho(\vec{r}, t)/\epsilon_0 = \nabla \cdot \vec{E} = -\Delta\phi - \partial_t \nabla \cdot \vec{A} = -\Delta\phi(\vec{r}, t)$$

und andererseits

$$\begin{aligned} \mu_0 \vec{j}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{B} - \frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}} = \nabla \times \nabla \times \vec{A} - \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{A}} - \frac{1}{c^2} \nabla \dot{\phi} \\ &= -\square \vec{A} + \nabla (\nabla \cdot \vec{A}) - \frac{1}{c^2} \nabla \dot{\phi} \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$= -\square \vec{A}(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \nabla \dot{\phi}(\vec{r}, t) \quad (2.18)$$

wobei der D'Alembert-Operator oder das Quabla $\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ ist. Wir sehen also, dass das Skalarpotenzial der gleichen Gleichung gehorcht, wie in der Elektrostatik. Damit liefert es Beiträge zum Nahfeld, nicht jedoch zum Fernfeld, also der Strahlung im engeren Sinne. Dies folgt in der Elektrodynamik aus einer Entwicklung in den Teilchengeschwindigkeiten v/c . Für die Feldquantisierung interessieren wir uns für dynamische, zeitabhängige Felder, nicht für Elektrostatik (die zu quantisieren wäre eine Strafarbeit ...) und insbesondere für das Fernfeld. Darum vernachlässigen wir in Gl. (2.17) im Fernfeld das Skalarpotenzial und bekommen eine einfache inhomogene Wellengleichung $\square \vec{A} = -\mu_0 \vec{j}$. Dieses Argument lässt sich rigoros ausformulieren und gilt für nichtrelativistische Teilchen als Strahlungsquellen, also in der Atomphysik und Quantenoptik. In relativistischen Systemen der Hochenergiephysik könnten wir das nicht so machen. Propagierende Wellen im Fernfeld, fernab ihrer Quelle, erfüllen also die homogene Wellengleichung $\square \vec{A}(\vec{r}, t) = 0$. Ein vollständiger Satz Lösungen dieser Gleichung ist gegeben durch

$$\vec{A}_k(\vec{r}, t) = \vec{a}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}.$$

Einsetzen in die Wellengleichung ergibt die Dispersionsrelation $\omega^2 = c^2 k^2$ und Einsetzen in die Coulomb-Eichbedingung (2.16) diktiert $\vec{a} \cdot \vec{k} = 0$. Damit gibt es nur zwei linear unabhängige Komponenten von \vec{a} und wir können orthonormierte Polarisationsvektoren $\vec{e}_{1/2}(\vec{k})$ ein führen um den Vorfaktor zu schreiben als

$$\vec{a}(\vec{k}) = a_1(\vec{k}) \vec{e}_1(\vec{k}) + a_2(\vec{k}) \vec{e}_2(\vec{k}). \quad (2.19)$$

Die Physikalischen Felder sind natürlich reell und man erhält sie durch das Nehmen des Realteils (nach der Differentiation aus Gl. (2.15)) und wir sehen, dass die Welle immer transversal polarisiert ist, d.h., \vec{A} , \vec{E} , und \vec{B} stehen senkrecht zu \vec{k} . Nach dem Superpositionsprinzip können wir jetzt für das gesamte Vektorpotenzial schreiben

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int d^3k \sum_{i=1}^2 \vec{e}_i(\vec{k}) a_i(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \omega = ck. \quad (2.20)$$

Die elektromagnetische Feldenergie ist

$$H = \int d^3r \left(\frac{\epsilon_0}{2} \vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2 \right). \quad (2.21)$$

2.6.2 Feldquantisierung in der Coulombgleichung

Wir wollen jetzt von der schon entwickelten Zerlegung ausgehend das elektromagnetische Feld in der Coulombgleichung quantisieren. Wir müssten uns erst rigoros davon überzeugen, dass wir eine bosonische Algebra finden müssen. Dies erfordert aber wiederum sehr viel mehr Überbau, der über diese Vorlesung hinausgeht. Eine Methode, sich davon zu überzeugen ist es, sich Matrixelemente in

Atomen zwischen Drehimpuls-Eigenzuständen anzuschauen. Es stellt sich heraus, dass ein strahlender Übergang diesen gerade um \hbar ändert, also trägt das Photon aus Gründen der Drehimpulserhaltung gerade das als Drehimpuls. Außerdem lehrt uns die Erfahrung, dass Licht sehr hohe Intensität haben kann, also gilt wohl kein Pauliprinzip. Jetzt schauen wir uns die Schritte an, mit denen wir einen Ausdruck analog zu Gl. (2.21) auch für das elektromagnetische Feld herleiten können. Wir sehen, dass wir das Feld in Gl. (2.20) schon in Eigenmoden zerlegt haben und müssen aber noch zeigen, dass die auch den Hamilton Gl. (2.21) diagonalisieren. Wir sehen, dass die Definition von Vorfaktoren und Polarisationen in Gl. (2.19) nicht eindeutig ist - wir könnten die ϵ mit einem Faktor multiplizieren und die a durch den entsprechenden Faktor dividieren. In der klassischen Elektrodynamik wählen wir die $\vec{\epsilon}$ als Einheitsvektoren. In der Quantenelektrodynamik wählen wir $\vec{\epsilon} \rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k \epsilon_0}} \vec{\varphi}$ (Bedeutung des Vorfaktors wird später klar) mit der Normierung auf

$$\int d^3r \quad \vec{\varphi}_i^*(\vec{k}) \vec{\varphi}_j(\vec{k}') e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} = \delta_{ij} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \quad (2.22)$$

die nachher gebraucht wird, um das Korrespondenzprinzip zu erfüllen. Die einfachste Wahl ist $\vec{\varphi}_i = \vec{\epsilon}_i / \sqrt{V}$ wobei V das Raumbolumen ist, in dem wir arbeiten. Jetzt quantisieren wir, indem wir die $a_i(\vec{k})$ zu Operatoren $\hat{a}_i(\vec{k})$ erheben und kanonische Kommutationsrelationen

$$[\hat{a}_i(\vec{k}), \hat{a}_i^\dagger(\vec{k}')] = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$$

postulieren. Wir erhalten damit den Ausdruck für den Operator des elektrischen Feldes

$$\hat{\vec{E}} = \sum_{\vec{k}, j} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k \epsilon_0}} \left(-i\omega_k \vec{\varphi}_j(\vec{k}) \hat{a}_j(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} + i\omega_k \vec{\varphi}_j^*(\vec{k}) \hat{a}_j^\dagger(\vec{k}) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \right).$$

Damit schreiben wir den elektrischen Beitrag zum Hamilton (2.21) als

$$\begin{aligned} \int d^3r \quad \vec{E}^2(\vec{r}) &= \frac{\hbar}{2\epsilon_0} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', j, m} \sqrt{\omega_k \omega_{k'}} \times \\ &\times \int d^3r \quad \left(-i\vec{\varphi}_j(\vec{k}) \hat{a}_j(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} + i\vec{\varphi}_j^*(\vec{k}) \hat{a}_j^\dagger(\vec{k}) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \right) \\ &\times \left(-i\vec{\varphi}_m(\vec{k}') \hat{a}_m(\vec{k}') e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{r} - \omega' t)} + i\vec{\varphi}_m^*(\vec{k}') \hat{a}_m^\dagger(\vec{k}') e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{r} - \omega' t)} \right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Beim Ausmultiplizieren finden wir einen Term \hat{H}_{od} der die Außerdiagonalanteile enthält, also $\hat{a}\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger$. Diesen merken wir uns schlicht und wenden uns dem verbleibenden diagonalen Teil zu. Dieser enthält Integrale von Typ Gl. (2.22) und liefert damit

$$\hat{H}_{E,d} = \frac{1}{2} \hbar \sum_{j, \vec{k}} \omega_k \left(\hat{a}_j(\vec{k}) \hat{a}_j^\dagger(\vec{k}) + \hat{a}_j^\dagger(\vec{k}) \hat{a}_j(\vec{k}) \right).$$

Jetzt zum magnetischen Teil: Wir betrachten

$$\int d^3r \quad (\nabla \times \vec{A})^2 \quad (2.25)$$

Bevor wir in quantenmechanische Ausdrücke einsteigen, wollen wir die Identität $\nabla(\vec{u} \times \vec{v}) = \vec{v}(\nabla \times \vec{u}) - \vec{u}(\nabla \times \vec{v})$ nutzen im Fall $\vec{u} = \vec{A}$ und $\vec{v} = \nabla \times \vec{A}$. Damit erhalten wir

$$(\nabla \times \vec{A})^2 = \nabla \left(\vec{A} \times (\nabla \times \vec{A}) \right) + \vec{A} \left(\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) \right).$$

In der Doppelrotation finden wir $-\vec{A}\Delta\vec{A} = -\vec{A}\ddot{\vec{A}}/c^2$ sowie einen Term, der in der Coulombbeziehung verschwindet. Hier haben wir die Wellengleichung verwendet. Der erste Term ist eine Divergenz und verschwindet unter dem unendlichen Oberflächenintegral in (2.25). Damit haben wir am Ende für Gl (2.25) den Ausdruck

$$\int d^3r \quad \vec{B}^2(\vec{r}) = \times \frac{\mu_0 \hbar}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', j, m} \sqrt{\frac{\omega_{k'}^3}{\omega_k}} \left(\vec{\phi}_j(\vec{k}) \hat{a}_j(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + \vec{\phi}_j^*(\vec{k}) \hat{a}_j^\dagger(\vec{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) \quad (2.26)$$

$$\times \left(\vec{\phi}(\vec{k}') \hat{a}_m(\vec{k}) e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' t)} + \vec{\phi}_m^*(\vec{k}') \hat{a}_m^\dagger(\vec{k}') e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' t)} \right). \quad (2.27)$$

Damit sehen wir die Analogie zu (2.24) - der Vorfaktor $1/c^2$ kompensiert gerade die Einheitenfaktoren ϵ_0, μ_0 . Der diagonale Term des magnetischen Beitrags ist damit $\hat{H}_{B,d} = \hat{H}_{E,d}$. Die außerdiagonalen Anteile sehen sich auch ähnlich bis auf Vorzeichen und würden sich wohl wegheben, mit Ausnahme des Frequenzfaktors - $\sqrt{\omega_k \omega_k'}$ in Gl. (2.24) gegenüber $\omega_{k'}^{3/2} \omega_k^{-1/2}$ in Gl. (2.27). Beim Ausintegrieren dieser Terme erhalten wir aber Diracdelta der Form $\delta^3(\vec{k} + \vec{k}')$ und da ω_k von der Richtung des Wellenvektors unabhängig ist, kompensieren sich diese Terme. Wir erhalten also in der Tat den kanonischen Feldhamilton

$$\hat{H} = \hbar \sum_{\vec{k}, j} \omega_k \left[\hat{a}_j^\dagger(\vec{k}) \hat{a}_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right]$$

also den Hamilton von nichtwechselwirkenden Bosonen, die wir Photonen nennen. Die Eigenzustände sind wiederum Fockzustände, wir sagen, dass der Eigenzustand $|n_k\rangle$ n Photonen in Mode k enthält. Interessanterweise sind in allen Fockzuständen die Erwartungswerte der Felder, $\langle \hat{E} \rangle = 0$ und $\langle \hat{B} \rangle = 0$, jedoch gibt es Nullpunktsfluktuationen. Wenn wir über Experimente reden hätten wir natürlich gerne Photonen mit nichtverschwindenden Felderwartungswerten, die dann die Form von Wellenpaketen haben. Wir sehen jetzt, warum die Normierung der Moden mit (2.22) so wichtig und richtig war: Auf diese Art und Weise enthält ein Zustand mit einem Photon in Mode k gerade die Energie $\hbar\omega_k$. Dies hat eine interessante Konsequenz, das Konzept des Modenvolumens: Je kleiner

wir den Volumenfaktor in der Definition von $\vec{\phi}_i$ machen, desto größer die Felder einzelner Photonen. Aus diesem Grund finden quantenoptische Experimente oft in Kavitäten statt.

2.7 Licht-Materie-Wechselwirkung (nichtrelativistisch, ohne Spin)

Wir wollen uns jetzt anschauen, wie diese quantisierte Strahlung mit einem Atom (oder anderen gebundenen Quantenzuständen) wechselwirkt. Wir behandeln letzteren nichtrelativistisch (Licht ist natürlich immer relativistisch). Wir wollen zunächst den Hamiltonian eines Teilchens mit Ladung q in einem elektromagnetischen Feld wiederholen. Dieser ist (als Hamiltonfunktion)

$$H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi.$$

Kann das stimmen? Wir betrachten die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\vec{r}} = \nabla_{\vec{p}} H = \frac{1}{m} (\vec{p} - q\vec{A})$$

Impuls ist also nicht Masse mal Geschwindigkeit. Wir nennen \vec{p} den kanonischen Impuls und $\vec{\pi} = m\dot{\vec{r}} = \vec{p} - q\vec{A}$ den kinematischen. Die andere Hamiltonsche Bewegungsgleichung ergibt

$$\dot{\vec{p}} = -\nabla H = -q\nabla\phi - \frac{1}{2m}\nabla\vec{\pi}^2.$$

Wir benutzen

$$\frac{1}{2}\nabla\vec{\pi}^2 = \vec{\pi} \times (\nabla \times \vec{\pi}) + (\vec{\pi} \cdot \nabla)\vec{\pi}$$

Und können damit schreiben

$$\begin{aligned} m\ddot{\vec{r}} &= \frac{d}{dt} (\vec{p} - q\vec{A}) = \dot{\vec{p}} - q\dot{\vec{A}} - q(\dot{\vec{r}} \cdot \nabla)\vec{A} \\ &= -q(\nabla\phi + \dot{\vec{A}}) - q\vec{v} \times \vec{B} + q(\dot{\vec{r}} \cdot \nabla)\vec{A} - q(\dot{\vec{r}} \cdot \nabla)\vec{A} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B} \end{aligned}$$

also erhalten wir gerade die Bewegungsgleichung mit der Lorentzkraft.

Die Unterscheidung zwischen kinematischem und kanonischem Impuls spielt auch eine Rolle bei der Aufstellung des Hamiltonoperators, denn der kanonische Impuls geht in einen Operator über. Wir haben also für ein Teilchen im Vektorpotenzial

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi.$$

Beide Potenziale haben einen statischen Anteil, darüber hinaus hat das Vektorpotenzial auch einen quantisierten Anteil. Betrachten wir also dieses etwas näher. Entwicklung der Klammer ergibt

$$(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2 = \hat{p}^2 - q\{\hat{\vec{p}}, \vec{A}\} + q^2\vec{A}^2.$$

Der erste Term ist der normale Impuls. Der dritte Term ist nur dann groß, wenn die Magnetfelder stärker sind, als die Felder, die das Atom halten. Wir können für ein Atom der Größe L abschätzen, dass $p \simeq 1/L$ während $qA \simeq qBL$, d.h. für kleine Atome und schwache Felder können wir den letzten Term vernachlässigen. Der mittlere Term berücksichtigt, dass i.A. \hat{p} und \hat{A} nicht kommutieren. In der Coulombbeugung tun sie das aber, d.h. die Materie-Feld-Wechselwirkung ist $\hat{H}_I = -2q\hat{A} \cdot \hat{p}$. Wir wollen zunächst die Matrixelemente von \hat{p} betrachten. Es ist einerseits für den freien Hamilton \hat{H}_0

$$[\vec{r}, \hat{H}_0] = \left[\vec{r}, \frac{\hat{p}^2}{2m} \right] = i\hbar\hat{p}/m.$$

Andererseits ist für beliebige atomare Eigenzustände $|i\rangle$ und $|f\rangle$ mit ungestörten Energieeigenwerten $E_{i/f}$

$$\langle f | [\vec{r}, \hat{H}_0] | i \rangle = \langle f | \vec{r} (E_i - E_f) | i \rangle = \hbar\omega_{if} \langle f | \vec{r} | i \rangle.$$

wobei ω_{if} die Übergangsfrequenz zwischen den Zuständen ist. Damit ist

$$\frac{1}{m} \langle f | \hat{p} | i \rangle = -i\omega_{if} \langle f | \vec{r} | i \rangle.$$

Damit sind die atomaren Matrixelemente von \hat{H}_I proportional zum atomaren Dipoloperator $\hat{d} = q\vec{r}$. Dieser wird in \hat{H}_I multipliziert mit dem Vektorpotenzial in Coulombbeugung, welches in seine Eigenmoden entwickelt wird, Gl. (2.20) und dann mit Hebern und Senkern quantisiert. Der räumliche Anteil hat die Form $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Nun sind die Wellenlängen für resonante Übergänge im order nahe am optischen Bereich, also $\lambda \in O(10^{-7}m)$ während die räumliche Ausdehnung der Wellenfunktion atomar gebundener Elektronen von der Größenordnung 1 Angstrom ist, also drei Größenordnungen kleiner. Damit können wir getrost ersetzen $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \simeq 1$ und den Koordinatenursprung am Ort des Atoms wählen. Den entstehenden Hamilton nennen wir Dipolhamiltom

$$\langle f | \hat{H}_d | i \rangle = -2i\hbar\omega_{if}\hat{A}(0) \cdot \langle f | \hat{d} | i \rangle. \quad (2.28)$$

Würden wir höhere Ordnungen in $\vec{k} \cdot \vec{r}$ behalten, dann hätten wir es mit Quadrupol-, Oktupol- usw. Strahlung zu tun.

2.8 Emission und Absorption von Photonen, Einsteinkoeffizienten

Die Physik der Eletron-Photon-Wechselwirkung ist ausgesprochen reichhaltig. Wir wollen uns hier die einfachsten Prozesse anschauen, die Emission und Absorption von Photonen. Dazu benutzen wir ein wichtiges Ergebnis aus der zeitabhängigen Störungstheorie, nämlich Fermis goldene Regel. Sie gilt, wenn die

Störung, in unserem Fall \hat{H}_d schwach ist und die Wechselwirkung langsam an- und wieder ausgeschaltet wird. Sie besagt hier, dass für die Übergangsrate zwischen zwei atomaren Zuständen $|i\rangle$ und $|f\rangle$ begleitet von einem Übergang von Fockzuständen $|\{n_i\}\rangle$ und $|\{n_f\}\rangle$ des Feldes

$$\Gamma_{i\{n_i\} \rightarrow f\{n_f\}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f, \{n_f\} | \hat{H}_d | i, \{n_i\} \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega_{if} + E_{\{n_i\}} - E_{\{n_f\}}) \quad (2.29)$$

wobei der letzte Faktor Energieerhaltung erzwingt.

Wir betrachten zuert dn Fall $\omega_{if} < 0$, also Anregung des Atoms, und als Anfangszustand des Feldes den Vakuumzustand $n_i \equiv 0$. Damit ist das Argument des Diracdelta stets negativ und es findet kein Übergang statt. Merke: Trotz Vakuumfluktuationen kann man aus dem Vakuum keine Energie ziehen. Als nächstes betrachten wir weiterhin das Vakuum jetzt aber Abregung des Atoms, $\omega_{if} > 0$. Dieser Prozess ist natürlich möglich. Wir finden für das Matrixelement

$$\langle f, \{n_f\} | \hat{H}_d | i, \{0\} \rangle = -2i\hbar\omega_{if} \langle f | \hat{d} | i \rangle \langle \{n_f\} | \hat{A} | 0 \rangle.$$

Da die Darstellung von \hat{A} eine Linearkombination von Erzeugern und Vernichtern (in linearer Potenz) ist, sind die einzig möglichen Endzustände die Zustände $|1_j\rangle$ bei denen sich genau ein Photon in Zustand j befindet. Offensichtlich handelt es sich also um Photonemission. Das emittierte Photon muss aufgrund der Energieerhaltung die Frequenz ω_{if} haben. Damit ist der Betrag seiner Wellenzahl k festgelegt, aber weder Richtung noch Polarisation. Wir führen die Zustandsdichte formal ein als

$$n(\omega) = 2 \sum_k \delta(\omega - \omega_k).$$

Für Photonen im unendlich ausgedehnten Raum haben wir

$$n(\omega) = 2 \int d^3k \delta(\omega - ck) = 8\pi \int dk k^2 \delta(\omega - ck) = 8\pi c \int dk k^2 \delta\left(\frac{\omega}{c} - k\right) = 8\pi \frac{\omega^2}{c}.$$

Die Vorfaktoren der \hat{a}_k^\dagger hängen nur von der Frequenz ab. Alles in allem bekommen wir daraus eine Übergangsrate für diese spontane Emission von

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^s = \frac{1}{c} 16\pi^3 \omega_{if}^3 \sum_j \left| \langle f | \hat{d} | i \rangle \cdot \vec{\varphi}_j \right|^2 \equiv A_{if}$$

Sie skaliert also mit ω^3 . Die verbleibende Summe läuft über Polarisationsrichtungen. A heißt auch Einsteinkoeffizient.

Was ändert sich bei der Emission, wenn das Feld nicht im Vakuum startet? Nun, für jeden energieerhaltenden Übergang geht es nicht mehr von $|0\rangle_i \rightarrow \hat{a}_i^\dagger |0\rangle_i = |1\rangle_i$ sondern $|n\rangle_i \rightarrow \hat{a}_i^\dagger |n\rangle_i = \sqrt{n+1} |n+1\rangle_i$. Aufgrund des Betragsquadrats in der goldenen Regel Gl. (2.29) wird damit jeder Beitrag noch mit $n+1$ gewichtet. Oft, z.B. im thermischen Gleichgewicht, hängt n_i nur von der

Frequenz, nicht aber von der Richtung der Welle ab, $n_i = N(\omega)$. In diesem Fall ist die totale Emissionsrate

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^e = (1 + N(\omega)) \Gamma_{i \rightarrow f}^s = A_{if} + B_{if}$$

Der Beitrag mit der 1 heißt weiterhin spontane Emission, der Beitrag mit dem $N(\omega)$ stimulierte Emission. Atome emittieren also leichter, wenn Licht auf sie einfällt. Dies ist eine Konsequenz aus folgenden Argumenten: \hat{a}^\dagger ist konjugiert zu \hat{a} . \hat{a} ist $\propto \sqrt{n}$, weil es die Wahrscheinlichkeitsamplitude beschreibt, *irgendein* Photon zu finden, also letztlich eine Konsequenz der Ununterscheidbarkeit. Man könnte auch sagen, dass Bosonen gerne zusammenklumpen und damit die Anwesenheit von Photonen es erleichtert, weitere Photonen aus dem Atom herauszuziehen.

Schlussendlich können wir auch die Absorptionsrate bestimmen. Da ist der relevante Operator der Photonenvernichter \hat{a} und der liefert $\sqrt{n_i}$, also haben wir

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^a = N(\omega) \Gamma_{f \rightarrow i}^s = B_{fi}$$

Wir sehen also, dass die Absorptionsrate gleich der stimulierten Emissionsrate des umgekehrten Vorgangs ist. Im klassischen Limes, wenn $N \rightarrow \infty$ sind Emissions- und Absorptionsrate gleich, der Zustand springt hin und her.

2.9 Lichtstreuung und Feynmandiagramme

Bei den Prozessen des vorherigen Abschnittes hat sich die Zahl der Photonen geändert. Jetzt wollen wir uns Prozesse anschauen, bei denen ein einfallendes Photon in ein anderes gestreut wird. Wir werden zumindest die Grundidee von Feynmandiagrammen bekommen, ohne diese Methodik im Detail auszuarbeiten. Anders als im vorangegangenen Abschnitt greifen wir nicht auf Fermis goldene Regel zurück. Wir gehen aber dennoch störungstheoretisch vor.

Vorher erinnern wir uns an verschiedene Darstellungen der Quantenmechanik. Im Schrödingerbild erfüllen die Zustandsvektoren die zeitabhängige Schrödingergleichung und gewöhnliche (nicht klassisch zeitabhängige) Observable werden durch zeitunabhängige Operatoren beschrieben. Im Heisenbergbild sind die Zustände zeitunabhängig und die Observablen erfüllen die Heisenbergsche Bewegungsgleichung

$$i\hbar \partial_t \hat{O}^H = [\hat{O}^H, \hat{H}] . \quad (2.30)$$

Um zeitabhängige Störungstheorie zu betreiben, setzen wir uns zwischen beide Stühle und gehen ins Wechselwirkungsbild. Wir teilen den Hamilton in einen (großen, einfach behandelbaren) Term \hat{H}_0 und eine Störung \hat{V} auf, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. Wir transformieren Operatoren gemäß Gl. (2.30), allerdings ersetzen wir \hat{H} durch \hat{H}_0 . Damit wird auch die Störung als \hat{V}^I ins Wechselwirkungsbild transformiert (und kann dadurch eine vorher nicht vorhandene Zeitabhängigkeit annehmen). Diese Störung bestimmt nun die Zeitentwicklung des Zustandsvektors.

Die formale Lösung der entsprechenden zeitabhängigen Schrödingergleichung ist dann

$$\hat{U}^I(t_1, t_2) = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_2}^{t_1} dt' \hat{V}^I(t') \right).$$

Der Clou dieser Formel ist der Dyson-Zeitordnungsoperator \mathcal{T} . Er besagt, dass die Formel so zu lesen ist, dass die frühesten Zeiten immer rechts stehen. Die Formel bedeutet also im Allgemeinen nicht, dass Sie die Störung aufintegrieren und die erhaltene Matrix exponentieren. Das wäre nur richtig, wenn \mathcal{T} irrelevant ist, weil $\hat{V}(t)$ und $\hat{V}(t')$ für alle Paare von Zeiten t, t' kommutieren. Stattdessen entwickeln wir

$$\hat{U}^I(t_1, t_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^{t_1} dt' dt'' \dots dt^{(n)} \mathcal{T} \left(\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n) \right). \quad (2.31)$$

Diese Entwicklung heißt *Dysonreihe*. Sie stellt eine systematische zeitabhängige Störungstheorie dar. Ihre Terme können oft physikalisch interpretiert werden, wie wir im Folgenden für das Beispiel der Lichtstreuung erklären werden. Die Licht-Materie-Wechselwirkung wird für den Dipolhamilton Gl. (2.28) beschrieben. Wir müssen ihn ins Wechselwirkungsbild transformieren. Klarerweise ist für den atomaren Teil

$$\langle f | \hat{d} | i \rangle \rightarrow \langle f | \hat{d} | i \rangle e^{-i\omega_i f t}.$$

Das Vektorpotenzial haben wir oben schon im Wechselwirkungsbild dargestellt, wir haben

$$\hat{a}_k \rightarrow e^{-i\omega_k t} \hat{a}_k^\dagger \rightarrow \hat{a}_k^\dagger e^{i\omega_k t}.$$

Weiterhin teilen wir das Vektorpotenzial auf gemäß $\hat{A} = \hat{A}_+ + \hat{A}_-$ wobei \hat{A}_+ alle Erzeugungs- und \hat{A}_- alle Vernichtungsoperatoren enthält. Wir interessieren uns speziell für Lichtstreuung, d.h. für Matrixelemente der Zeitentwicklung (2.31) zwischen Zuständen $|1_k\rangle$ und $|1_l\rangle$. In der nullten Ordnung in \hat{V} bekommen wir

$$\langle f, 1_l | \hat{U}_0^I | i, 1_k \rangle = \delta_{kl} \delta_{if}.$$

also: Ohne Wirkung der Störung keine Lichtstreuung. In der ersten Ordnung wenden wir einmal das Vektorpotenzial \hat{A} an, d.h. wir erzeugen oder vernichten ein Photon - wir streuen es nicht. Streuung findet erst in zweiter Ordnung statt und setzt voraus, dass wir einmal \hat{A}_+ und einmal \hat{A}_- anwenden. Die anderen Prozesse in zweiter Ordnung wären zwei-Photon-Absorption oder -Emission. Schauen wir uns zunächst mal den zeitgeordneten Faktor etwas genauer an

$$\int_{t_0}^{t_1} dt' \int_{t_0}^{t_1} dt'' \mathcal{T} \left(\hat{V}(t') \hat{V}(t'') \right) = 2 \int_{t_0}^{t_1} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{V}(t') \hat{V}(t'').$$

was einfach ein Umetikettieren der Integrationsvariablen ist - links integrieren wir über ein Quadrat und tauschen die Operatoren auf der Diagonalen. Das

funktioniert in jeder Ordnung. Der Zeitordnungsoperator ist also nur ein Trick, diese geschachtelten Integrationsgrenzen auszudrücken. Rechts integrieren wir zwei mal über ein Dreieck. Wir haben jetzt zwei Möglichkeiten: Zuerst Emission oder zunächst Absorption

$$\begin{aligned}
\langle f, 1_l | \hat{U}_2^I | i, 1, k \rangle &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^{t_1} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle f, 1_l | \hat{V}_+(t') \hat{V}_-(t'') + \hat{V}_-(t') \hat{V}_+(t'') | i, 1_k \rangle \quad (2.32) \\
&= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{t_0}^{t_1} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle f, 1_l | \hat{V}_+(t') | m, \text{Vac} \rangle \langle m, \text{Vac} | \hat{V}_-(t'') | i, 1_k \rangle \\
&\quad - \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \int_{t_0}^{t_1} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle f, 1_l | \hat{V}_-(t') | m, 1_l, 1_k \rangle \langle m, 1_l, 1_k | \hat{V}_+(t'') | i, 1_k \rangle
\end{aligned}$$

wobei wir am Ende die Vollständigkeitsrelation eingeschoben haben und schon ausgenutzt haben, dass durch die Form von \hat{A} nur die angegebenen Zustände für das Photonenfeld überhaupt erreichbar sind. Jetzt setzen wir die expliziten Formen von \hat{V}_+ und \hat{V}_- ein und finden

$$\begin{aligned}
&\langle f, 1_l | \hat{V}_+(t') | m, \text{Vac} \rangle \langle m, \text{Vac} | \hat{V}_-(t'') | i, 1_k \rangle = \\
&-4\hbar^2 \omega_f m \omega_m i e^{-i\omega_f t'} e^{-i\omega_m t''} \langle f | \hat{d} | m \rangle \langle m | \hat{d} | i \rangle e^{i\omega_l t'} e^{-i\omega_k t''} \frac{2\pi\hbar}{V\sqrt{\omega_k \omega_l}}
\end{aligned}$$

Der zweite Faktor unterscheidet sich im Wesentlichen in den Zeitabhängigkeiten

$$\begin{aligned}
&\langle f, 1_l | \hat{V}_-(t') | m, \text{Vac} \rangle \langle m, \text{Vac} | \hat{V}_+(t'') | i, 1_k \rangle = \\
&-4\hbar^2 \omega_f m \omega_m i e^{-i\omega_f t'} e^{-i\omega_m t''} \langle f | \hat{d} | m \rangle \langle m | \hat{d} | i \rangle e^{i\omega_l t''} e^{-i\omega_k t'} \frac{2\pi\hbar}{V\sqrt{\omega_k \omega_l}}
\end{aligned}$$

Damit treten in dem Ausdruck Gl. (2.32) folgende Integrale auf

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_{t_0}^{t_1} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' e^{-i(\omega_m + \omega_k)t''} e^{i(\omega_l - \omega_f)t'} \\
&= \int_{t_0}^{t_1} dt' e^{i(\omega_l - \omega_f)t'} \frac{i}{\omega_l m + \omega_k} \left(e^{-i(\omega_m + \omega_k)t'} - e^{-i(\omega_m + \omega_k)t_0} \right)
\end{aligned}$$

Jetzt halten wir einmal kurz inne: Wir interessieren und eigentlich gar nicht für die Zeiten t_0 und t_1 . Wir interessieren uns für Licht, das von einer Zeit in der fernen Vergangenheit ankommt (jedenfalls lange vor den Zeiten, die durch die atomaren Übergänge festgesetzt sind). Wir lassen also im Integranden $t_0 \rightarrow -\infty$ gehen. Wir gehen auch davon aus, dass das Atom eine endliche Lebensdauer hat und geben den Frequenzen einen nichtverschwindenden Imaginärteil. Damit fällt der zweite Term weg. Auch im äußeren Integral lassen wir den Zeitunterschied gegen unendlich laufen. Dazu setzen wir $t_1 = -t_0 = t$ und lassen das nachher

groß werden. Wir haben also zu integrieren

$$I_1 = \frac{i}{\omega_{lm} + \omega_k} \int_{-t}^t dt' e^{i(\omega_l - \omega_k - \omega_{fi})t'} = \frac{2i}{(\omega_{lm} + \omega_k) \Delta\omega} \sin \Delta\omega t$$

wobei $\Delta\omega = \omega_l - \omega_k - \omega_{fi}$ die gesamte Energieänderung zwischen den Anfangs- und Endzuständen. Der Zwischenzustand m taucht nur im Energienenner auf. Im zweiten Term haben wir den Ausdruck

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{-t}^t dt' e^{-i(\omega_{mf} + \omega_k)t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' e^{i(\omega_l - \omega_{im})t''} \\ &= \frac{i}{\omega_{im} - \omega_l} \int_{-t}^t dt' e^{i(\omega_l - \omega_k + \omega_{fi})t'} = \frac{2i}{\Delta\omega (\omega_{im} - \omega_l)} \sin \Delta\omega t. \end{aligned}$$

Wir haben also die gleiche Zeitabhängigkeit aber, aufgrund des anderen Zwischenzustands, einen anderen Energienenner. Wenn wir das zusammenbauen, können wir z.B. die Übergangsrate zwischen Anfangs- und Endzustand ausrechnen als das Absolutquadrat des entsprechenden Matrixelements von \hat{U} . Wir können uns davon überzeugen, dass

$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \omega \Delta t}{\omega^2 \Delta t} = 2\pi \delta(\omega)$$

indem wir feststellen, dass die linke Seite normiert ist und im Limes außerhalb der Null verschwindet. Also haben wir eine Übergangsrate (bzw. einen Streuquerschnitt), der folgende Form hat (wird in der nächsten Version ausgeschrieben). Die beiden Terme können diagrammatisch interpretiert werden (Zeichnung siehe Vorlesung). Wir gehen von links nach rechts. Jeder Wechselwirkungsververtex beschreibt die Anwendung des Wechselwirkungshamilton, wobei Emission mit \hat{H}^+ und Absorption mit \hat{H}^- beschrieben wird. Die Zeiten für die Wechselwirkung sind geordnet aber ansonsten beliebig. Die Propagation der Linien wird durch die Zeitentwicklungsoperatoren der entsprechenden Basiszustände, also die Exponentialfunktionen, beschrieben. Die Zwischenzustände sind beliebig, werden also ausintegriert. Die beiden Diagramme entsprechen Zwischenzuständen mit zwei bzw. keinen Photonen. Diese Feynmanregeln ziehen sich weiter in höhere Ordnungen.

Kapitel 3

Relativistische Quantenmechanik

In diesem Kapitel analysieren wir relativistische Verallgemeinerungen der Schrödingergleichung und entdecken, dass selbst das Vakuum für Fermionen stark bevölkert ist.

3.1 Wiederholung spezielle Relativitätstheorie und Vierernotation

Wird aus E-Dynamik-Skript entwickelt.

3.2 Relativistische Schrödingergleichung: Klein-Gordon

Wir starten zunächst der Einfachheit halber mit spinlosen Teilchen, also massiven Bosonen. Aus der relativistischen Energie-Impuls-Relation

$$E - q\phi = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$$

können wir die Operatorform schreiben

$$\left(\hat{\pi}_0^2 - \hat{\vec{\pi}}^2\right) \psi = \hat{\pi}_\mu \hat{\pi}^\mu = m^2 c^2 \psi. \quad (3.1)$$

Dies ist die Klein-Gordon-Gleichung. Hier haben wir den kinematischen Viererimpuls also Operator eingeführt, $\pi_0 = (E - q\phi)/c$, $\hat{\pi}_0 = (i\hbar\partial_t - q\phi)/c$ und $\hat{\vec{\pi}} = -i\hbar\nabla - q\vec{A}$. Im Fall neutraler Teilchen mit verschwindender Ruhemasse (also z.B. für Photonen) reduziert sich die Klein-Gordon-Gleichung zur normalen Wellengleichung $\square\psi=0$. Wenn die Potentiale zeitunabhängig sind, ist die Klein-Gordon-Gleichung analog zur Schrödingergleichung mit einem relativistischen Hamiltonoperator. Davon überzeugen wir uns, indem wir für stationäre

Lösungen den Ansatz $\psi(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$ machen. Wir führen die Größe $\hbar^2 k^2 = E_r^2/c^2 - m^2 c^2$ ein um die kinetische Energie zu beschreiben. Dann ist Gl. (3.1)

$$\left(\hbar^2 k^2 - 2E_n q \phi / c^2 + q^2 \phi^2 / c^2 - \hat{\pi}^2 \right) \psi_n(\vec{r}) = 0$$

und wir können schreiben

$$\left(\hbar^2 k^2 - 2m \hat{H}_{\text{rel}} \right) \psi_n = 0 \quad \hat{H}_{\text{rel}} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} + \frac{V E_n}{m c^2} - \frac{V^2}{2m c^2}$$

Daraus erhalten wir den nichtrelativistischen Grenzfall für $E_n/mc^2 \rightarrow 1$ und $E_r = c\sqrt{\hbar^2 k^2 + m^2 c^2} \simeq mc^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ haben wir $\hat{H}_{\text{rel}} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} + V$ und $2m(E_n - mc^2 - \hat{H}_{\text{rel}})\psi_n = 0$. Für freie Teilchen hat die Klein-Gordon-Gleichung wiederum Lösungen als ebene Wellen.

Wir wollen jetzt die Wahrscheinlichkeitsstruktur unter dieser Gleichung näher anschauen. In der nichtrelativistischen Quantenmechanik haben wir eine Kontinuitätsgleichung der Form

$$\dot{\rho} + \nabla \cdot \vec{j}_W = 0$$

mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}_W = \frac{1}{m} \text{Re}(\psi^* \hat{\pi} \psi)$. In relativistischer Notation sind Kontinuitätsgleichungen von der Form $\partial_\mu j_W^\mu = 0$. Die natürliche relativistische Verallgemeinerung ist

$$j_W^\mu = \psi^* \hat{\pi}^\mu \psi + \psi \hat{\pi}^{*\mu} \psi^*$$

Wir verifizieren die Kontinuitätsgleichung wie folgt

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_\mu j_W^\mu &= i\hbar (\partial_\mu \psi^*) \hat{\pi}^\mu \psi + \psi^* \hat{\pi}^\mu (i\hbar \partial_\mu \psi) - \text{c.c.} \\ &= \left[(q\tilde{A}_\mu - \pi_\mu^*) \psi^* \right] \pi^\mu \psi + \psi^* (\pi_\mu - qA_\mu) \pi^\mu \psi - \text{c.c.} \end{aligned}$$

Wir benutzen nun die Klein-Gordon-Gleichung und finden, dass $\psi \pi^{*\mu} \pi_\mu \psi = m^2 c^2 |\psi|^2$ rein reell ist und bei der Subtraktion mit dem konjugiert komplexen herausfällt. Gleiches gilt für $(\pi_\mu^* \psi^*) \pi^\mu \psi$. Die beiden Terme mit A_μ heben sich ebenfalls heraus. Damit erfüllt j_W^μ die Kontinuitätsgleichung und ist bis auf Vorfaktoren der physikalische 4-Wahrscheinlichkeitsstrom. Das ist für die drei räumlichen Komponenten auch leicht gesehen, da dies die relativistische Version des gewöhnlichen Wahrscheinlichkeitsstroms ist. Wir haben uns damit aber eine recht komplizierte Wahrscheinlichkeitsdichte eingehandelt mit

$$c\rho_W = j^0 = \frac{1}{c} (\psi^* (i\hbar \partial_t - V) \psi + \text{c.c.}) = \frac{1}{c} \psi^* \left[-i\hbar \overleftarrow{\partial}_t + i\hbar \partial_t + 2q\phi \right] \psi$$

wobei wir uns merken, dass $\overleftarrow{\partial}$ das zur Linken stehende Objekt differenziert. Wir interpretieren das als Re-Interpretation des Skalarproduktes. Für stationäre Zustände mit Energien $E_{a/b}$ können wir sehen

$$\langle a|b \rangle = \frac{1}{c} \int d^3r \psi_a^*(E_a + 2q\phi) \psi_b \simeq 2mc \int d^3r \psi_a^* \psi_b$$

wobei wir am Ende einsetzen, dass im nichtrelativistischen Limes Potenziale klein sind und die Energien beide bis auf kleine Korrekturen die Ruheenergie mc^2 sind. Diese Umdefinition des Skalarprodukts wird bei der Diracgleichung zu interessanten Voraussagen führen. Wir verlassen hiermit die Klein-Gordon-Gleichung, da uns Elektronen näher liegen als z.B. Pionen.

3.3 Nichtrelativistisches Teilchen mit Spin: Pauligleichung

In der einfachsten Behandlung des Wasserstoffatoms (oder anderer elektronischer Systeme) in einer Ihrer früheren Vorlesungen haben Sie vermutlich das Elektron als spinloses Teilchen behandelt. Tatsächlich hat das Elektron einen Spin $1/2$. Im tief nichtrelativistischen Fall hat der nur die Auswirkung, dass die Energieniveaus in einem Magnetfeld eine Zeemanaufspaltung zeigen. Wir suchen jetzt eine Formulierung der Schrödingergleichung, die diese Zeemanaufspaltung gleich eingebaut hat, und die wir dann hoffentlich einfach relativistisch verallgemeinern können (mathematisch orientierte Menschen würden natürlich andersherum vorgehen). Diese Gleichung wirkt natürlich auf Spinoren, d.h. wir schreiben

$$|\psi\rangle = \chi_\uparrow |\uparrow\rangle + \chi_\downarrow |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} \chi_\uparrow \\ \chi_\downarrow \end{pmatrix}.$$

Das wird bewerkstelligt von der Pauligleichung, also der Schrödingergleichung mit dem Hamilton

$$\hat{H}_P = \frac{(\hat{\pi} \cdot \hat{\sigma})^2}{2m} + \hat{V}.$$

Hier ist $\hat{\sigma}$ der Vektor aus den drei Paulimatrizen. Wir schauen uns die Terme der kinetischen Energie genauer an. Zunächst haben wir

$$(\nabla \cdot \hat{\sigma})^2 = \sum_{ij} \partial_i \partial_j \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \sum_i \partial_i^2 + \sum_{i < j} \partial_i \partial_j \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = \sum_i \partial_i^2$$

hier haben wir im zweiten Schritt die Summe nach diagonalen und nichtdiagonalen Termen getrennt und die nichtdiagonalen paarweise zusammengefasst. Wie immer ist $\{\cdot, \cdot\}$ der Antikommutator. Zur Vereinfachung der Terme haben wir die Paulialgebra

$$\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l = \hat{1} \delta_{kl} + i \sum_m \epsilon_{klm} \hat{\sigma}_m \quad (3.2)$$

bzw das darauf folgende Korrolar $\{\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l\} = 2\hat{1} \delta_{kl}$ genutzt. Der quadratische Term der kinetischen Energie hat also die gewohnte Form (das gleiche Argument eliminiert die Paulimatrizen aus dem Term mit \hat{A}^2 . Der lineare Term ist (in jeder

Eichung)

$$\begin{aligned}
& -i \left(\nabla \cdot \hat{\sigma} \right) \left(\vec{A} \cdot \hat{\sigma} \right) - i \left(\vec{A} \cdot \hat{\sigma} \right) \left(\nabla \cdot \hat{\sigma} \right) = \\
& -i \left(\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla \right) + \sum_j \epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_j \left(\partial_k A_l + A_k \partial_l \right)
\end{aligned}$$

wobei wir die Paulialgebra Gl. (3.2) benutzt haben. Der erste Term entspricht dem spinlosen Fall. Den letzten Term schreiben wir als Kreuzprodukt um

$$\sum_j \epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_j \left(\partial_k A_l + A_k \partial_l \right) = \hat{\sigma} \left[\nabla \times \vec{A} + \vec{A} \times \nabla \right] = \hat{\sigma} \cdot \vec{B}$$

im letzten Schritt haben wir beachtet, dass es sich hier um einen Operator handelt, die ganze Konstruktion also nach rechts auf eine Wellenfunktion wirkt, und erst in dieser Kombination sichergestellt wird, dass der Nablaoperator lediglich aus dem Vektorpotenzial ein Magnetfeld macht. Insgesamt haben wir also zerlegt

$$\hat{H}_P = \frac{\hat{\pi}^2}{2m} + V + \frac{\hbar q}{2m} \vec{B} \cdot \hat{\sigma}$$

also den Zeemaneffekt hergeleitet.

3.4 Die Diracgleichung

Wir wollen jetzt den Spin so behandeln, wie in der Pauligleichung und die Bewegung so, wie in der Klein-Gordon-Gleichung, um eine relativistische Gleichung für Elektronen zu erhalten¹. Dies führt zunächst zur Kramersgleichung

$$\left(\hat{\pi}^0 + \hat{\pi} \cdot \hat{\sigma} \right) \left(\hat{\pi}_0 - \hat{\pi} \cdot \hat{\sigma} \right) \psi = m^2 c^2 \psi.$$

Neben dem schon im vorangegangenen Kapitel berechneten Produkt $\left(\hat{\sigma} \cdot \hat{\pi} \right)^2$ enthält dieser Ausdruck auch den Kommutator

$$\left[\hat{\pi} \cdot \hat{\sigma}, \pi^0 \right] = iq \hbar \hat{\sigma} \cdot \vec{E}.$$

Damit taucht auch das elektrische Feld auf, wie es in einer lorentzinvarianten Gleichung natürlich sein muss. Ausgeschrieben in physikalischen Feldern ist die Kramersgleichung also

$$\left[\hat{\pi}_\mu \hat{\pi}^\mu - \hbar q \hat{\sigma} \cdot \left(\vec{B} - i \vec{E} \right) \right] \psi = m^2 c^2 \psi. \quad (3.3)$$

¹Eine wesentlich axiomatischere Methode, die auf tiefere Grundprinzipien zurückgreift, wäre der Aufbau dieses Kapitels auf der Theorie von Liegruppen und ihrer Darstellung. Dies würde zu weit führen, aber es beruhigt hoffentlich, dass es so etwas gibt

Da dies eine quadratische Gleichung ist empfiehlt es sich, einen Hilfsspinor $\tilde{\psi}$ einzuführen und die Gleichung aufzuteilen als

$$\begin{aligned} (\hat{\pi}^0 - \hat{\vec{\pi}} \cdot \hat{\vec{\sigma}}) \psi &= mc\tilde{\psi} \\ (\hat{\pi}^0 + \hat{\vec{\pi}} \cdot \hat{\vec{\sigma}}) \tilde{\psi} &= mc\psi \end{aligned} \quad (3.4)$$

Wir können also eine Gleichung in einem Raum vierdimensionaler Spinoren aufstellen, wobei wir definieren

$$\psi_D = \begin{pmatrix} \psi \\ \tilde{\psi} \end{pmatrix} \quad \hat{\alpha} = \begin{pmatrix} \hat{\vec{\sigma}} & 0 \\ 0 & -\hat{\vec{\sigma}} \end{pmatrix} \quad \gamma = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^0 \\ \sigma^0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Damit hat die Diracgleichung die mathematische Form der Schrödingergleichung $i\hbar\partial_t\psi_D = \hat{H}_D\psi_D$ mit dem Dirachamilton

$$\hat{H}_D = -q\phi + c\hat{\vec{\pi}} \cdot \hat{\vec{\alpha}} + mc^2\gamma^0, \quad (3.5)$$

allerdings für die vierdimensionalen Spinoren. Ist diese Gleichung tatsächlich Lorentzinvariant? Das hängt natürlich ab, wie wir die Vierer-Spinoren transformieren. Wir werden sehen, dass die Spinoren *keine* Lorentz 4-Vektoren sind. Den Lorentzboost können wir beschreiben wie eine Drehung um einen imaginären Winkel als

$$\begin{aligned} t' &= t \cosh \eta + x \sinh \eta \\ x' &= t \sinh \eta + x \cosh \eta \end{aligned}$$

wobei wir die Rapidität η eingeführt haben mit $\tanh \eta = -v/c$. Spinoren drehen sich unter räumlichen Drehungen um eine Drehachse $\vec{\phi}$ wie $\chi \rightarrow e^{-i\vec{\phi} \cdot \hat{\vec{\sigma}}/2}\chi$, also vermuten wir, dass die Lorentztransformation analog die Form hat $\chi \rightarrow SH\chi$ mit

$$SH = e^{\vec{\eta} \cdot \hat{\vec{\sigma}}/2} = \cosh\left(\frac{\eta}{2}\right) + \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\eta} \sinh\left(\frac{\eta}{2}\right).$$

Wir wählen jetzt der Einfachheit halber $\vec{\eta} = \eta\hat{z}$ und transformieren die erste Zeile von Gl. (3.4) indem wir berechnen

$$\begin{aligned} (\pi^0 - \vec{\pi} \cdot \vec{\sigma}) &\rightarrow (\pi^0 \cosh \eta + \pi^3 \sinh \eta - \sigma_z \pi^3 \cosh \eta - \sigma_z \pi^0 \sinh \eta - \sigma_x \pi_x - \sigma_y \pi_y) SH \\ &= \begin{pmatrix} e^{-\eta} (\pi^0 - \pi^3) & -\pi_x + i\pi_y \\ -\pi_x - i\pi_y & e^{\eta} (\pi^0 + \pi^3) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\eta/2} & 0 \\ 0 & e^{-\eta/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-\eta/2} & 0 \\ 0 & e^{\eta/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\pi^0 - \pi^3) & -\pi_x + i\pi_y \\ -\pi_x - i\pi_y & (\pi^0 + \pi^3) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Damit schließt sich die Gleichung, wenn wir die unteren Komponenten nach $\tilde{\psi} \rightarrow SH(-\eta)\tilde{\psi}$ transformieren. Als Beispiel studieren wir ein freies Teilchen, $A^\mu = 0$. Wir versuchen die ebene Welle als Ansatz

$$\psi_k = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} u(\vec{k}, m_s)$$

Sie können dies lösen, wenn Sie für niedrige kinetische Energien, $k \rightarrow 0$, das System lösen und dann nach dem obigen Rezept einen Lorentzboost ausführen (Übung). Hier wollen wir $u(\vec{k}, m_s)$ direkt finden. Wir sehen in Gl (3.4) dass das Produkt $\vec{k} \cdot \vec{\sigma}$ eine prominente Rolle spielt. Wir arbeiten also in der Basis der Eigenzustände dieser Größe, der *Helizitätsbasis*, d.h. wir setzen an dass die der vierdimensionale Spinor u aus zwei zweidimensionalen Spinoren χ aufgebaut ist mit

$$\frac{1}{2} \hat{\sigma} \cdot \vec{k} \chi(\lambda) = \frac{k}{2} \hat{\sigma} \cdot \vec{e}_k \chi(\lambda) = \lambda k \chi(\lambda)$$

wobei $\vec{e}_k = \vec{k}/k$ und die Helizität $\pm 1/2$ ist. Physikalisch bedeutet das, dass Spin und Bahnbewegung abhängig sind und der Spin gegenüber dem Impuls eine Rechts- (+1/2) oder Linksschraube (-1/2) bildet. Wir können damit zwei unabhängige Eigenspinoren für das freie Teilchen bilden. Für die ψ -Komponente haben wir $u = \sqrt{E/c + 2\hbar k} \chi(\lambda)$ und für die $\tilde{\psi}$ -Komponente haben wir, um dementsprechend $\tilde{u} = \sqrt{E/c - 2\hbar k} \chi(\lambda)$. Interessant ist der hochrelativistische Grenzfall. In diesem ist $E_r \simeq \hbar k c$ und damit ist die rechtshändige Lösung in der ψ und die linkshändige Lösung in der $\tilde{\psi}$ -Komponente angesiedelt.

3.4.1 Parität und nichtrelativistischer Limes

Wir interessieren uns jetzt für zwei besonders einfache Lorentztransformationen: Die Zeitumkehr $t \rightarrow -t$ und die Rauminversion (Parität) $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Die Parität spiegelt Vektoren

$$\vec{A} \rightarrow -\vec{A} \quad \phi \rightarrow \phi \quad \vec{\pi} \rightarrow -\vec{\pi} \quad \pi^0 \rightarrow \pi^0$$

Da sich die Gradientenbildung auch spiegelt haben wir also insgesamt $\vec{B} - i\vec{E}/c \rightarrow \vec{B} + i\vec{E}/c$ und damit in der Kramersgleichung Gl. (3.3) eine komplexe Konjugation. Damit ist die Diracgleichung nicht invariant, muss wohl aber kovariant sein (d.h., es muss eine Transformation geben, die der Parität entspricht). In der Klein-Gordon Gleichung haben wir nur $\vec{\pi}^2$, also Paritätsinvarianz. Da sich der Drehimpuls $\vec{J} = \vec{r} \times \vec{p}$ unter Parität nicht ändert, gilt gleiches für $\vec{\sigma}$ und darum geht $\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \rightarrow -\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}$. Zur Garantie der Paritäts-Kovarianz der Diracgleichung brauchen wir also

$$\psi \rightarrow \tilde{\psi} \quad \tilde{\psi} \rightarrow \psi \quad \psi_D \rightarrow \gamma^0 \psi_D.$$

Vielfach haben wir einen (ungestörten) Hamilton, der selbst Paritätsinvariant ist, z.B. in rein skalaren Feldern, also für $\vec{A}=0$. In diesem Fall können wir in der Paritätseigenbasis

$$\psi_{\pm} = (\psi \pm \tilde{\psi}) / \sqrt{2} \quad P \psi_{\pm} = \pm \psi_{\pm}$$

arbeiten. Damit ergibt sich statt der Diracgleichung in Weyl-Schreibeweise, Gl. (3.4)

$$(\pi_0 \mp mc) \psi_{\pm} = \hat{\pi} \cdot \hat{\sigma} \psi_{\mp}$$

Für stationäre Lösungen ist $\pi_0 = E_r/c - q\phi/c = mc + E/c - q\phi/c$ und wir können auflösen

$$\begin{aligned}\psi_- &= (mc + E/c - V/c)^{-1} \vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \psi_+ = \frac{1}{2mc} \left(1 + \frac{E - q\phi}{2mc^2}\right)^{-1} \vec{\pi} \cdot \vec{\sigma} \psi_+ \quad (3.6) \\ &\simeq \frac{\vec{\pi} \cdot \vec{\sigma}}{2mc} \left(1 - \frac{E - q\phi}{2mc^2}\right) \psi_+ \quad (3.7)\end{aligned}$$

wobei wir am Ende den nichtrelativistischen Limes genommen haben. Die nichtrelativistische Wellenfunktion ist also im Wesentlichen ψ_+ . Als effektive Bewegungsgleichung haben wir, unter Benutzung von Gl. (3.6)

$$(E - V)\psi_+ = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\psi_+ \simeq \left[\frac{(\vec{\pi} \cdot \vec{\sigma})^2}{2m} + V_{LS} \right] \psi_+$$

Damit haben wir die Pauligleichung mit dem Zusatzterm

$$V_{LS} = \hat{\sigma} \cdot \left[\hat{\vec{\pi}}, V \right] \frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{\pi}}}{4m^2 c^2}$$

der die niedrigste relativistische Korrektur darstellt. Physikalisch entsteht dieser Term dadurch, dass ein bewegtes Elektron sein bindendes Potenzial V , das ja durch eine Ladung erzeugt wird, wie das Potenzial eines Stromes, also ein Vektorpotenzial ansieht. Dieses im Ruhesystem des Elektrons entehende Vektorpotenzial induziert einen Zeemaneffekt.

Wie können wir diesen Term physikalischer schreiben? Wir stellen fest, dass

$$\hat{\sigma} \cdot \left[\hat{\vec{\pi}}, V(r) \right] = -i\hbar \hat{\sigma} \cdot \vec{e}_r V'$$

wobei der Strich die Differenziation nach dem (einzigen) Argument (hier r) andeutet. Wenn kein äußeres Magnetfeld anliegt ist $\hat{\vec{\pi}} = \hat{\vec{p}}$ und wir können auflösen

$$\left(\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{r}} \right) \left(\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}} \right) = \sum_{i,j} \hat{\sigma}_i r_i \hat{\sigma}_j \hat{p}_j = \sum_i r_i \hat{p}_i + i \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} r_i \hat{p}_j \hat{\sigma}_k = \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{p}} + i \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\sigma}.$$

Hier kam zur Auflösung des Produkts aus Paulimatrizen die Identität (3.2) zum Einsatz, sowie die Definition des Vektorprodukts. $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ ist der Bahndrehimpuls. Der qualitativ neue Term ist also

$$V_{LS} = \frac{\hbar \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\sigma}}{4m^2 c^2 r} V'$$

die bekannte Spin-Bahn-Kopplung. Wir diskutieren jetzt ihren Effekt auf das Spektrum des Wasserstoffatoms.

3.4.2 Feinstruktur des Wasserstoffatoms

Nicht behandelt, nicht überarbeitet!

Wir studieren jetzt den Einfluss der Spin-Bahn-Kopplung auf das Wasserstoffatom, d.h. wir betrachten den Hamilton

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{LS} \quad \hat{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2mr^2} \hat{L}^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + V(r) \quad V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Wir hatten ursprünglich die Eigenwerte des Bahndrehimpulses als gute Quantenzahlen, jetzt brauchen wir aber den Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}$. Dieser vertauscht in der Tat mit dem Hamilton. Wir zeigen das, indem wir zunächst aufspalten

$$\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{\sigma}_x \hat{L}_x + \hat{\sigma}_y \hat{L}_y + \hat{\sigma}_z \hat{L}_z = \hat{\sigma}_z \hat{L}_z + \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_+ \hat{L}_- + \hat{\sigma}_- \hat{L}_+) = \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & -\hat{L}_z \end{pmatrix}.$$

Hier haben wir Heber und Senker eingeführt nach $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ und die letzte Matrix ist im Hilbertraum des Spins geschrieben. Wir brauchen den Vertauscher

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm \hat{L}_\pm.$$

Damit können wir zeigen, dass $[\hat{L}_z, \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{L}}] = -\hat{\sigma}_+ \hat{L}_- + \hat{\sigma}_- \hat{L}_+$ und $\frac{1}{2} [\hat{\sigma}_z, \hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{L}}] = \hat{\sigma}_+ \hat{L}_- - \hat{\sigma}_- \hat{L}_+$, damit vertauscht \hat{J}_z mit V_{LS} . Für

$$\vec{J}^2 = \left(\hat{\vec{L}} + \frac{1}{2} \hat{\vec{\sigma}} \right)^2 = \hat{L}^2 + \frac{1}{4} \hat{1} + \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{\sigma}}$$

gilt das klarerweise auch. Damit sind die Eigenwerte von \vec{J}^2 und \vec{J} gute Quantenzahlen. Wir wollen jetzt die Eigenzustände von \vec{J} aus denen von $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{\sigma}}$ basteln. Dies ist ein Spezialfall der Clebsch-Gordan-Theorie, die aus der Darstellungstheorie von Liegruppen entwickelt wurde. Liegruppen sind Gruppen, die durch kontinuierliche Parameter charakterisiert werden - hier ist es die Drehgruppe. In der Quantenphysik wird sie allemeint zur Addition von Drehimpulsen entwickelt. Hier haben wir das Beispiel, in dem einer der Drehimpulse $1/2$ ist.

Wir schreiben Zustände des Gesamtdrehimpuls $|j, m_j\rangle_j$ und Summandenzustände als $|l, m_l, m_s\rangle$. Wir starten vom maximal polarisierten Zustand

$$|l + 1/2, l + 1/2\rangle_j = |l, l, 1/2\rangle \quad (3.8)$$

Auf den wenden wir \hat{J}_- an und erhalten, nach der bekannten Drehimpulsformel

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = \sqrt{j+m} \sqrt{j-m+1} |j, m-1\rangle$$

Anwendung auf Gl. (3.8) ergibt

$$\sqrt{2l+1} |l + 1/2, l - 1/2\rangle_j = \sqrt{2l} |l, l - 1, 1/2\rangle + |l, l, -1/2\rangle \quad (3.9)$$

also haben wir normiert $|l+1/2, l-1/2\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}|l, l-1, 1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2l+1}}|l, l-1, 1/2\rangle$. Diese Anwendung können wir weiter treiben, bis wir $|l+1/2, -l-1/2\rangle_j = |l, -l, -1/2\rangle$ erreichen.

Die beiden Drehimpulse können sich aber auch so addieren, dass der Gesamtdrehimpuls $j-1/2$ ist. Der maximal polarisierte Zustand in diesem Unterraum ist $|j-1/2, j-1/2\rangle$. Er muss eine Linearkombination aus $|l, l-1, 1/2\rangle$ und $|l, l, -1/2\rangle$ sein und außerdem senkrecht auf $|j+1/2, j-1/2\rangle$ stehen. Nach Gl. (3.9) ist damit, bis auf eine unphysikalische globale Phase, festgelegt

$$|l-1/2, l-1/2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2l+1}}|l, l-1, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}|l, l, -1/2\rangle.$$

Auch hier können wir weiterhin den Senker anwenden um die ganze Leiter zu konstruieren. Wenn wir alles zusammenfassen, erhalten wir eine Darstellung

$$|j, m_j\rangle_j = \sum_{\sigma=\pm 1/2} (\sigma, m_j - \sigma |jm_j) |l, m_j - \sigma, \sigma\rangle$$

mit den Clebsch-Gordan Koeffizienten

$$\begin{aligned} \left(1/2, m_j - 1/2 | l \pm \frac{1}{2}, m_j\right) &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \\ \left(-1/2, m_j + 1/2 | l \pm \frac{1}{2}, m_j\right) &= \sqrt{\frac{l \mp m + 1/2}{2l+1}} \end{aligned}$$

Wir können auch kompakt schreiben

$$|l \pm 1/2, m\rangle_j = \pm \sqrt{\frac{l \pm m + 1/2}{2l+1}} |l, m-1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{l \mp m + 1/2}{2l+1}} |l, m+1/2, -1/2\rangle. \quad (3.10)$$

Damit können wir die Feinstruktur ausrechnen. Die Eigenzustände des H-Atoms (mit Spin, ohne Magnetfeld und V_{LS}) sind gegeben durch $|n_r, l, m, \sigma\rangle$ wobei n_r die radiale Quantenzahl ist und $l = 0 \dots n-1$. Die Eigenenergien sind

$$E_n = -\frac{R}{n^2} \quad n = n_r + l + 1 \quad R \simeq 13.6 \text{ eV}.$$

Die Kombination n heißt Hauptquantenzahl. Die Zustände, aus denen sich nach Gl. (3.10) konstruieren sind also energetisch entartet. Nach den Regeln der entarteten Störungstheorie nehmen wir also die $|l \pm 1/2, m\rangle_j$ als neue Eigenbasis und erhalten als Energieverschiebung in erster Ordnung

$$E_{njl}^{(1)} = \frac{\hbar^2 q^2 a_B^{-3}}{4m^2 c^2 n^2 (l+1/2)} \times \begin{cases} \frac{1}{l+1} & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{l} & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

dies beschreibt die Feinstruktur der Spektrallinien von Wasserstoff.

3.4.3 CPT-Symmetrie und Positronen

Wir haben oben schon die Paritäts- und Zeitumkehrsymmetrie studiert und daraus den klassischen Limes der Diracgleichung erhalten. Jetzt wollen wir den hochrelativistischen Fall studieren. Wir steigen ein via der Ladungskonjugation

$$A^\mu \rightarrow -A^\mu \quad \psi \rightarrow \psi^*$$

Für die Klein-Gordon-Gleichung führt diese Transformation dazu, beide Seiten komplex zu konjugieren und damit ist diese invariant. Wie sieht das bei der Diracgleichung aus? Wir schreiben die Diracgleichung mittels Paulimatrizen $\hat{\alpha} = \hat{\sigma}\hat{\gamma}_5$ mit der fünften Paulimatrix

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix}.$$

Damit erhalten wir als Diracgleichung

$$\left(\hat{\pi}^0 - \hat{\vec{\pi}} \cdot \hat{\vec{\sigma}}\gamma_5 \right) \psi_D = mc\gamma_0\psi_D.$$

Das generiert die Diracalgebra, wobei folgende Relationen

$$\gamma_5^2 = \gamma_0^2 = 1 \quad \{\gamma_5, \gamma_0\} = 0$$

nützlich sind. Jetzt schauen wir uns die konjugiert komplette Diracgleichung an

$$\left(\hat{\pi}^{0*} - \hat{\vec{\pi}}^* \cdot \hat{\vec{\sigma}}^*\gamma_5 \right) \psi_D^* = mc\gamma_0\psi_D^*$$

Die Paulimatrizen sind zwar hermites, aber nicht reell - wir müssen zumindest $\hat{\sigma}_y$ herumdrehen. Das geht nicht unitär, aber mit

$$\hat{\vec{\sigma}}^* = -\hat{U}_c^\dagger \hat{\vec{\sigma}} \hat{U}_c \quad \hat{U}_c = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = e^{-i\pi\hat{\sigma}_y/2} = -i\hat{\sigma}_y \quad \hat{U}_c^\dagger \hat{U}_c = \hat{1}.$$

Damit haben wir transformiert

$$\left(\hat{\pi}^{0*} + \hat{\vec{\pi}}^* \cdot \hat{\vec{\sigma}}\gamma_5 \right) \hat{U}_c = mc\gamma_0\hat{U}_c\psi_D^*.$$

Das relative Minuszeichen aus der Nicht-Unitarität der Transformation mit \hat{U}_c können wir kompensieren durch die Vertauschung von ψ und ψ^* mittels γ^0 . Durch das komplette konjugieren haben wir ein weiteres minus aus $\hat{\pi}_c^{\mu*} = -\hat{\pi}^\mu$, kompensiert wird also alles durch

$$A_c^\mu = -A^\mu \quad \psi_{DC} = \gamma_5\gamma_0\hat{U}_c\psi_D^*.$$

Wir erhalten somit

$$\left(-\hat{\pi}_0^* + \hat{\vec{\pi}}^* \cdot \hat{\vec{\sigma}}\gamma_5 \right) \gamma_5\gamma_0\hat{U}_c\psi_D^* = -mc\gamma_5\hat{U}_c\psi_D^*.$$

Wir multiplizieren diesen Ausdruck nun mit γ_5 und U_C , die ja jeweils ihre eigenen Inversen sind. Damit fallen diese Terme heraus bis auf ein Minuszeichen. Damit ist dann die Ladungskonjugierte Diracgleichung die komplexkonjugierte Diracgleichung. C ist eine innere Symmetrie der Theorie, keine Lorentzsymmetrie.

Die Zeitumkehr ist bedeutend einfacher

$$\vec{A} \rightarrow -\vec{A} \quad \phi \rightarrow \phi$$

Damit geht

$$\hat{\pi}^0 - \hat{\vec{\pi}} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \gamma_5 \rightarrow \hat{\pi}^{0*} + \hat{\vec{\pi}}^* \cdot \hat{\vec{\sigma}} \gamma_5$$

Was sich wiederum mittels \hat{U}_C auf das rein komplexkonjugierte $\hat{\pi}^{0*} - \hat{\vec{\pi}}^* \cdot \hat{\vec{\sigma}}^* \gamma_5$ transformieren lässt. Damit ist

$$\psi_{DT} = \hat{U}_C \psi_D.$$

Interessant weil einfach ist die Anwendung aller drei Spiegelungen CPT. Diese transformiert

$$A^\mu \rightarrow -A^\mu \quad \psi_D \rightarrow -\gamma_5 \psi_D.$$

Für diese Vorlesung lassen alle drei Symmetrien, C, P, und T, die Theorie kovariant, d.h. wir können jeweils eine Transformation der Wellenfunktion finden, so dass die symmetrietransformierte Diracgleichung äquivalent zur ursprünglichen Diracgleichung ist. Allerdings ändert sich das, wenn wir die schwache Wechselwirkung dazunehmen - da wird die Parität verletzt. Beim Zerfall von K-Mesonen stellt sich heraus, dass das Standardmodell auch CP verletzt und nur CPT eine Symmetrie des Standardmodells ist.

Unter der Ladungskonjugation ändern wir (durch die komplexe Konjugation) auch die Energie des Teilchens. Anders gesagt: Wie bei der quadratischen Form der Klein-Gordon-Gleichung klar und bei der Diracgleichung implizit auch, gibt es zu jeder Lösung mit Energie E auch eine mit Energie $-E$. Damit scheinen relativistische Teilchen keinen Grundzustand zu kennen und die Theorie erscheint unphysikalisch. Die Idee ist aber, dass die Zustände negativer Energie im Vakuum besetzt sind (Diracsee). Damit gibt es also keine Einteilchengleichungen, sondern wir müssen immer mit dem Fockraum rechnen und "ein Elektron" bedeutet "Diracsee plus ein Elektron". Die Diracspinoren sind also als zweitquantisierte Feldoperatoren zu betrachten. Genügend Energie $E > 2mc^2$ erlaubt es, Elektronen von $E_k < 0$ nach $-E_{k>0}$ zu befördern, also Energie in Teilchen umzuwandeln. Die Vakanz im Diracsee heißt Positron. Als Beispiel kennen wir den g-Faktor des Elektrons, der laut Diracgleichung ja 2 ist. Tatsächlich kann das Elektron mit virtuellen Photonen und e-p-Paaren wechselwirken. Diese Wechselwirkung erhöht den Zahlenwert leicht.

3.5 Zitterbewegung

Zitterbewegung (deutsches und englisches Wort) ist eine einfache Konsequenz der Diracgleichung. Wir benutzen den Dirachamilton Gl. 3.5 auf Seite 38 feld-

freien Fall. Die Heisenberg-Bewegungsgleichung für die k -te Impulskomponente ist

$$\hbar \dot{x}_k = i \left[\hat{H}_d, x_k \right] = c \hat{\alpha}_k.$$

Damit spielt $\hat{\alpha}_k$ die Rolle eines Geschwindigkeitsoperators in 4-Dimensionalen Diracraum. Wir benutzen $\alpha_k = \gamma_0 \gamma_k$ und für Diracalgebra und finden

$$\hbar \partial_t \hat{\alpha}_k = i \left[\hat{H}, \hat{\alpha}_k \right] = 2 (im \hat{\gamma}_k - \hat{\sigma}_{kl} \hat{p}_l)$$

wobei $\hat{\sigma}_{kl} = \frac{i}{2} [\hat{\gamma}_k, \hat{\gamma}_l]$ ist. Wir benötigen jetzt ein wenig Diracalgebra (Beweise teilweise Übungsblatt): Die Gamma-Matrizen $\gamma_k = \gamma_0 \alpha_k$ ausgeschrieben also

$$\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{\sigma}_k \\ \hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix} \quad k = 1, 2, 3$$

multiplizieren sich klarerweise zu $\{\hat{\gamma}_\mu, \hat{\gamma}_\nu\} = 2g_{\mu\nu} \hat{1}$ unter Zuhilfenahme des metrischen Tensors. Damit ist $\hat{\sigma}_{kk} = 0$ und für $k \neq l$

$$\hat{\sigma}_{kl} = i \hat{\gamma}_k \hat{\gamma}_l = \sum \epsilon_{klm} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_m & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_m \end{pmatrix}$$

ist. Wir würden jetzt gerne die α Matrizen herausziehen. Das funktioniert, wenn wir zunächst untersuchen $\hat{\alpha}_k \hat{H}_D$. Dies liefert uns, basierend auf dem Antikommutator zwischen den $\hat{\alpha}_k$ den Ausdruck

$$\hat{\alpha}_k \hat{H}_D = mc^2 \hat{\alpha}_k \hat{\gamma}_0 + c \sum_l \hat{p}_l \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_l = -mc^2 \hat{\gamma}_k + c \hat{p}_k + ic \sum \epsilon_{klm} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_m & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_m \end{pmatrix}$$

Damit erhalten wir

$$\hbar \partial_t \hat{\alpha}_k = 2i \left(\hat{p}_k - \hat{\alpha}_k \hat{H} \right)$$

Für die Zeitabhängigkeit der Geschwindigkeit integrieren wir ein mal

$$\hat{\alpha}_k(t) = \hat{\alpha}_k(0) e^{-2i\hat{H}t/\hbar} + c \hat{p}_k \hat{H}^{-1}.$$

Und noch einmal integriert

$$\hat{x}_k(t) = \hat{x}_k(0) + c^2 \hat{p}_k \hat{H}^{-1} + \frac{1}{2} i \hbar c \hat{H}^{-1} \left(\hat{\alpha}_k(0) - c \hat{p}_k \hat{H}^{-1} \right) \left(e^{-2i\hat{H}t/\hbar} - 1 \right)$$

Die ersten beiden Terme entsprechen einem leicht korrigierten relativistischen Teilchen (beachten Sie dass im nichtrelativistischen Limes $\hat{H}^{-1} \simeq (mc^2)^{-1}$). Interessant ist der letzte Term, der schwingt auf einer Energieskala, die durch die Energieeigenwerte gegeben ist, also etwa auf einer Längenskala der Comptonwellenlänge, aber nur, wenn das Wellenpaket Teilchen- und Antiteilchenanteile hat - sonst gibt das nur eine globale Phase.

3.6 Kleinsches Paradox (nicht behandelt)

Im kleinschen Paradox behandeln wir die Transmission durch eine Barriere. Der Einfachheit halber, beschreiben wir massenlose Fermionen (z.B. Neutrinos). In diesem Fall entkoppelt die Diracgleichung in zwei Gleichungen für nichtrelativistische Spinoren und wir haben für Teilchenpropagation in x-Richtung

$$(\hat{\sigma}_x \hat{p}_x + V) \psi = E \psi.$$

Wir wählen eine Potenzialstufe $V(x) = V_0 \theta(x)$ ausgedrückt durch die Heavisidefunktion. Die Eigenzustände mit positiver Helizität können geschrieben werden als

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ipx} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + A' e^{-ipx} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} & \text{für } x < 0 \\ B e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

wobei $k = V_0 - E$ ist. Die Wellenfunktion ist nur stetig, wenn $A = B$ und $A' = 0$ ist. Mit anderen Worten, die Barriere kann den Spin nicht drehen. Damit ist der Reflexionskoeffizient =0 und die Transmission =1. Interessanterweise findet man ähnliche Ergebnisse im massiven Fall.

Teil II

Statistische Mechanik für Fortgeschrittene

Kapitel 4

Phasenübergänge

4.1 Allgemeines

4.1.1 Gebrochene Symmetrie

Ein Phasenübergang ist eine makroskopische Zustandsänderung. Wir behandeln also den kollektiven Zustand eines formal unendlichen, praktisch aus $O(10^{23})$ Teilchen bestehenden System. Kennzeichnend für einen Phasenübergang zweiter Ordnung ist es, dass diese Zustandsänderung stetig erfolgt, die Symmetrie des Zustands sich aber schlagartig ändert. Was meinen wir damit? Der Zustand des Systems ist unter höherer Temperatur / niedrigerem Druck ungeordnet und ordnet sich bei Temperaturabsenkung, Druckerhöhung. Diese Ordnung charakterisieren wir durch einen Ordnungsparameter η , dessen Erwartungswert in der ungeordneten Phase einen verschwindenden Erwartungswert hat, in der geordneten einen nichtverschwindenden. Die geordnete Phase hat damit eine erniedrigte Symmetrie - der Erwartungswert des Ordnungsparameters zeichnet eine Richtung aus, die dann nicht mehr Teil der Symmetriegruppe ist. Wir nennen die ungeordnete Phase darum auch die symmetrische Phase.

In einem Phasenübergang 1. Ordnung nimmt der Ordnungsparameter sofort am kritischen Punkt einen nichtverschwindenden Erwartungswert an, bei 2. Ordnung startet er stetig bei null.

Ein Beispiel für 1. Ordnung ist der fest-flüssig-Übergang. Die gebrochene Symmetrie ist die kontinuierliche räumliche Translations- und Rotationssymmetrie, die durch eine diskrete Gittersymmetrie ersetzt wird. Wir können z.B. die Vorfaktoren der Bragg-Reflexionspeaks als Ordnungsparameter ansehen, formal ausgedrückt durch die räumlichen Fourierkomponenten der Dichte. Wenn wir Wasser zu Eis frieren wissen wir, dass das Eis sofort kristalline Struktur hat. Wir wissen auch, dass der Übergang latente Wärme hat - wir können lange am Übergang bleiben und müssen dem System Wärme zuführen, bis der Phasen-

übergang geschafft ist. Das bedeutet formal, dass die Wärmekapazität

$$C_p = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_P$$

eine Singularität hat. Aufgrund dieser latenten Wärme können Sie Ihr Getränk mit Eiswürfeln auf Temperaturen nahe des Gefrierpunkts halten.

Ein Beispiel für einen Phasenübergang 2. Ordnung ist der Para-Ferromagnet. Der Ordnungsparameter hier ist die Magnetisierung \vec{M} , die gebrochene Symmetrie ist die Rotationssymmetrie um Achsen, die nicht zu \vec{M} parallel sind. An der Curietemperatur ist die Magnetisierung zunächst null, wächst dann aber bei weiterer Kühlung. Die Zustandsänderung ist also kontinuierlich, es tritt keine latente Wärme auf und die Wärmekapazität bleibt endlich (kann aber springen). In diesem Kapitel werden wir uns auf Phasenübergänge 2. Ordnung konzentrieren.

4.2 Ginzburg-Landau-Theorie

Wir starten mit der Beschreibung von Phasenübergängen 2. Ordnung mittels der phänomenologischen Ginzburg-Landau-Theorie. Ginzburg-Landau-Theorie ist breit anwendbar, beruht letztlich nur auf dem Konzept von Ordnungsparametern und gebrochener Symmetrie, und ist dennoch erstaunlich erfolgreich.

4.2.1 Ansatz: Sprung in der Wärmekapazität

Wir beschreiben das thermodynamische System in der Nähe des Phasenübergangs durch ein thermodynamisches Potenzial, die freie Enthalpie $\Phi(T, p, \eta)$. Die Stetigkeit des Phasenübergangs erfordert, dass am kritischen Punkt $(T_c(p), p)$ der Ordnungsparameter verschwindet $\eta \rightarrow 0$. Damit können wir eine Taylorentwicklung aufschreiben

$$\Phi(T, p, \eta) = \Phi_0(T_c, P_c) + \alpha\eta + A\eta^2 + C\eta^3 + B\eta^4.$$

Die Koeffizienten dieser Entwicklung hängen alle von Temperatur und Druck ab. Wir diskutieren ihre Bedeutung im Folgenden.

Der Term Φ_0 beschreibt den Beitrag zur freien Enthalpie, die nicht vom Phasenübergang abhängt. Zur Diskussion des linearen Terms untersuchen wir das Minimum von Φ

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = \alpha + 2A\eta + 3C\eta^2 + 4B\eta^3 = 0. \quad (4.1)$$

Wenn $\alpha \neq 0$ ist, ist $\eta = 0$ niemals ein Extremum und darum tritt kein Phasenübergang auf. Also ist $\alpha = 0$. Damit ist $\eta = 0$ *immer* ein Extremum. Die Zweite Ableitung ist

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta^2} = 2A + 6C\eta + 12B\eta^2$$

Damit haben wir ein Minimum bei $\alpha = 0$ wenn $A > 0$ ist, für $A < 0$ ein (lokales) Maximum. Die kritische Temperatur ist damit durch einen Vorzeichenwechsel beschrieben und wir können ansetzen

$$A = a(p) (T - T_c(p)).$$

Ferner fordern wir, dass am Übergangspunkt $T = T_c$ immer noch ein Extremum, und zwar das Einzige, bei $\eta = 0$ liegt. Darum ist $C_c(P, T) = 0$ und $B_c(P, T) > 0$. Um eine ganze Linie von Phasenübergängen zu erhalten, muss sogar $C = 0$ überall sein. Da die Temperaturabhängigkeit von B auch i.A. schwach ist, finden wir also für einen Phasenübergang zweiter Ordnung

$$\Phi(T, p) = \Phi_0(P, T) + a(P) (T - T_c) \eta^2 + B(P) \eta^2 \quad A, B > 0.$$

In dieser Version suchen wir wieder für Extrema in der unsymmetrischen Phase durch Lösen der entsprechenden Version von Gl. (4.1) und finden $\eta^2 = \frac{a}{2B} (T - T_c)$. Die Entropie ist dann

$$S = -\frac{\partial \Phi}{\partial T} = S_0 + \frac{a^2}{2B} (T - T_c)$$

und damit die Wärmekapazität

$$C_p = T \frac{\partial S}{\partial T} = C_{p0} + \frac{a^2 T_c}{2B}$$

Die Wärmekapazität bleibt also endlich, ist aber nicht stetig sondern springt. Andere Antwortkoeffizienten springen ebenfalls auf der gleichen Grundlage. Wir bezeichnen mit ΔO den Sprung von Observable O am Übergangspunkt. Volumen und Entropie sind stetig, $\Delta S, \Delta V = 0$. Wenn wir beide Gleichungen nach der Temperatur entlang der Übergangskurve differenzieren, also $P_c(T)$ verwenden und die Kettenregel entsprechend anwenden, so haben wir

$$0 = \Delta \left[\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P + \frac{dP_c}{dT} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \right] = \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right) + P' \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$$

was den Sprung des thermischen Ausdehnungskoeffizienten mit dem der Kompressibilität verknüpft. Für die zweite Gleichung benutzen wir die Maxwellrelation

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P$$

und finden

$$\frac{\Delta C_p}{T} - P' \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = 0.$$

Ähnliche Relationen lassen sich bei konstantem Volumen zeigen und werden als Übungsaufgabe behandelt.

Wir sehen, dass die Φ -Landschaft am Übergangspunkt sehr flach wird und damit das System sehr empfindlich gegen Fluktuationen. Dies führt zur Fluktuationstheorie von Phasenübergängen, die wir später behandeln.

4.2.2 Phasenübergänge in einem äußeren Feld

wir nehmen jetzt an, dass ein äußeres Feld h an den Ordnungsparameter an-koppelt, z.B. ein magnetisches Feld an die Magnetisierung eines Ferromagneten, durch einen Störhamilton der Form $H = -\eta hV$. Das Volumen taucht auf, um von einer lokalen auf eine extensive Größe zu kommen - denken Sie an die Volumenintegrale in Hamiltonoperatoren in der zweiten Quantisierung. Damit muss der Gleichgewichtswert sein

$$V\eta = -\frac{\partial\Phi(P, T, h)}{\partial h}.$$

Damit dies gewährleistet bleibt, ist das ergänzte GL-Funktional jetzt

$$\Phi = \Phi_0 + a(T - T_c)\eta^2 + B\eta^4 - \eta hV. \quad (4.2)$$

Wir können wieder gemäß Gl. (4.1) eine Kurvendiskussion durchführen und finden als Bedingung für das Extremum

$$2a(T - T_c)\eta + 4B\eta^3 - hV = 0. \quad (4.3)$$

Diese kubische Gleichung könnten wir mit Cardanis Formel lösen. Wir interessieren uns hier aber nur für kleine η und finden für das Extremum $\eta = hV/2a(T - T_c)$. Auch kleine Felder führen also zur Symmetriebrechung und induzieren einen Ordnungsparameter schon oberhalb T_c . Erst weiter weg vom Phasenübergang entsteht dann innere Ordnung durch den Term vierter Ordnung. Wenn wir dieses feldinduzierte Extremum mit dem Nullfeldextremum vergleichen, also

$$\frac{hV}{2a(T - T_c)} = \sqrt{\frac{a}{2B}(T - T_c)}$$

setzen, so erhalten wir, mit der Abkürzung $t = T - T_c$, dass der Phasenübergang verschmiert ist über ein Temperaturintervall $|t| \simeq h^{2/3}B^{1/3}V^{2/3}/a$. Wir wollen nun die Funktion $f(\eta) = 2a\eta + 4B\eta^3$, diskutieren, die also mit hV gemäß Gl. (4.2) geschnitten werden muss, diskutieren. In der symmetrischen Phase, $t > 0$, ist sie monoton wachsend und es gibt genau eine Lösung von (4.3), die im Wesentlichen durch den feldinduzierten Wert gegeben ist. In der symmetrischen Phase, $t < 0$, ist $f(\eta)$ nicht monoton und kann als kubische Parabel einen oder drei Schnittpunkte mit hV haben, je nach Wert. Die zusätzlichen Schnittpunkte bei kleinem Feld h entspricht dann der normalen geordneten Phase. Die Grenzen dieses Intervalls sind durch die Extrema von $f(\eta)$ gegeben, also durch

$$0 = 2at + 12B\eta^2 \Rightarrow \eta_c = \pm\sqrt{-\frac{at}{6B}}.$$

Durch Gleichsetzen der $f(\eta_c) = hV$ erhalten wir damit als Feld, über den der Übergang verschmiert ist, $h_c \simeq \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} \frac{(a|t|)^{3/2}}{VB^{1/2}}$. Wenn wir diese Kurve kippen

(Zeichnung Tafel) sehen wir leicht, dass dort $\left(\frac{\partial\eta}{\partial h}\right)_T$ ist. Wir differenzieren Gl. (4.3) nach h und erhalten

$$V = \left(\frac{\partial\eta}{\partial h}\right)_T [2at + 12B\eta^2] = \left(\frac{\partial\eta}{\partial h}\right)_T \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\eta^2}\right)_{T,h} \quad (4.4)$$

Da in dieser Gleichung die linke Seite positiv ist, im Bereich des verschmierten Übergangs $\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\eta^2}\right) < 0$ und damit ist dieser Bereich instabil. Damit zeigt der Übergang Hysterie und Phasengleichgewicht- er wird zum Übergang erster Ordnung.

Die Einführung eines äußeren Feldes ermöglicht die Diskussion der linearen Suszeptibilität

$$\chi = \left(\frac{\partial\eta}{\partial h}\right)_{T,h\rightarrow 0}.$$

Diese Größe haben wir oben, in Gl. (4.4) ausgerechnet und finden

$$\chi = \lim_{h\rightarrow 0} \frac{V}{2at + 12B\eta^2} = \begin{cases} \frac{V}{2at} & \text{für } t > 0 \\ -\frac{V}{4at} & \text{für } t < 0 \end{cases}$$

Wobei wir am Ende die Werte des Ordnungsparameters für $h \rightarrow 0$ eingesetzt haben. Am Phasenübergang, $t \rightarrow 0$ divergiert darum die Suszeptibilität.

4.2.3 Fluktuationen des Ordnungsparameters

Wir haben bislang aus dem GL-Funktional den Ordnungsparameter durch Minimierung gefunden. Wir haben aber auch festgestellt, dass Φ als Funktion von η am Phasenübergang flach wird und damit Platz für Fluktuationen liefert. Wir wollen nun einerseits diskutieren, welche Konsequenzen dies innerhalb der Ginzburg-Landau-Theorie hat, und dann, wie dies deren Limitationen aufzeigt. Ein thermodynamisches System fluktuiert um $\Delta\Phi$ aus seinem Gleichgewichtspunkt heraus mit Wahrscheinlichkeit $w \propto \exp\left(-\frac{\Delta\Phi}{k_B T}\right)$. Wir linearisieren $\Delta\Phi$ als

$$\Delta\Phi = \frac{1}{2} (\eta - \bar{\eta})^2 \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\eta^2}\right)_{P,T} = -\frac{(\eta - \bar{\eta})^2 V}{2\chi k_B T_c}$$

Hier haben wir Gl. (4.4) eingesetzt und bezeichnen den Mittelwert des Ordnungsparameters als $\bar{\eta}$. Damit ist das Fluktuationsquadrat

$$\langle (\Delta\eta)^2 \rangle = \frac{T_c \chi}{V} \propto \frac{1}{t}$$

Die Proportionalität zwischen der Schwankungsbreite und der Suszeptibilität ist ein Spezialfall des Fluktuations-Dissipations-Theorem, das wir am Ende der Vorlesung noch behandeln werden. Aufgrund der oben gefundenen Divergenz der Suszeptibilität divergieren also auch die Fluktuationen des Ordnungsparameters wie erwartet.

Wir interessieren uns jetzt dafür, wie die Fluktuationen räumlich strukturiert sind. Wir definieren darum ein *lokales* thermodynamisches Potenzial Ω . Klarerweise können Teilchen zwischen den verschiedenen Orten diffundieren und damit ist die lokale Teilchenzahl variabel. Darum ist das lokale Potenzial großkanonisch $\Omega(\mu, T, \eta)$. Wir können dies entwickeln a la Ginzburg-Landau.

$$\Omega = \Omega_0 + \alpha t \eta^2 + b \eta^4 - \eta h.$$

In einem inhomogenen Medium sind all diese Größen ortsabhängig. Wir interessieren uns allerdings nicht auf die Ortsabhängigkeit auf atomaren Skalen, sondern relativ langwellig, und entwickeln darum in der Ortsableitung. Die ersten Ortsableitungen $f(\eta) \frac{\partial \eta}{\partial x_i}$ können wir in Oberflächenintegrale überführen. Die führenden Glieder sind damit zweiter Ordnung, also von den Formen

$$\eta \frac{\partial^2 \eta}{\partial x_i \partial x_j} \quad \frac{\partial \eta}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_j}.$$

Durch partielle Integration können wir die erste Form in die zweite überführen. Aus der zweiten müssen wir einen Skalar bauen, da ja Ω insgesamt ein Skalar ist, d.h., wir finden eine Matrix g_{ik} so dass der Beitrag zur GL/Entwicklung die Form $\sum g_{ik} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_j}$. Diese Matrix muss mit der Symmetrie des zugrundeliegenden Gitters kompatibel sein. Wir beschränken uns auf den Fall eines kubischen Gitters ohne Vorzugsrichtung. Dort ist keine Richtung ausgezeichnet, $g_{ik} = g \delta_{ik}$ und wir finden darum für die Entwicklung des lokalen thermodynamischen Potenzials in einem homogenen Medium

$$\Omega = \Omega_0 + \alpha t \eta^2 + b \eta^4 + g (\nabla \eta)^2 - \eta h.$$

Der Vorfaktor g bezeichnet eine Steifigkeit gegenüber räumlichen Fluktuationen und muss, damit der homogene Zustand stabil ist, positiv sein, $g > 0$. Wir erhalten das totale thermodynamische Potenzial als

$$\Omega_{\text{tot}} = \int d^3 r \Omega.$$

Zur Analyse von Fluktuationen machen wir den gleichen Ansatz wie oben mit Ω_{tot} statt dem kanonischen Φ . Die Entwicklung nach kleinen Fluktuationen in der *symmetrischen Phase* ist

$$\Delta \Omega_{\text{tot}} = \int d^3 r \left[\alpha t \eta^2 + g (\nabla \eta)^2 \right].$$

Zur Auswertung der Wahrscheinlichkeitsdichte entwickeln wir die Fluktuationen in eine Fourierreihe

$$\eta = \sum_{\vec{k}} \eta_{\vec{k}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad \eta = \eta_{\vec{k}}^*$$

wobei die zweite Relation der Tatsache geschuldet ist, dass η reell ist. Der Gradient ist dann

$$\nabla\eta = i \sum_{\vec{k}} \vec{k} \eta_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}.$$

Damit können wir die Fluktuation entwickeln als

$$\Delta\Omega_{\text{tot}} = V \sum_{\vec{k}} (gk^2 + \alpha t) |\eta_{\vec{k}}|^2$$

Dies können wir in die Boltzmannverteilung einsetzen

$$w = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{V}{k_B T} \sum_{\vec{k}} (gk^2 + \alpha t) |\eta_{\vec{k}}|^2\right)$$

Damit sind die verschiedenen $\eta_{\vec{k}}$ unabhängig, die Wahrscheinlichkeit faktorisiert, und wir können herleiten, dass

$$\langle |\Delta\eta_{\vec{k}}|^2 \rangle = \frac{T}{2V(gk^2 + \alpha t)}.$$

Wir sehen, dass am Phasenübergang, $t \rightarrow 0$ in der Tat die Fluktuationen für $k \simeq \sqrt{\alpha t/g}$ anwachsen, also immer langwelliger werden. Wir interessieren uns jetzt für die Korrelation der Dichtefluktuationen als Funktion des Abstandes $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$

$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &= \langle \Delta n(\vec{r}_1) \Delta n(\vec{r}_2) \rangle = \sum_{k_1 k_2} \langle \Delta n_{k_1} \Delta n_{k_2} \rangle e^{i(k_1 r_1 + k_2 r_2)} \\ &= \sum_k \langle |\Delta n_k|^2 \rangle e^{i k r} \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt auf Relativkoordinaten übergegangen sind. Wir können jetzt unseren Erwartungswert einsetzen und das Kontinuumslimit nehmen

$$G(\vec{r}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{T}{2V(gk^2 + \alpha t)}.$$

Dieses Fourierintegral ist ganz typisch bei Korrelationsfunktionen. Wir gehen in Kugelkoordinaten im \vec{k} -Raum und benutzen als Polarwinkel θ den zwischen \vec{k} und \vec{r} . Wir integrieren über ϕ und haben als Zwischenergebnis

$$G(\vec{r}) = \frac{T}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{gk^2 + \alpha t} \int_{-1}^1 d\cos\theta e^{i k r \cos\theta} = \frac{iT}{2r\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k \sin(kr)}{gk^2 + \alpha t}$$

Wir erkennen, dass der Integrand eine gerade Funktion von k ist, können also das Integrationsintervall von $-\infty$ nach ∞ ziehen und die komplexe Exponentialfunktion zum Einsatz bringen

$$G(\vec{r}) = \frac{T}{4r\pi^2} \text{Im} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k}{gk^2 + \alpha t} e^{i k r}.$$

Dieses Integral kann durch einen Halbbogen per Residuensatz geschlossen werden. Da per Konstruktion in Kugelkoordinaten $r > 0$ ist, schließen wir in der oberen Halbebene. Dort gibt es einen Pol bei $k \equiv ir_c^{-1} = i\sqrt{\frac{\alpha t}{g}}$. Das Residuum dort ist $e^{-r/r_c}/2g$. Wir erhalten also insgesamt

$$G(\vec{r}) = \frac{T_c}{8\pi g r} e^{-r/r_c}.$$

Die Größe r_c heißt Korrelationslänge der Dichtefluktuationen. Dieser wächst klarerweise mit $t^{-1/2}$ am Phasenübergang. Eine analoge Diskussion lässt sich auf der anderen Seite des Phasenübergangs durchführen. Diese kritischen Fluktuationen entstehen dadurch, dass sich die ordnende Wechselwirkung und die unordnenden thermischen Fluktuationen die Waage halten. Bei $T \gg T_c$ werden Fluktuationen durch das Wärmebad abgeschnitten, bei $T \ll T_c$ durch die Wechselwirkung. Bei $T \simeq T_c$ halten sich diese beiden komplementären Mechanismen in Schach - die Ordnung ist weich genug und die thermischen Fluktuationen schwach genug.

Diese Diskussion erlaubt es, das Gültigkeitstheorie der Ginzburg-Landau-Theorie aus dieser heraus zu bestimmen. Schließlich beruht die Theorie darauf, dass die Entwicklung von Ω in vierte Ordnung eine gute Näherung darstellt. Insbesondere sollten die Fluktuationen von η kleiner, als der Erwartungswert sein. Wir schätzen die Fluktuationen dadurch ab, dass wir den räumlichen Durchschnitt über eine Kugel vom Volumen r_c^3 zu $T_c\chi/r_c^3$ ab und vergleichen mit $\bar{\eta}^2 = \frac{\alpha|t|}{b}$. Wir erhalten darum eine Abschätzung

$$|t| \gg \frac{T_c^2 b^2}{\alpha g^3}.$$

Damit ist die Ginzburg-Landau Theorie zwar in der Nähe, aber nicht unmittelbar am Phasenübergang gültig. Wir werden später analysieren, unter welchen Bedingungen genauere Theorien die Vorhersagen von GL bestätigen, wann man korrigieren muss, und wie das geht.

4.2.4 Ginzburg-Landau-Hamilton

Die Darstellung von w durch Ω motiviert dazu, diese Größe als effektiven Hamiltonoperator des Systems, ausgedrückt nur durch thermodynamische Variable anzusehen

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \int d^3r \left[\alpha t \eta^2 + b \eta^4 + g (\nabla \eta)^2 - h \eta \right].$$

Damit erhalten wir als Zustandssumme den Pfadintegralausdruck

$$Z[\eta] = \int \mathcal{D}\eta e^{-\hat{H}_{\text{eff}}/k_B T_c} \quad \Omega = -k_B T \log Z.$$

Wir sehen, dass die Ginzburg-Landau-Theorie gerade dem Sattelpunkt dieser Theorie entspricht - dieser entsteht durch die Minimierung von \hat{H}_{eff} nach

η . Der Clou ist jetzt aber, dass wir jetzt auch den Fluktuationsbeitrag konsistent auswerten können, indem wir die Sattelpunktsnäherung einschließlich des semiklassischen Fluktuationsbeitrags auswerten. Wir nähern also

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_{\text{GL}} + \frac{1}{2} \int d^D r d^D r' \eta(\vec{r}) \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{r}') \eta(\vec{r}').$$

Hier haben wir die Theorie auf Dimension D verallgemeinert, was uns näher zu einer wichtigen Schlussfolgerung führen wird. \hat{H}_{GL} entspricht der Dichte von \hat{H}_{eff} am Ginzburg-Landau-Wert $\bar{\eta}$. Der Fluktuationsbeitrag ist gegeben durch

$$\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\delta^2 \hat{H}_{\text{eff}}}{\delta \eta(\vec{r}) \delta \eta(\vec{r}')} \Big|_{\eta=\bar{\eta}}$$

Im Fall unseres Systems ist die Physik lokal und wir haben

$$\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{r}') = (-\nabla_r^2 + \alpha t + 12b\eta) \delta^D(\vec{r} - \vec{r}').$$

Wir folgen den Regeln der Gauss-Pfadintegration, die wir schon vorher hergeleitet haben, in der ist

$$\int \mathcal{D}\psi \exp\left(-\frac{1}{2} \int d^D r d^D r' \psi(\vec{r}) \mathcal{H}(\vec{r}, \vec{r}') \psi(\vec{r}')\right) \propto (\det \mathcal{H})^{-1/2} = \exp\left(-\frac{1}{2} \text{Tr} \log \mathcal{H}\right)$$

Wir müssen also die Spur des Logarithmus einer über einen Differenzialoperator definierten Funktion ausrechnen. Zuerst einmal lernen wir, die Spur einer Funktion f zu berechnen als

$$\text{Tr} f = \int d^D r f(\vec{r}, \vec{r}) = \int d^D r d^D r' \delta^{(D)}(\vec{r} - \vec{r}') f(\vec{r} - \vec{r}')$$

wobei wir annehmen, dass f translationsinvariant ist, also nur über die Differenz der Argumente geschrieben werden kann. Jetzt setzen wir die Fourierdarstellung des Diracdelta ein und finden

$$\text{Tr} f = \int d^D r d^D r' d^D q (2\pi)^{-D} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} f(\vec{r} - \vec{r}') = V \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \tilde{f}(\vec{q})$$

hier haben wir in der letzten Integration Schwerpunkts- und Relativkoordinaten eingeführt und die Integration über den Schwerpunkt auf das Volumen V beschränkt. Mit dieser Fourierdarstellung bekommen wir auch die Differenzierungen in \mathcal{H} im Griff und erhalten

$$\text{Tr} \log \mathcal{H} = V \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \log(q^2 + \alpha t + 12b\eta^2)$$

Als Kunstgriff multiplizieren wir den Fluktuationsterm mit einem Term λ , der es uns ermöglicht, Ordnungen in der Fluktuationskorrektur bequem zu zählen. Am Ende setzen wir $\lambda=1$. Hiermit können wir direkt die freie Enthalpie ausrechnen als

$$\Omega = -k_B T \log Z = H[\eta_{\text{GL}}] + \frac{V}{2} \text{Tr} \log \mathcal{H}.$$

Davon wollen wir direkt den Ordnungsparameter ausrechnen als $\eta = -\frac{\partial\Omega}{\partial h} = \bar{\eta} + O(\lambda)$. Damit können wir zerlegen

$$H_{\text{eff}}(\eta_{\text{GL}}) = H_{\text{eff}}(\eta) + (H_{\text{eff}}(\eta_{\text{GL}}) - H_{\text{eff}}(\eta))$$

Der Term in Klammern ist von Ordnung λ^2 aufgrund der Ginzburg-Landau Minimierungsbedingung. Darum dürfen wir in $O(\lambda^2)$ für das Gibbs-Potenzial in η schreiben

$$\Omega = H_{\text{eff}}(\eta) + \frac{\lambda}{2} \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \log(q^2 + \alpha t + 12b\bar{\eta}) + O(\lambda^2).$$

Daraus berechnen wir jetzt wieder das konjugierte Feld

$$h = \frac{1}{V} \frac{\partial\Omega}{\partial\eta} = \alpha t \eta + B\eta^3 + 12\lambda b \eta \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \alpha t + 12b\eta^2}$$

und daraus die Suszeptibilität

$$\rho = \frac{1}{\chi} = \left(\frac{\partial h}{\partial \eta} \right)_{\eta=0} = \alpha t + 12\lambda b \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \alpha t} + O(\lambda^2). \quad (4.5)$$

Wir sehen, dass die Entwicklung hier in Wirklichkeit eine Entwicklung in der Nichtlinearität B ist und können wieder $\lambda = 1$ setzen. Es ist also Gl. (4.5) eine Störungsentwicklung von ρ in B . An der kritischen Temperatur divergiert die Suszeptibilität, d.g. wir haben dort

$$\alpha t_c + 12b \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \alpha t_c} = 0. \quad (4.6)$$

Dies ist eine implizite Gleichung für t_c , also die Verschiebung der kritischen Temperatur gegenüber dem Wert aus der Ginzburg-Landau-Theorie. Wir sehen ohne weiteres, dass $t_c < 0$, was konsistent damit ist, dass Fluktuationen das Ordnen des Systems erschweren. Dies ist die niedrigste Störungstheorie und wir könnten erwarten, dass wir immer weitere Korrekturen ausrechnen können. Das ist nicht so einfach - wir werden gleich sehen, dass die Angelegenheit in vielen Fällen leider divergiert. Um dies zu analysieren, subtrahieren wir (4.6) von (4.5) und erhalten

$$\rho = \alpha(t - t_c) \left(1 + 12b \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{(q^2 + \alpha t)(q^2 + \alpha t_c)} \right).$$

In der Nähe des Phasenübergangs können wir im Sinne unserer Störungstheorie im Integral $\alpha t = \rho$ und $\alpha t_c = 0$ setzen und erhalten damit

$$\rho = \alpha(t - t_c) \left(1 + 12b \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 (q^2 + \rho)} \right).$$

Dieses Integral ist sehr aufschlussreich. Wir sehen zuerst, dass es für $D \leq 2$ divergiert, d.h. in zwei und weniger Dimensionen ist Ginzburg-Landau nicht einmal ein guter Anfang der Störungstheorie, der GL-Zustand wird durch Fluktuationen zerstört. Wir substituieren $q' = q\sqrt{\rho}$ und erhalten

$$\rho = \alpha (t - t_c) \left(1 + 12b\rho \int \frac{d^D q'}{(2\pi)^D} \frac{1}{q'^2 (q'^2 + 1)} \right).$$

Das Integral ist jetzt einfach ein numerischer Parameter S_D der eben für $D > 2$ definiert ist. Für $D > 4$ bleibt alles endlich selbst für $\rho \rightarrow 0$. Wir lösen

$$\rho = \alpha (t - t_c) \left(1 + 12BS_D \rho^{\frac{D-4}{2}} \right)$$

und bekommen eine kleine Korrektur für $D \geq 4$. Selbst die Proportionalität $\chi \propto (T-T_c)^{-1}$ bleibt. Wenn wir bei $D < 4$ den Parameter ρ herunterdrehen, also zum Phasenübergang gehen, dann explodiert die Korrektur und GL wird falsch.

Warum haben wir uns so lange mit Ginzburg-Landau beschäftigt, wenn es doch so falsch ist- die Raumdimension ist ja doch $D \leq 3$? Nun, wir haben uns auch auf ein Modell mit einem skalaren Ordnungsparameter und kubischer Symmetrie gehalten. Im allgemeinen ist die kritische Dimension bei einem anderen Wert. In Supraleitern, z.B., wird die Eichsymmetrie gebrochen und Ginzburg-Landau ist sehr zuverlässig.

4.3 Skalenhypothese

Ernüchtert überlegen wir uns, was denn eine allgemeingültigere Theorie von Phasenübergängen zweiter Ordnung leisten müsste. In das nun folgende fließen ein: Empirische Beobachtungen an Phasenübergängen, Erfahrungen mit der Ginzburg-Landau-Theorie, Ergebnisse von Modellen wie z.B. dem Isingmodell, an denen wir theoretische rigoros Phasenübergänge studieren können. Was wir in all diesen Fällen sehen ist, dass weiterhin die Suszeptibilitäten einschließlich der Ableitung der Wärmekapazität sowie die Korrelationslänge als Funktion des Abstands des Phasenübergangs divergiert, und zwar mit einem Potenzgesetz. Wir formulieren diese Skalenhypothese jetzt für den Fall, dass die Wärmekapazität gegen unendlich geht.

Dies bedeutet, dass die Entropie als $S = S(T, P - P_c(T))$ dargestellt werden kann, also implizit die Phasengrenze enthält. Mathematisch ist die Skalenhypothese, dass die Ableitung nach dem Druck an der Phasengrenze gegen unendlich geht. Wir finden damit

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P = - \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T P'_c + \text{n.sg.} \quad - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T$$

Hier kennzeichnen wir die Ableitung nach dem Argument mit einem Strich und konzentrieren uns auf den singulären Term - der nicht-singuläre Beitrag

entspricht dem C_{P0} aus der Ginzburg-Landau Theorie. Die zweite Identität ist eine Maxwellrelation. Damit können wir schreiben

$$C_P = T_c P'_c \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P + \text{n.sg.}$$

also ist die Divergenz des thermischen Ausdehnungskoeffizienten die gleiche, wie die der Wärmekapazität. Analog können wir (siehe auch Diskussion über die Sprünge verschiedener thermodynamischer Größen) können wir zeigen

$$- \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T + \text{n.sg.} = \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P T'_c = \frac{C_P}{T_c} T_c'^2.$$

Damit können wir zeigen, dass C_v nicht einmal einen Sprung hat während die isotherme Kompressibilität divergiert. Der Kern der Skalenhypothese ist nun wie folgt: Wir nehmen an, dass $C_P \propto |t|^{-\alpha}$. Den (nicht notwendigerweise ganzzahligen) Exponenten α nennen wir kritischen Index. Aus dem gerade gesagten bestimmt der auch eine Reihe weiterer Skalengesetze. Für den Fall von Ginzburg-Landau divergiert nur die Ableitung, d.h. wir haben in diesem Fall $\alpha = 0$. Der Ordnungsparameter wächst mit einem Potenzgesetz $\eta \propto (-t)^\beta$ für $t < 0$ und $\beta > 0$. In Ginzburg-Landau war $\beta = 1/2$. Die Fluktuationen können wir wie oben durch eine Korrelationslänge beschreiben, mit Skalenverhalten $r_c \propto |t|^{-\nu}$ wobei $\nu > 0$. Für die Korrelationsfunktion haben wir $G(r) \propto r^{-(D-2+\zeta)}$ als räumliche Abhängigkeit. Weitere kritische Indizes ergeben sich in der Antwort des Systems auf äußere Felder. Hier müssen wir, siehe Diskussion innerhalb von GL, uns entscheiden ob wir im Bereich schwacher Felder, $h \ll h_t$ oder $h \gg h_t$ sind, wobei h_t das oben diskutierte Koerzitivfeld ist. Für schwache Felder haben wir eine Skalenhypothese für die Suszeptibilität $\chi \propto |t|^{-\gamma}$. Für starke Felder hingegen können wir Skalenhypothesen $C_P \propto h^{-\epsilon}$, $\eta \propto h^{1/\delta}$ und $r_c \propto h^{-\mu}$.

Wir haben nun eine Reihe von Skalenhypothesen hingeschrieben und vorher diskutiert, wie eine Skalenhypothese mehrere Größen beschreibt. Dies legt nahe, dass unsere Hypothesen wohl nicht unabhängig sind. Wir wollen nun eine Reihe solcher (exakter) Relationen diskutieren. Wir erinnern uns, dass durch das Einschalten eines äußeren Bereichs der Phasenübergang "verschmiert" wird (im Sinne der Erzeugung einer Hysteresekurve), der beschrieben wird durch $\eta_{\text{ind}} \simeq \eta_{\text{SP}}$. Dies können wir durch Skalenhypothesen ausdrücken und finden $h \propto |t|^{\beta+\gamma}$. Andererseits kann man die Verschmierung dadurch beschreiben, dass der Feldanteil des thermodynamischen Potentials $-V\eta h$ von der Größenordnung des Thermischen Gliedes ist. Letzteres können wir beschreiben als

$$C_P = -T \frac{\partial^2 \Phi}{\partial^2 T} \quad \Phi \propto t^2 C_P.$$

Der Vergleich der entsprechenden Skalenhypothesen liefert $h \propto |t|^{2-\alpha-\beta}$. Damit können wir h substituieren und bekommen $\alpha+2\beta+\gamma = 2$. Am Rand dieser Verschmierungszone kann man jede thermodynamische Größe gleichwertig durch Temperatur und Feld ausdrücken, also haben wir dort $\eta \propto |t|^\beta \propto h^{1/\delta}$. Mit dem

oben gefundenen h ergibt sich $\beta\delta = \beta + \gamma$. Für zwei gleiche Darstellungen der Wärmekapazität erhält man $\epsilon(\beta + \gamma) = \alpha$. Interessanterweise können wir also die kritischen Indizes schwacher und starker Felder miteinander verknüpfen. Ähnliches können wir auch für den Korrelationsradius zeigen mit $\mu(\beta + \gamma) = \nu$.

Einen weiteren Typ von Relationen erhält man aus der Diskussion des Korrelationsradius r_c . Wir betrachten den Mittelwert der Fluktuationen des Ordnungsparameters $\Delta\eta$ über ein Volumen V und schätzen ab

$$\langle (\Delta\eta)^2 \rangle_V = \frac{1}{V^2} \int_V d^3r_1 \int_V d^3r_2 \langle \Delta\eta(\vec{r}_1) \Delta\eta(\vec{r}_2) \rangle = \frac{1}{V} \int_V d^3r G(\vec{r})$$

Die linke Seite können wir abschätzen als $T_c\chi/V \propto |t|^{-\gamma}$. Auf der rechten Seite integrieren wir über ein Raumgebiet vom Volumen $\propto r_c^D$ auf dem die Korrelationsfunktion von null verschieden ist, und dort ist sie nach Definition $\propto r_c^{-(D-2+\zeta)}$, also ist die rechte Seite $\propto r_c^{2-\zeta} \propto |t|^{-\nu(2-\zeta)}$. Damit haben wir $\nu(2-\zeta) = \gamma$. Für unsere acht Indizes haben wir also fünf Gleichungen, damit bleiben nur drei unabhängige Indizes übrig.

Die Skaleninvarianz lässt sich in die Thermodynamik integrieren, indem man die funktionellen Abhängigkeiten verschiedener thermodynamischer Funktionen macht. Für den Ordnungsparameter haben wir z.B.

$$\eta = h^{1/\delta} f\left(\frac{t}{h^{1/\beta\delta}}, t\right)$$

wobei f eine beliebige Funktion ist. Das erste Argument von f muss diese Form haben, weil es so die Regimes starker und schwacher Felder korrekt gegeneinander abgrenzt. Obwohl am Phasenübergang t immer klein ist, durchläuft das erste Argument die gesamten reellen Zahlen aufgrund der h -Abhängigkeit. Das zweite ist am Phasenübergang klein, so dass der Hauptteil sogar durch die einparametrische Version $\eta = h^{1/\delta} f(th^{-1/\beta\delta}, 0)$ gegeben ist. Um das Hochfeldverhalten richtig zu bekommen geht $\lim_{x \rightarrow 0} f(x, 0) = \text{const.}$ Außerdem lässt sich zeigen, dass sich $f(x, 0)$ nach ganzen Potenzen von x entwickeln lässt. In schwachen Feldern und bei $t < 0$ haben wir nach Ansatz $\eta \propto (-t)^\beta$ und bei $t > 0$ ist $\eta \simeq \chi h \propto h|t|^{-\gamma}$. Damit ist für $x \rightarrow \infty$ asymptotisch $f(x) \propto x^{-\gamma}$ und für $x \rightarrow -\infty$ asymptotisch $f(x) \propto (-x)^\beta$. Ganz analog können wir auch einen Ansatz für die Korrelationsfunktion der Form

$$G(r, t) = \frac{g(rt^\nu)}{r^{d-2+\zeta}}$$

machen.

Diese Potenzhypothesen gehen auf das tiefere Konzept der Skaleninvarianz zurück, das den kritischen Zustand beschreibt. Wir sehen, dass in der Nähe des Phasenübergangs zwei Längen eine zentrale Rolle spielen: Die Korrelationslänge r_c und die charakteristische Länge r_0 , die ein Volumen beschreibt in dem die mittlere quadratische Fluktuation des Ordnungsparameters mit dem Gleichgewichtswert vergleichbar wird. Die Landau-Theorie ist klarerweise anwendbar

wenn $r_c \gg r_0$ ist (Übung: Aus den Skalengesetzen explizit nachrechnen). Bei $t \rightarrow 0$ wächst r_0 schneller als r_c und werden vergleichbar. Dann bleibt $r_0 \simeq r_c$ so dass r_c die einzige Länge ist. Es gibt damit außerhalb des Landau-Gebiets keinen kleinen Parameter.

Zur Abschätzung der Fluktuationen im Volumen $V \propto r_c^3$ gehen wir an die Grenze der GL-Region und haben damit die Bedingung $\eta^2 \simeq \Delta\eta^2 = T_c\chi/V$. Durch Einsetzen der ganzen kritischen Indizes erhalten wir $\nu D = 2 - \alpha$. Damit gibt es nur zwei kritische Indizes.

Wir formulieren jetzt die Forderung der Skaleninvarianz in einer etwas klareren mathematischen Form. Unser Gedankenexperiment ist die Skalierung aller Längen um einen gemeinsamen Faktor $r \rightarrow r/u$. Die Hypothese der Skaleninvarianz sagt dann, dass wir alle anderen, nicht-geometrischen Größen des Systems so umskalieren können, dass die Beziehungen der Theorie ungeändert bleiben. Dies geschieht nach den Formeln

$$t \rightarrow tu^{\Delta_t} \quad h \rightarrow hu^{\Delta_h} \quad \eta \rightarrow \eta u^{\Delta_\eta}$$

die Parameter Δ_x nennt man die Skalendimensionen der Größe x . Um die Skalierung der Fluktuationen invariant zu lassen skaliert $r_c \rightarrow r_c/u$. Das Skalengesetz des Korrelationsradius ist bei $h = 0$ gerade $r_c \propto t^{-\nu}$ während bei $T = 0$ gerade $\propto h^{-\mu}$. Damit haben wir gezeigt, dass $\Delta_t = 1/\nu$ und $\Delta_h = 1/\mu$. Zur Diskussion von Δ_η betrachten wir die Änderung des thermodynamischen Potentials unter infinitesimalen Änderungen des Feldes. Wir benutzen die Beobachtung, dass ηV und h ein thermodynamisch konjugiertes Paar bilden und schreiben

$$d\Phi = -V\eta dh.$$

Das Volumen skaliert mit u^D , d.h. Invarianz von $d\Phi$ impliziert $Vu^{-D}\eta u^{\Delta_\eta} dh u^{\Delta_h} = V\eta dh$ liefert $\Delta_\eta = d - \Delta_h = d - 1/\mu$. Die kritischen Dimensionen sind also durch andere kritische Indizes, μ und ν ausgedrückt und dies sind die zwei unabhängigen Größen, die wir behalten wollen, um alle anderen kritischen Indizes zu generieren. Wir fordern die Invarianz der Zustandsgleichung, also von

$$\eta(t, h) \rightarrow \eta(tu^{\Delta_t}, hu^{\Delta_h}) = u^{\Delta_\eta}\eta(t, h).$$

Dies ist eine Funktionalgleichung für η die gelöst wird von

$$\eta(t, h) = h^{\Delta_\eta/\Delta_h} f\left(\frac{t}{h^{\Delta_t/\Delta_h}}\right) = h^{uD-1} f\left(\frac{t}{h^{\mu/\nu}}\right).$$

Analog können wir das thermodynamische Potenzial Φ diskutieren und erhalten $\Phi(t, h) = h^{du}\phi\left(\frac{t}{h^{\mu/\nu}}\right)$. Dies ermöglicht uns neue Anwendungen: Die Skalenfunktionen haben bei nichtverschwindendem h kein singuläres Verhalten und kann entwickelt werden

$$\Phi \propto h^{\mu D} \left(1 + c_1 \frac{t}{h^{\mu/\nu}} + c_2 \frac{t^2}{h^{2\mu/\nu}} + \dots\right).$$

Diese Entwicklung zeigt uns u.a., was in Ginzburg-Landau letztlich schief läuft - wir entwickeln zwar weiterhin in ganzzahligen Potenzen eines Parameters, dieser hängt aber wiederum mit i.A. nicht-ganzzahligen Potenzen von physikalischen Größen ab. Wir nehmen jetzt die schon oben in der Nähe des Phasenübergangs hergeleiteten Formeln

$$\eta = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Phi}{\partial h} \propto h^{1/\delta} \quad C_P = -T_c \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} \propto h^{-\epsilon}$$

und erhalten damit auf einfachere Art und Weise als zuvor die allerdings redundanten Beziehungen $(\mu d - 1) \delta = 1$ und $\mu \left(\frac{2}{\nu} - D\right) = \epsilon$. Eine analoge Entwicklung können wir bei $h \rightarrow 0$ und endlichem t durchführen. Dabei ist zu beachten, dass diese Entwicklungen auf den beiden Seiten des Phasenübergangs unterschiedlich ist. Bei $t > 0$ können wir nur gerade Potenzen von h haben, weil sonst $V\eta = -\frac{\partial \Phi}{\partial h}$ nicht verschwinden würde. Auch hier lassen sich redundante Beziehungen zwischen kritischen Exponenten herleiten.

Wir haben jetzt Beziehungen zwischen Exponenten hergeleitet, aber was sind ihre Zahlenwerte? Dies hängt vom Phasenübergang ab und kann gemessen werden, oder aus mikroskopischen Modellen rekonstruiert. Es fällt auf, dass die sehr komplexe Physik eines statistischen Systems, in dem thermische Fluktuationen und ordnende Wechselwirkungen wetteifern, sich auf sehr wenige Zahlen (nur zwei unabhängige!) reduzieren lassen. Es ist durchaus möglich, dass verschiedene Systeme die gleichen kritischen Exponenten haben - wir sagen dann, die Systeme befinden sich in derselben Universalitätsklasse. In diesem Sinne definiert die Ginzburg-Landau-Theorie eine wichtige Universalitätsklasse.

Wie beschaffen wir uns die kritischen Parameter und die Form der Linie der Phasenübergänge? Nun, dafür müssen wir als Theoretiker(innen) im Allgemeinen das zugrundeliegende mikroskopische Modell lösen. Einige kritische Systeme sind exakt lösbar. Daneben gibt es eine Reihe numerischer Techniken wie z.B. die Quanten-Monte-Carlo Technik oder die numerische Renormierungsgruppe. Wir wollen im folgenden eine Methode skizzieren, die gezielt auf den Skalengleichungen aufsetzt: Die Renormierungsgruppe.

4.4 Die Renormierungsgruppe für Phasenübergänge

Die Renormierungsgruppe für Phasenübergänge hat einen etwas unglücklichen Namen: Die Gruppeneigenschaft (die eigentlich eine Halbgruppeneigenschaft ist), ist nicht ihr wichtigster Aspekt. Ihre Grundidee ist, die Divergenz der charakteristischen Längenskalen am Phasenübergang auszunutzen. Diese bedeutet ja, dass die Physik auf kurzen Längenskalen immer unwichtiger wird, und eine immer grobkörnigere Beschreibung unseres kritischen Systems ausreicht. Dies führt oft zur Selbstähnlichkeit kritischer Systeme (siehe Bilder aus der Vorlesung). Hier sollten wir uns vor Augen führen, was das Skalieren mit Potenzgesetzen eigentlich bedeutet. Für Funktionen $f(x/x_c)$ (denken Sie an die Exponentialfunktion) die also nicht von weiteren Parametern abhängen, ist ganz

klar x_c (oder ein Vielfaches mit einem dimensionslosen Parameter, den wir bei einer cleveren Definition von x_c eigentlich absorbiert haben sollten) die charakteristische Skala von x angibt. Bei Potenzgesetzen ist dies nicht möglich, weil es immer willkürlich wäre: Ist $(x/4)^\alpha$ eine Definition von $x_c = 4$ oder sagt uns $4^{-\alpha}x^\alpha$ dass $x_c = 1$ ist? Das können wir nicht entscheiden. Darum nennt man dieses Potenzgesetzverhalten auch skalenfreies Verhalten, oder Verhalten unendlicher Reichweite.

4.4.1 Grundgleichungen im Ortsraum

Wir beginnen unsere Analyse der Renormierungsgruppe im Ortsraum. Das ist die anschaulichste Methode. Die Näherungen wären allerdings im Impulsraum wesentlich zuverlässiger, dies sprengt aber den Rahmen dieser Vorlesung. Die Grundidee (Zeichnungen in der Vorlesungen) ist die Folgende

1. Wir starten vom mikroskopischen Modell, dessen Freiheitsgrade wir mit s beschreiben wollen. Wann auch immer wir Formeln konkret machen gehen wir davon aus, dass es sich um Spins handelt und $s = \pm 1$ als Wertebereich haben.
2. Wir definieren Blocks aus n von diesen Freiheitsgraden, die wir künftig als einzigen, kollektiven Freiheitsgrad behandeln wollen. Wir definieren neue Parameter s' , die diese Blocks beschreiben sowie eine Regel, wie diese aus den s bestimmt werden. Dies ist typischerweise eine "Abstimmungsregel" der Form

$$T(s'; s_1, s_2, \dots, s_n) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } s' \sum_i^n s_i > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Dieses T ist eine Transfermatrix bei dieser Abbildung, dessen formale Benutzung nachher klarer wird.

3. Wir bilden den Hamilton $\hat{H}(s)$ auf einen reskalierten Hamilton $\hat{H}(s')$ ab. Dabei fordern wir, dass die Zustandssumme invariant bleibt in der Form
- 4.

$$Z = \text{Tr}_s e^{-\beta \hat{H}(s)} = \text{Tr}_{s'} \text{Tr}_s \prod_{\text{blocks}} T(s'; s_1 \dots s_n) e^{-\beta \hat{H}(s)} \equiv \text{Tr}_{s'} e^{-\beta \hat{H}'(s')}$$

dabei müssen wir auch die kollektiven Variablen analog transformieren. Der interessante Teil des Hamiltons wird durch die Wechselwirkungen $\{K\}$ beschrieben, die zu neuen Kopplungen $\{K'\}$ verändert werden (renormiert) werden müssen. Diese Abbildung $\{K'\} = \mathcal{R}(\{K\})$ heißt *Renormierungsgruppentransformation*.

5. Wir starten mit dem neuen Hamilton bei Schritt 2.

4.4.2 Renormierungsgruppe im eindimensionalen Isingmodell

Wir studieren speziell die Renormierungsgruppe durch Blockspintransformationen im eindimensionalen Isingmodell $\hat{H}_{\text{Ising}} = -K \sum s_i s_{i+1}$. Wir wissen aus früheren Vorlesungen, dass dieses Modell *keinen* ferromagnetischen Phasenübergang mit $T_c > 0$ hat, aber Ordnungsphänomene bei $T \rightarrow 0$ zeigt. Wir werden dann die Ideen der Renormierungsgruppe verallgemeinern auf andere Modelle und höhere Dimensionen. Als Spin-Blocks wählen wir immer drei Spins (Zeichnungs-Vorlesung) und für den Spin dieses Blocks überlegen wir uns die denkbar einfache Regel, dass immer der Spin in der Mitte zählt. Die Transfermatrix ist damit $T(s'; s_1, s_2, s_3) = \delta_{s' s_2}$. Die Renormierungsgruppentransformation (im Ortsraum aus *Dezimirung* genannt) besteht jetzt aus dem Ausintegrieren der Randspins. Wenn wir Spins $s_1 \dots s_6$ aufteilen in zwei 3er Blocks (Zeichnung in der Vorlesung), dann ist $s'_1 \equiv s_2$ und $s'_2 \equiv s_5$. Dazu wollen wir deren Beitrag zur Zustandssumme $e^{\beta K s'_1 s_3} e^{\beta K s_3 s_4} e^{\beta K s_4 s'_2}$ durch einen renormierten Ausdruck ersetzen. Wir formen um

$$\begin{aligned} e^{\beta K s_3 s_4} &= \cosh(K s_3 s_4) + \sinh(K s_3 s_4) = \cosh K + s_3 s_4 \sinh K \\ &= \cosh K (1 + s_3 s_4 x) \quad x = \tanh K \end{aligned}$$

wobei wir dazu übergegangen sind, K in Einheiten von $k_B T$ zu messen. Wenn wir das für die anderen Terme machen, erhalten wir insgesamt für den Beitrag zur Zustandssumme

$$\begin{aligned} &\cosh^3 K (1 + x s'_1 s_3) (1 + x s_3 s_4) (1 + x s_4 s'_2) = \\ &\cosh^3 K [1 + x (s'_1 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s'_2) + x^2 (s'_1 s_4 + s'_1 s_3 s_4 s'_2 + s'_2 s_3) + x^3 s'_1 s'_2] \end{aligned}$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass die Quadrate der Spins jeweils $= 1$ sind. Wir sehen jetzt, dass beim Spuren über s_3 und s_4 alle Terme ungerade sind und herausfallen, bis auf die Ordnung x^3 . Wir erhalten damit als Beitrag zur Zustandssumme

$$2^2 \cosh^3 K (1 + x^3 s'_1 s'_2) \equiv z (1 + x' s'_1 s'_2).$$

Wir werden gleich sehen, dass der Proportionalitätsfaktor z die Physik nicht beeinflusst. Was bleibt ist, dass wir die Kopplungskonstante renormiert haben gemäß $K' = \tanh^{-1}(\tanh K)^3$. Wenn wir das jetzt für alle Spin-Tripel in der Kette machen, erhalten wir insgesamt den renormierten Hamilton $\hat{H}' = N g(k) - K' \sum_i s'_i s'_{i+1}$. Der Vorfaktor $g(k) = -\frac{1}{2} \log \left(\frac{\cosh^3 K}{\cosh K'} \right) - \frac{2}{3} \log 2$ hängt nicht von den Variablen des Systems ab und ist damit für die Thermodynamik irrelevant. Wir sehen also, dass der Hamilton seine Form nicht ändert. Was passiert jetzt, wenn wir diese Renormierungsgruppengleichung iterieren? Wir schreiben sie als $x' = x^3$ mit $x = \tanh K$. Offensichtlich ist $|x| \leq 1$. Für $|x| < 1$ führt uns die Iteration immer auf $x \rightarrow 0$. Für $|x| = 1$ auf $|x| = 1$. Letzterer Fall entspricht $K/k_B T \rightarrow \infty$ also $T = 0$. Das bedeutet, dass die kollektive Physik des Systems bei endlichen Temperaturen der des nichtwechselwirkenden Systems

entspricht, es wird also paramagnetisch, nur bei $T = 0$ ist ferromagnetische Ordnung stabil. Dies entspricht der physikalischen Lösung aber z.B. nicht der Molekularfeldtheorie. Dieses Verhalten der Parameter unter Iterierung der RG-Gleichung nennen wir auch den RG-Fluss unter der RG und in der Vorlesung malen wir dann ein Flussdiagramm.

Wie verhält sich die Korrelationslänge? Wir haben die Gitterkonstante um einen Faktor $b = 3$ erhöht. Ausgedrückt als Funktion der Kopplungskonstante bleibt die physikalische Korrelationslänge also invariabel für $\xi(x') = \xi(x)/b$ mit $x' = x^3$. Die Lösung ist $\xi = c/\log x = c/\log \tanh K$ mit einer Integrationskonstante c . Dies bleibt immer endlich, jedoch ist für $T \rightarrow 0$ gerade

$$\tanh K = \frac{1 - e^{-2K}}{1 + e^{-2K}} \simeq 1 - 2e^{-2K} \Rightarrow (\log \tanh K)^{-1} \simeq (\log 1 - e^{-2K})^{-1} \simeq -e^{2K}$$

was bedeutet, dass die Korrelationslänge exponentiell anwächst aber nicht, wie bei einem echten Phasenübergang, divergiert.

4.4.3 Renormierungsgruppe in höheren Dimensionen

Motiviert durch diesen Erfolg können wir uns fragen, ob wir das gleiche Ergebnis den auch in komplizierteren Modellen und höheren Dimensionen erhalten können. Die Antwort ist ein entschiedenes jein! Es wird nicht so elegant gehen, dass wir keine weiteren Näherungen machen müssen. Dennoch können wir sehr wohl durch Näherungen innerhalb der RG etwas über die zugrundeliegenden Modelle lernen. Wir wollen dieses Thema qualitativ diskutieren und am Ende ein Beispiel rechnen.

Warum ging in einer Dimension alles so glatt? Nun, bei niedrigen Temperaturen können wir durch eine Entwicklung des $\tanh K$ wie oben zeigen, dass $K' \simeq K - (\log 3)/2$. Das bedeutet, dass sich an der Physik eigentlich nichts ändert und das System langsam weicher wird. Wir können das physikalisch so verstehen: Bei niedrigen Temperaturen sind die Spins fast immer parallel ausgerichtet. Ihre Wechselwirkung ist gegeben durch die äußeren Spins, d.h. wir haben $K' \simeq K \langle s_3 \rangle_{s'_1=1} \langle s_4 \rangle_{s'_2=1} \simeq K$. In zwei Dimensionen ist die Situation anders: Die Blocks wechselwirken jetzt durch drei Paare auf der Kante, d.h. bei starker Wechselwirkung können wir erwarten $K' = 3K$ - mit anderen Worten, die steigende Koordinationszahl (bei verschiedenen Gittertypen ist also die Koordinationszahl das, was die Dimensionalität wirklich ausmacht). Wir haben also eine Wechselwirkungs*linie* statt den Wechselwirkungspunkten, in 3D eine Fläche usw. wir erwarten in D -Dimensionen, dass $K' \simeq b^{D-1}K$ bei großen K .

Damit sehen wir sofort, dass bei niedrigen Temperaturen / starken Kopplungen ein stabiler Fixpunkt mit $K^{-1} = 0$ entsteht. Andererseits muss das System bei hohen Temperaturen paramagnetisch werden, also haben wir einen Fixpunkt bei $\beta \rightarrow 0$ mit $K = 0$. Dazwischen muss dann eine trennende Temperatur T^* liegen (siehe Diagramm), so dass bei niedrigeren Temperaturen alles zum magnetisierten und bei höheren Temperaturen alles zum unmagnetisierten Fixpunkt fließt. Dies markiert also die physikalische kritische Temperatur.

Die Analyse des RG-Flusses nah an den Fixpunkten erlaubt die Berechnung der kritischen Exponenten. Wir diskutieren einen Fixpunkt K^* , also $\mathcal{R}(K^*) = K^*$ und nehmen an, dass K' und K bereits in der Nähe sind. Wir können dann schreiben

$$K' - K^* = \mathcal{R}(K^* + K' - K^*) - K^* = \mathcal{R}(K^*) + \mathcal{R}'(K^*)(K' - K) - K^* \equiv b^y (K' - K).$$

Im letzten Schritt haben wir die Abhängigkeit der Ableitung der Renormierungsgruppentransformation vom Skalenparameter b parameterisiert und $y = \log \mathcal{R}'(K^*) / \log b$ definiert. Nah am Fixpunkt erwarten wir, dass die Korrelationslänge skaliert wie $r_c \propto (K - K^*)^{-\nu}$. Die RG-Transformation dieser Länge ist $\xi(K) = b\xi(K')$ und damit folgt

$$(K - K^*)^{-\nu} = b(K' - K^*)^{-\nu} = b[b^y (K - K^*)]^{-\nu}.$$

Diese Gleichung ist nur lösbar wenn $\nu = 1/y$. Wir werden später sehen, wie wir ganz allgemein zeigen können, dass die kritischen Exponenten gegeben sind durch die Ableitungen der Renormierungsgruppentransformation in der Nähe eines Fixpunkts. Anders gesagt: Die Wohldefiniertheit von y (die z.B. die Differenzierbarkeit von \mathcal{R} mit einschließt) ist gleichbedeutend mit der Existenz eines kritischen Exponenten.

Ein weiterer, entscheidender Aspekt, der die RG-Analyse in Dimensionen $D > 1$ erschwert: Neben der Wechselwirkung zwischen direkt benachbarten Blöcken können auch indirekt Spins aus den übernächsten Blöcken wechselwirken. Durch wiederholtes Anwenden der RG-Transformation entstehen so neue Kopplungen im effektiven Hamilton (=sie werden generiert). Das bedeutet, dass exakte RG-Hamiltonoperatoren immer komplizierter werden. Die Kunst der Näherung in der RG ist u.a., mit diesen neuen Kopplungen richtig umzugehen.

4.4.4 Umgang mit allgemeiner Renormierungsgruppentheorie

Wir analysieren jetzt die Fixpunkte analog zu oben für den Fall mehrerer Kopplungen $\{K\}$. Wir gehen wieder davon aus, dass \mathcal{R} hinreichend differenzierbar ist und lienearisieren die RG-Gleichungen um den Fixpunkt gemäß

$$K'_a - K_a^* = \sum_b T_{ab} (K_b - K_b^*) \quad T_{ab} = \left. \frac{\partial K'_a}{\partial K_b} \right|_{K=K^*}$$

Die Matrix T_{ab} ist im Allgemeinen nicht symmetrisch, dennoch hat sie normalerweise reelle Eigenwerte λ_i . Wichtig ist aber, dass die linken Eigenvektoren e_i im Allgemeinen *nicht* die zu Zeilenvektoren transformierten rechten Eigenvektoren sind, sondern unabhängige Größen. Aus diesen Eigenvektoren konstruieren wir Skalenvariablen gemäß $u_i \equiv \sum_a e_{i,a} (K_a - K_a^*)$. Diese haben die Eigenschaft, sich multiplikativ und entkoppelt zu transformieren

$$u'_i = \sum_a e_{i,a} (K'_a - K_a^*) = \sum_a e_{i,a} T_{ab} (K_b - K_b^*) = \sum_b \lambda_i e_{b,i} (K_b - K_b^*) = \lambda_i u_i$$

wobei wir im vorletzten Schritt ausgenutzt haben, dass es sich um linke Eigenvektoren handelt. Damit haben wir im Parameterraum des Systems, der durch die Kopplungen aufgespannt wird, das Problem in einen Satz eindimensionaler Probleme zerlegt, die jeder einen RG-Eigenwert gemäß $\lambda_i = b^{y_i}$ impliziert. Die dazugehörigen Störungen (=Abweichungen vom Fixpunkt) u_i (Zeichnungen Vorlesung) können wir wie folgt klassifizieren

- wenn $y_i > 0$ ist, heißt die Störung *relevant*. Eine kleine Abweichung vom Fixpunkt wird durch wiederholtes Anwenden der Renormierungsgruppe verstärkt und das System fließt vom Fixpunkt weg.
- wenn $y_i < 0$ ist, heißt die Störung *irrelevant*. Eine kleine Abweichung vom Fixpunkt wird durch die RG wieder dorthin zurückgetrieben.
- wenn $y_i = 0$ ist, heißt die Störung *marginal*. Nur durch Analyse höherer Ordnungen kann entschieden werden, wie sich das System verhält. Marginale Störungen liefern oft sehr exotisches Verhalten und werden im Weiteren nicht betrachtet.

Wenn wir ein System mit N Kopplungen anschauen an einem Fixpunkt mit $n \leq N$ relevanten Eigenwerten, dann haben wir $N - n$ irrelevante Eigenwerte. Um den Fixpunkt existiert also eine $N - n$ - dimensionale Hyperfläche an Punkten, die an den Fixpunkt angezogen werden. Diese heißt *kritische Fläche*, denn für die Punkte auf dieser Fläche wird die Physik bei großen Längenskalen durch die Eigenschaft des Phasenübergangs diktiert. Typischerweise sind die K nicht direkt experimentell kontrollierbare Parameter (es sei denn, man studiert ein künstliches System wie z.B. ein optisches Gitter), steht aber in direkter Beziehung zu diesen. Generell müssen also in einem Experiment n Parameter genau eingestellt werden, um die kritische Fläche zu erreichen. Wir können diese Flächen in einem Flussdiagramm (Vorlesung) diskutieren.

4.4.5 Beispiel: RG-Analyse des Ginzburg-Landau-Hamiltons

Wir wollen nun den Ginzburg-Landau-Hamilton mittels RG analysieren. Wir teilen ihn auf in einen exakt lösbaren freien Teil \hat{H}_0 und eine Störung $\hat{V} = B\eta^4$. Zunächst analysieren wir nur \hat{H}_0 . Wir wiederholen einige Relationen für den D - dimensionalen Fall, um gleich leicht die Skalendimensionen herausziehen zu können. η wird Fouriertransformiert gemäß

$$\tilde{\eta}(\vec{q}) = \int \frac{d^D r}{L^{D/2}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \eta(\vec{r}) \quad \eta(\vec{r}) = \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D L^{D/2}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \tilde{\eta}(\vec{q}),$$

wobei L die lineare Größe der Probe ist. Damit können wir den freien Hamilton im Impulsraum schreiben als $\hat{H}_0 = \int_{q < \Lambda} d^D q (\alpha t + q^2) |\tilde{\eta}(\vec{q})|^2$. Hier erinnern wir uns daran, dass der GL-Hamilton eine Beschreibung auf großen Längenskalen, größer als das zugrundeliegende Gitter, liefert und schneiden den Impuls darum bei einem Maximum $\Lambda \propto 1/a$ ab. Die freie Korrelationsfunktion ist dass klarerweise $\tilde{G} = (\alpha t + q^2)^{-1}$ im Fourierraum (in dem wir so weit wie möglich

bleiben wollen). Die RG-Transformation des Mittels über die kürzesten Längenskalen mit Reskalieren um einen Faktor b entspricht im Impulsraum dem Ausintegrieren von $\Lambda/b < q < \Lambda$. Gemäß diesem Schnitt teilen wir den Ordnungsparameter auf in $\eta(\vec{r}) = \eta_1(\vec{r}) + \bar{\eta}(\vec{r})$. Außerdem betrachten wir jetzt wieder den nichtlinearen Term

$$V = B \int d^D r \eta^4(\vec{r}).$$

Wir teilen den Hamilton auf gemäß $H = H_0(\eta_1) + H_0(\bar{\eta}) + V(\eta_1, \bar{\eta})$. Hier sehen wir, dass die Fourierkomponenten in V nicht entkoppeln. Die Skalentransformation (wobei wir im Hinterkopf behalten müssen, dass wir am Ende η reskalieren) wird dann durch folgende Gleichung bestimmt

$$\exp(-\beta H'_1[\eta_1]) = \exp\left(-\beta \hat{H}_0[\eta_1]\right) \frac{\int \mathcal{D}\bar{\eta} \exp(-\beta H_0[\bar{\eta}]) \exp(-\beta V[\eta_1, \bar{\eta}])}{\int \mathcal{D}\bar{\eta} \exp(-\beta H_0[\bar{\eta}])}.$$

In niedrigster Ordnung in B führt das zum entsprechenden Hamilton

$$\hat{H}_1 \simeq \hat{H}_0[\eta_1] + \frac{\int \mathcal{D}\bar{\eta} \exp(-\beta H_0[\bar{\eta}]) V[\eta_1, \bar{\eta}]}{\int \mathcal{D}\bar{\eta} \exp(-\beta H_0[\bar{\eta}])}.$$

Wir führen hier also eine Gaußsche Mittelung über V durch, welches die Form eines Polynoms in $\bar{\eta}$ hat. Wir werden die Korrelationsfunktion bei großen Wellenzahlen benötigen, also

$$\bar{G}(\vec{p}) = \int_{\Lambda/b < q < \Lambda} \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{p}}}{q^2 + \alpha t}.$$

Jetzt können wir η^4 zerlegen als

$$\langle (\eta_1 + \bar{\eta})^4 \rangle = \eta_1^4 + 6\eta_1^2 \langle \bar{\eta}^2 \rangle + \langle \bar{\eta}^4 \rangle.$$

Hier haben wir ausgenutzt, dass das Mittelungsintegral über q , angedeutet durch die spitzen Klammern, ein Gauß-Integral ist und damit insbesondere alle ungeraden Momente verschwinden. Der letzte Term trägt nur eine η_1 -unabhängige Konstante bei und kann damit weggelassen werden. Interessant ist der Mittlere Term, $6\eta_1^2 \bar{G}(0)$. Der renormierte Hamilton ist damit

$$H'_1 = \int d^D r \left[\frac{1}{2} (\nabla \eta_1)^2 + \frac{1}{2} (\alpha t + 6B\bar{G}(0)) \eta_1^2 + B\eta_1^4 \right].$$

Hier haben wir die ganzen Differentiale noch in den alten Längen ausgedrückt. Das müssen wir noch ausgleichen mittels

$$d^D r \rightarrow b^D d^D r' \quad \nabla \rightarrow b^{-1} \nabla' \quad \eta_1 \rightarrow b^{-\omega_1} \eta'_1.$$

Die Transformation für η_1 ist notwendig, weil es z.B. eine Dichte einer invarianten Größe darstellen kann. Wir haben also

$$H'_1 = \int d^D r' b^{D-2\omega_1-2} \left[\frac{1}{2} (\nabla' \eta'_1)^2 + \frac{1}{2} b^2 (\alpha t + 6B\bar{G}(0)) \eta_1'^2 + B b^{2-2\omega_1} \eta_1'^4 \right].$$

Wie bestimmen wir nun ω_1 ? Wir betrachten die Korrelationsfunktion des freien Hamilton. Sie ist einerseits, wie oben gezeigt $\propto 1/q^2$ am kritischen Punkt, skaliert also wie b^{2-D} . Andererseits ist sie einfach das Produkt von Feldern, also $\propto b^{-2\omega_1}$. Damit ist $\omega_1 = D/2 - 1$ und wir sehen, dass der Vorfaktor in H_1' zu 1 wird. Wir definieren $\epsilon = D - 4$ und erhalten so die Flussgleichungen

$$\begin{aligned}\alpha t' &= b^2 (\alpha t + 12B\bar{G}(0)) \\ B' &= b^\epsilon B.\end{aligned}$$

Um dies auszuformulieren brauchen wir noch da Skalenverhalten von

$$\bar{G}(0) = \int_{\frac{\Lambda}{b} \leq q \leq \Lambda} \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2 + \alpha t} = K_D \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} dq \frac{q^{D-1}}{q^2 + \alpha t} = K_D \int dq q^{D-3} \left(1 + \frac{\alpha t}{q^2 + \alpha t}\right) = \frac{K_D}{D-2} \Lambda^{D-2} (1 - b^{2-D})$$

Hier haben wir $K_D = S_D / (2\pi)^D$ definiert. Ein Fixpunkt dieses Gleichungssystems ist bei $(0, 0)$ und die Gleichungen sind linear. Die lokale Matrix ist mit der entsprechenden Konstante C

$$T = \begin{pmatrix} b^2 & C(b^2 - b^\epsilon) \\ 0 & b^\epsilon \end{pmatrix}.$$

Das charakteristische Polynom $\det(T - s\hat{1})$ hat die Nullstellen $s = b^2$ und $s = b^\epsilon$, was uns sofort sagt, dass der Fixpunkt nur stabil ist, wenn $\epsilon > 0$. Wir finden die linken Eigenvektoren v_s als die Transponierten der Eigenvektoren von T^T . Zu b^ϵ finden wir $(0, 1)$ und zu b^2 finden wir $(1, C)$. Damit sind die Skalenvariablen B und $\alpha t + CB$. Wir interpretieren dies wie folgt: Wir erhalten tatsächlich einen Phasenübergang bei $t = 0$, also $T = T_c$. Die Störung durch den Term vierter Ordnung ist irrelevant. Dieser Fixpunkt, auch Gaußscher Fixpunkt genannt, entspricht mean field / Ginzburg-Landau. Es gibt einen weiteren Fixpunkt bei $\epsilon < 0$, der von der dann relevanten Störung aus dem Term vierter Ordnung dominiert wird. Diesen zu analysieren geht über das Material dieses Kurses hinaus.