

Quantenmechanik II

E. Müller–Hartmann

SS 2004

Diese Vorlesung wurde auch in den Sommersemestern 1995 und 1998 angeboten.

Hinweise auf Tippfehler und andere Unzulänglichkeiten sind jederzeit willkommen (per email an: mh@thp.uni-koeln.de).

Literatur:

Diese Vorlesung orientiert sich vielfältig an dem Lehrbuch:
J.J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Addison–Wesley
1967

Als weitere Quelle wird besonders empfohlen:
A. Messiah, *Quantum Mechanics II*, North–Holland 1962

Eine Einführung in nichtabelsche Eichtheorien findet man in:
E.S. Abers und B.W. Lee, *Gauge Theories*, *Physics Reports*
1, 1 ff (1973)

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	3
2. Diskrete und kontinuierliche klassische Mechanik	7
3. Klassische Skalarfelder	9
4. Das klassische Maxwellfeld	16
5. Das klassische Strahlungsfeld	18
6. Quantisierung des Strahlungsfeldes	21
7. Emission und Absorption von Photonen durch Atome	26
8. Streuung von Licht an Atomen (Kurzfassung)	30
9. Die Diracgleichung	32
10. Der nichtrelativistische Grenzfall	36
11. Freie Diraceteilchen	38
12. Kovarianz der Diracgleichung	41
13. Bilineare Kovarianten	43
14. Quantisierung des Diracfeldes	47
15. Bemerkungen zur Quantisierung des Klein–Gordon–Feldes	51
16. Struktur nichtabelscher Eichtheorien	53
Anhang A	58
Anhang B	59

1. Einleitung

Inhalt der Vorlesung Quantenmechanik I war im wesentlichen die nichtrelativistische Quantenmechanik des Elektrons, die um 1925 entwickelt wurde. Sie hat zu einem weitgehenden Verständnis der Atome, der Moleküle und der kondensierten Materie geführt.

Eine Beschreibung der Natur in diesem Rahmen war aber offensichtlich aus mehreren Gründen unvollständig. Zum einen beschreibt sie die Bewegung von Elektronen bei relativistischen Geschwindigkeiten nicht richtig. Dies hat unter anderem zur Folge, dass die Feinstruktur des Wasserstoffatoms nicht erfasst wird. Letztere kann man sich zwar durch eine geeignete Ergänzung der Theorie durch relativistische Korrekturterme beschaffen, aber dies kann keine korrekte lorentzinvariante Theorie ersetzen, für die ein klarer Bedarf besteht.

Die korrekte relativistische Wellengleichung für Elektronen wurde 1928 von Paul Dirac angegeben (Nobelpreis 1933, für die Vorhersage des Positrons; gemeinsamer Preis mit Erwin Schrödinger). Wir werden die Diracgleichung in dieser Vorlesung behandeln.

Ein zweiter Defekt der Quantenmechanik ist mindestens genauso ernst zu nehmen: Prozesse, in denen Teilchen erzeugt oder vernichtet werden, können nicht beschrieben werden. Wegen der Normierung der Wellenfunktion und der Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist ein Elektron immer vorhanden oder immer nicht vorhanden. Ein Beta-Zerfall z.B., bei dem ein Elektron und ein Antineutrino entstehen, wobei sich ein Neutron in ein Proton verwandelt, ist der Wellenmechanik fremd. Ein noch einfacheres Beispiel: Ein angeregtes isoliertes Atom - es sei kein elektromagnetisches Feld vorhanden - geht nach einiger Zeit in den Grundzustand oder einen anderen energetisch tieferen Zustand über unter Emission eines Photons. Auch dieser Prozess existiert in der Wellenmechanik nicht.

Der Durchbruch bei diesem Problem gelang ebenfalls Paul Dirac mit einer Arbeit 1927, die den Titel "The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation" hatte. Dirac eröffnete damit, was man heute Quantenfeldtheorie (QFT) nennt. Diese Entwicklung ist ebenfalls Thema dieser Vorlesung.

Dabei geht es zunächst um die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes, wodurch dem Feld Teilchen mit einer bestimmten Masse und einem bestimmten Spin zugeordnet werden. Wir werden diskutieren, wie den transversalen Anteilen des elektromagnetischen Feldes die Photonen als quantenmechanische Teilchen mit Ruhmasse 0 und Spin 1 entsprechen. Im Rahmen dieser Theorie konnte eine Vielzahl von Prozessen, bei denen Photonen emittiert oder absorbiert werden, quantitativ beschrieben werden (Quantenelektrodynamik, QED). Die Rechentechniken, die diese Theorie umfassend anwendbar machten, wurden zwar erst um 1950 voll entwickelt, so dass Größen wie die Lambshift ($2s_{1/2}$ - $2p_{1/2}$ -Aufspaltung in der Feinstruktur des Wasserstoffatoms) mit hoher Präzision berechnet werden konnten (Nobelpreis Feynman, Schwinger, Tomonaga 1965). Aber die physikalischen Grundlagen dieser Theorie waren schon kurz nach 1930 klar. [Die Entwicklung dieser Rechentechniken wurde durch die Divergenz der Integrale verzögert, die bei der störungstheoretischen Berechnung der Prozesse vorkommen. Dieses Problem, das wegen der Punktförmigkeit der Teilchen auftritt ("Ultraviolettdivergenz"), konnte durch eine Renormierung genannte Prozedur gelöst werden. Man sagt, die Quantenelektrodynamik ist eine renormierbare Feldtheorie.]

Damit die Erzeugung und Vernichtung von Elektronen beschrieben werden kann, muß auch das Diracfeld quantisiert werden. Man spricht hier auch von der zweiten Quantisierung. Sie ermöglicht die völlige Wandlung der Quantenmechanik in eine Quantenfeldtheorie.

Eine Naturbeschreibung im Rahmen der Quantenfeldtheorie unter Berücksichtigung der Lorentzinvarianz als einem universellen Symmetrieprinzip hat interessante allgemeine Konsequenzen. Wir erwähnen hier die folgenden beiden Regeln:

1. Zu jedem geladenen Teilchen existiert ein Antiteilchen mit entgegengesetzter Ladung, gleicher Masse und gleicher Lebensdauer.
2. Alle Teilchen gehorchen dem Spin-Statistik-Theorem (Pauli 1940): Teilchen mit halbzahligen Spin haben Fermi-Dirac-Statistik, Teilchen mit ganzzahligen Spin Bose-Einstein-Statistik.

Nachdem die Quantenfeldtheorie (in Form der QED) die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen Elektronen (und Positronen) so hervorragend beschreibt, stellt sich die Frage, ob sie auch für andere Teilchen und Wechselwirkungen erfolgreich ist. Nukleonen unterliegen kurzreichweitigen und sehr starken Kernkräften (“Starke Wechselwirkung”). Hier hat Yukawa 1935 gefolgert, dass das Feld der Kernkräfte Feldquanten mit einer Ruhmasse von einigen $100m_e$ haben sollte. Die 1947 entdeckten π -Mesonen haben tatsächlich diese Funktion (Nobelpreis Yukawa 1949). (Vorher war fälschlich das 1937 in der Höhenstrahlung entdeckte Myon als das Kernkraftquant betrachtet worden.) Wir wissen allerdings heute, dass diese Beschreibung der Kernkräfte nicht fundamental ist.

Als dritte Wechselwirkung ist die für den Beta-Zerfall verantwortliche schwache Wechselwirkung zu nennen. Sie ist sehr kurzreichweitig und würde durch sehr massive Feldquanten vermittelt.

Wir besitzen heute fundamentale Theorien für die starke und die schwache Wechselwirkung im Rahmen der Quantenfeldtheorien. Der Zugang zu diesen Theorien ist durch die Erkenntnis möglich geworden, daß die lokale Eichinvarianz ein grundlegendes Prinzip der Naturbeschreibung ist. Dieses Prinzip werden wir später ebenfalls besprechen.

Insgesamt kann man daher zusammenfassen, dass im Rahmen der relativistischen Quantenfeldtheorie das Prinzip der lokalen Eichinvarianz zu einer umfassenden Beschreibung der starken, elektromagnetischen und schwachen Wechselwirkung zwischen den Fermionen führt.

In diesem Rahmen beschreiben wir die Natur zur Zeit folgendermaßen: Es gibt Spin-1/2-Fermionen (Leptonen und Quarks), die gewisse globale Eichsymmetrien besitzen. Die Forderung, dass diese Symmetrien lokal sein sollten, hat unumgänglich zur Folge, dass es Eichbosonen (Spin-1-Teilchen) gibt, die Wechselwirkungen zwischen den Fermionen vermitteln. Die Eichinvarianz, die mit der Erhaltung der elektrischen Ladung verknüpft ist (Phaseneichung $U(1)$), ist seit langem bekannt und erzwingt die Existenz des Photons und die elektromagnetische Wechselwirkung. Die anderen Eichsymmetrien waren viel schwerer zu erkennen. Es gibt eine flavor-SU(2)-Symmetrie, die die Existenz der 3 Eichbosonen W^+ , W^- und Z^0 erzwingt (Nachweis Z^0 1983, Nobelpreis Rubbia 1984) und die schwache Wechselwirkung zur Folge hat. Es gibt außerdem eine color-SU(3)-Symmetrie, die die Existenz von 8 Gluonen zur Folge hat, die die starke Wechselwirkung zwischen den Quarks erzeugen. Die Kernkräfte

sind in dieser Beschreibung effektive Restwechselwirkungen ähnlich wie die van der Waals–Wechselwirkung zwischen Atomen.

Es gibt einen besonders engen und auch experimentell gesicherten Zusammenhang zwischen der elektromagnetischen und der schwachen Wechselwirkung. Dies führte zu einer Erweiterung der QED auf eine QFT der elektro–schwachen Wechselwirkung, die Glashow–Salam–Weinberg–Theorie (GSW–Theorie, Nobelpreis Glashow, Salam und Weinberg 1979). Die starke Wechselwirkung wird durch die Quantenchromodynamik (QCD) beschrieben. Es gibt Gründe für die Vermutung, dass sich GSW–Theorie und QCD zu einer großen vereinheitlichten Theorie (GUT) zusammenfassen lassen sollten. Solche GUTs haben allerdings zur Zeit noch relativ spekulativen Charakter.

Die einzige Wechselwirkung, die bisher nicht erfolgreich im Rahmen der QFTen beschrieben werden konnte, ist die Gravitation. Das Gravitationsfeld der allgemeinen Relativitätstheorie ist ein Tensorfeld und würde Feldquanten mit Spin 2 (und Masse 0) haben. Der direkte experimentelle Nachweis solcher Feldquanten (Gravitonen) ist weit außerhalb aller Möglichkeiten. Zur Zeit gibt es nicht einmal einen direkten Nachweis dafür, dass das Gravitationsfeld dynamisch ist (Gravitationswellen). Es gibt jedoch recht überzeugende indirekte Hinweise auf deren Existenz durch die Beobachtung, dass gewisse Doppelsterne einander beschleunigt umkreisen. Diese Beobachtung kann zwanglos durch Strahlungsdämpfung aufgrund der Emission von Gravitationswellen erklärt werden.

Der Tensorcharakter des Gravitationsfeldes (im Vergleich zum Vektorcharakter der anderen Wechselwirkungsfelder) zeigt schon, dass die Gravitation nicht völlig analog zu den anderen Wechselwirkungen behandelt werden kann. Neue Hoffnung, die alten Schwierigkeiten zu überwinden, wurden durch die Entdeckung des Konzepts der Supersymmetrie geweckt. Trotz dieses Fortschritts gibt es bis heute keine brauchbare QFT der Gravitation (keine “renormierbare” QFT). Die Supersymmetrie würde zur Folge haben, dass zu jedem Teilchen ein supersymmetrischer Partner gehört. Solche bisher nicht beobachteten Partner sollten mit der nächsten Beschleunigergeneration beobachtbar werden.

Als Alternativen zu QFTen werden heute die Stringtheorien diskutiert, in denen die Teilchen keine punktförmigen, sondern linienförmige Objekte sind. Das zeitliche Schicksal eines solchen Objekts wird nicht durch eine Weltlinie, sondern durch eine zweidimensionale Weltfläche beschrieben. In 2 Dimensionen (und nur dort) hat man mit der konformen Gruppe eine besonders reichhaltige Invarianzgruppe zur Verfügung, die es ermöglicht, den Stringtheorien besonders weitreichende Struktur zu geben. Stringtheorien mit Supersymmetrie (Superstringtheorien) scheinen vielversprechende Strukturen für eine umfassendere Beschreibung aller vier Wechselwirkungen zu sein. Damit eine solche Theorie akzeptabel wäre, müsste sie eine Reihe von Eigenschaften in sich vereinigen. Nach einer solchen Theorie wird immer noch gesucht mittels einer vollständigen gruppentheoretischen Klassifikation aller Superstringtheorien.

Inzwischen gibt es weiterführende Spekulationen, nach denen auch die Stringtheorien nicht als fundamental anzusehen wären. Aufgrund von Dualitätsbeziehungen zwischen Stringtheorien vermutet man eine noch umfassendere Theorie (M–Theorie) hinter den Stringtheorien, in der die Teilchen nicht nur linienförmige, sondern auch flächenförmige und höherdimensionale Objekte wären.

Die räumliche Ausdehnung der Teilchen im Rahmen der Stringtheorien würde von

der Größenordnung einer Plancklänge l_P sein. Diese Längenskala ist dadurch gekennzeichnet, dass die Gravitation eine starke Wechselwirkung ist und dass Quanteneffekte ins Spiel kommen. Hierzu definieren wir zu jeder Masse M einen Gravitations- oder Schwarzschildradius r_S so, dass die Ruhenergie Mc^2 vergleichbar mit der potentiellen Gravitationsenergie einer Kugel der Masse M ist: $Mc^2 \sim GM^2/r_S$ oder

$$r_S \sim GM/c^2.$$

Die Quantenmechanik kommt hierbei ins Spiel, wenn diese Energie vergleichbar mit der quantenmechanischen Nullpunktsenergie eines Teilchens der Masse M ist, das in eine Kugel mit Radius r_S eingesperrt wird, $Mc^2 \sim \hbar c/r_S$. Dies ist gleichbedeutend mit einer Vergleichbarkeit des Gravitationsradius mit der Comptonwellenlänge,

$$r_S \sim \hbar/Mc.$$

Die simultane Erfüllung der beiden obigen Beziehungen definiert die Planckmasse

$$M_P \sim \sqrt{\hbar c/G} \sim 10^{-8} \text{ kg},$$

die entsprechende Energieskala

$$M_P c^2 \sim 10^{19} \text{ GeV}$$

und die Plancklänge

$$l_P \sim \sqrt{G\hbar/c^3} \sim 10^{-34} \text{ m}.$$

Die Punktförmigkeit der Leptonen und Quarks ist derzeit bis zu einer Größe von 10^{-17} cm experimentell gesichert. Dies zeigt, wie weit mögliche Physik auf der Längenskala der Plancklänge von einer direkten Beobachtbarkeit entrückt ist.

Nach diesem kurzen Überblick über die neueren Entwicklungen der Quantentheorie beginnen wir jetzt mit einer Rekapitulation der Grundbegriffe der Feldtheorie.

2. Diskrete und kontinuierliche klassische Mechanik

In der klassischen Mechanik lernen wir, dass die Dynamik eines Systems von Massenpunkten aus der Lagrangeschen Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

folgt, die ihrerseits aus dem Hamiltonschen Variationsprinzip

$$\delta S \equiv \delta \int_{t_1}^{t_2} L(\{q_i, \dot{q}_i\}) dt \doteq 0 \quad (\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0)$$

abgeleitet werden kann. Dabei ist die Lagrangefunktion

$$L = T - V$$

als Differenz zwischen kinetischer und potentieller Energie gegeben. Mit den zu q_i kanonisch konjugierten Impulsen

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

ergibt sich die Hamiltonfunktion des Systems zu

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L.$$

Dabei ist H als Funktion der Variablen q_i und p_i zu betrachten.

Als einfaches Beispiel für den Übergang zu einer Kontinuumsmechanik betrachten wir nun eine lineare Kette identischer Teilchen der Masse m , die paarweise durch identische Federn der Federkonstante k verbunden sind. Wenn η_i die Auslenkung des i -ten Teilchens aus seiner Ruhelage ist, lautet die Lagrangefunktion des Systems

$$L = \frac{1}{2} \sum_i [m \dot{\eta}_i^2 - k(\eta_{i+1} - \eta_i)^2].$$

Zur Durchführung eines Kontinuumslimes erweitern wir mit dem Gleichgewichtsabstand a benachbarter Teilchen:

$$L = \sum_i a \mathcal{L}_i, \quad \mathcal{L}_i = \frac{1}{2} \left[\frac{m}{a} \dot{\eta}_i^2 - ka \left(\frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a} \right)^2 \right].$$

Wenn man jetzt $a = dx \rightarrow 0$ gehen lässt, sollten $\frac{m}{a} = \mu$ (lineare Massendichte) und $ka = Y$ (Youngscher elastischer Modul) konstant gehalten werden. Aus $\frac{\eta_{i+1} - \eta_i}{a}$ wird dann die Ableitung $\frac{\partial \eta}{\partial x}$, wobei $\eta(x)$ ein kontinuierliches Auslenkungsfeld geworden ist. Wir haben jetzt

$$L = \int dx \mathcal{L}$$

mit der (eindimensionalen) Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[\mu \dot{\eta}^2 - Y \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \right].$$

Für die partiellen Ableitungen des Auslenkungsfeldes werden wir im folgenden meist die Abkürzungen $\eta_x \doteq \frac{\partial \eta}{\partial x}$ und $\eta_t \doteq \dot{\eta} = \frac{\partial \eta}{\partial t}$ benutzen.

Das Hamiltonprinzip lautet im Kontinuumsfall

$$\delta S \equiv \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \int dx \mathcal{L}(\eta, \eta_t, \eta_x) \doteq 0.$$

Hierbei kann $\eta(x)$ beliebig variiert werden mit der Einschränkung, dass $\delta \eta$ an den Grenzen der t - und der x -Integration verschwindet. Man erhält dann

$$\begin{aligned} \delta S &= \int dt \int dx \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} \delta \eta + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \delta \eta_x + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \delta \eta_t \right\} \\ &= \int dt \int dx \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \right) \right\} \delta \eta \doteq 0, \end{aligned}$$

woraus die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} = 0$$

folgt. Für unser Beispiel lautet sie

$$Y \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = 0;$$

die Lösungen dieser eindimensionalen Wellengleichung sind Wellen, die sich mit der Geschwindigkeit $v = \sqrt{Y/\mu}$ ausbreiten.

Zur Lagrangedichte \mathcal{L} können wir eine Hamiltondichte \mathcal{H} definieren:

$$\mathcal{H} = \dot{\eta} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}} - \mathcal{L} \quad (\text{im Beispiel: } \mathcal{H} = \frac{1}{2} [\mu \dot{\eta}^2 + Y \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2]),$$

so dass $H = \int dx \mathcal{H}$. Das zu $\eta(x)$ kanonisch konjugierte Feld wird oft mit $\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}}$ (im Beispiel: $\pi(x) = \mu \dot{\eta}(x)$) bezeichnet; \mathcal{H} ist natürlich als Funktion der Felder η und π zu betrachten.

3. Klassische Skalarfelder

Die Überlegungen des vorigen Abschnitts können leicht auf drei Raumdimensionen verallgemeinert werden. Wir betrachten dabei zunächst ein reelles Feld $\Phi(\mathbf{x}, t)$. Die Lagrangedichte hängt von Φ , $\partial\Phi/\partial x_k$ ($k = 1, 2, 3$) und $\partial\Phi/\partial t$ ab und die Euler–Lagrange–Gleichung lautet

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial\Phi/\partial x_k)} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial\Phi/\partial t)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} = 0.$$

Wir wollen nun annehmen, dass die Dynamik des Feldes Φ lorentzinvariant ist. Dies erfordert eine lorentzskalare Wirkung $S = \int dt \int d^3x \mathcal{L}$ und wegen der Lorentzinvarianz des vierdimensionalen Volumenelements $dt d^3x$ eine unter der Poincarégruppe invariante Lagrangedichte \mathcal{L} . Eine relativistisch kovariante Formulierung kann man entweder mittels des metrischen Tensors $g_{\mu\nu}$ ($\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$) und reeller Vierervektoren oder unter Vermeidung des metrischen Tensors (und der Unterscheidung zwischen kovarianten und kontravarianten Vierervektoren) mittels einer imaginären vierten Komponente erreichen. Letzteres ist auf die spezielle Relativitätstheorie beschränkt. Wir werden hier in Anlehnung an das Buch von Sakurai trotzdem (zumindest vorläufig) diese komplexe Schreibweise verwenden:

$$x_\mu = (\mathbf{x}, ict), \quad x_4 = ict \doteq ix_0.$$

Lorentztransformationen werden dann durch Matrizen $a_{\mu\nu}$ mit reellen Elementen für $\mu, \nu = 1, 2, 3$ bzw. $\mu, \nu = 4$ und rein imaginären Elementen für $\mu = 1, 2, 3$; $\nu = 4$ bzw. $\mu = 4$; $\nu = 1, 2, 3$ beschrieben und haben die Eigenschaft (Summationskonvention)

$$a_{\mu\nu} a_{\mu\lambda} = \delta_{\nu\lambda}, \quad \text{d.h.} \quad (a^{-1})_{\mu\nu} = a_{\nu\mu}.$$

Vierervektoren transformieren sich dann wie

$$x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu$$

mit der Umkehrung

$$x_\nu = a_{\mu\nu} x'_\mu.$$

Wir lesen daraus mittels der Kettenregel ab:

$$\frac{\partial}{\partial x'_\mu} = \frac{\partial x_\nu}{\partial x'_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} = a_{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x_\nu},$$

d.h. $\partial_\mu \doteq \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ ist ein Vierervektor. Skalarprodukte von Vierervektoren b_μ und c_μ ,

$$b \cdot c \doteq b_\mu \cdot c_\mu = \sum_{\mu=1}^4 b_\mu c_\mu = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} - b_0 \cdot c_0,$$

sind invariant unter Lorentztransformationen; denn es gilt

$$b' \cdot c' = a_{\mu\nu} b_\nu a_{\mu\lambda} c_\lambda = \delta_{\nu\lambda} b_\nu c_\lambda = b \cdot c.$$

Tensoren vom Rang 2 haben dieselbe (reell–imaginär)–Struktur wie die Lorentztransformationen und sind durch das Transformationsverhalten

$$t'_{\mu\nu} = a_{\mu\lambda} a_{\nu\kappa} t_{\lambda\kappa}$$

definiert. Die obige Euler–Lagrange–Gleichung hat also die kovariante Form

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} = 0,$$

wobei die Lagrangedichte ein Lorentzskalar sein muß. Die Forderung der Lorentzinvarianz für die Lagrangedichte schränkt die Möglichkeiten für Feldgleichungen stark ein. Wir verdeutlichen uns dies zunächst hier am Beispiel des reellen Skalarfeldes Φ , das sich unter Lorentztransformationen folgendermaßen transformiert:

$$\Phi'(x') \doteq \Phi(x) \quad (= \Phi(a^{-1}x'), \text{ wenn } x' = ax).$$

Aus Gründen der Translationsinvarianz kann \mathcal{L} nur von Φ und von $\partial_\mu \Phi$ abhängen, nicht von x_μ selbst. Wenn die Feldgleichung linear sein soll, gibt es kaum noch Freiheit in der Wahl von \mathcal{L} :

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}(\partial_\mu \Phi \partial_\mu \Phi + \mu^2 \Phi^2).$$

Der Parameter μ hat dabei offenbar die Dimension einer inversen Länge. Die zugehörige Feldgleichung lautet

$$-\partial_\mu \partial_\mu \Phi + \mu^2 \Phi = 0$$

oder mit dem d'Alembertoperator $\square \doteq \partial_\mu \partial_\mu = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$

$$\square \Phi - \mu^2 \Phi = 0.$$

Dies ist die Klein–Gordon–Gleichung (Klein, Gordon, Schrödinger und andere \approx 1925). Um diese Gleichung als quantenmechanische Bewegungsgleichung zu nutzen, betrachten wir sie zusammen mit der relativistischen Energie–Impuls–Beziehung eines Teilchens der Masse m :

$$E^2 = p^2 c^2 + (mc^2)^2.$$

Die aus der Quantenmechanik bekannten Substitutionen $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$ führen auf eine Klein–Gordon–Gleichung mit

$$\mu = mc/\hbar.$$

Dabei ist $1/\mu$ die Comptonwellenlänge eines Teilchens der Masse m . Die Klein–Gordon–Gleichung lautet dann

$$\hbar^2 \square \Phi - m^2 c^2 \Phi = 0.$$

Diese Klein–Gordon–Gleichung ist die korrekte relativistisch invariante Wellengleichung für Teilchen der Masse m mit Spin 0. Angewandt auf π_\pm ($m = 140 \text{ MeV}/c^2$) ergibt sich $1/\mu = 1.41 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$.

An dieser Stelle können wir nun die Überlegung von Yukawa nachvollziehen, nach der ein Skalarfeld eine attraktive Wechselwirkung zwischen Nukleonen vermittelt. Wir nehmen dazu an, dass die Nukleonen eine Ladung G tragen, die das Mesonfeld erzeugt. Mit der Ladungsdichte ρ wird dies durch die Lagrangedichte für die Wechselwirkung

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -\Phi \cdot \rho$$

beschrieben. Die Feldgleichung erhält damit eine Inhomogenität und lautet:

$$\square\Phi - \mu^2\Phi = \rho.$$

Für eine punktförmige Ladungsquelle bei $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ ist $\rho = G\delta(\mathbf{x})$ zu setzen. Wir suchen eine statische Lösung der inhomogenen Klein–Gordon–Gleichung

$$(\Delta - \mu^2)\Phi = G\delta(\mathbf{x}).$$

Mittels Fouriertransformation erhalten wir die Lösung ($\mu > 0$, $r = |\mathbf{x}|$)

$$\Phi(\mathbf{x}) = -\frac{G}{4\pi} \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (\text{Yukawapotential}).$$

Wenn nun ein Nukleon bei \mathbf{x}_1 ein Feld erzeugt, sieht ein zweites Nukleon bei \mathbf{x}_2 das Feld

$$\Phi_1(\mathbf{x}_2) = -\frac{G}{4\pi} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}.$$

Die \mathcal{L}_{int} entsprechende Hamiltondichte ist $\mathcal{H}_{\text{int}} = -\mathcal{L}_{\text{int}} = \Phi\rho$. Trägt das zweite Nukleon dieselbe Ladung G wie das erste, so ist die Wechselwirkungsenergie

$$H_{\text{int}}^{(1,2)} = \int d^3x \Phi_1(\mathbf{x}) G \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) = G \Phi_1(\mathbf{x}_2) = -\frac{G^2}{4\pi} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}.$$

Die Masse m bewirkt die kurze Reichweite dieser Wechselwirkung. Das Vorzeichen ist völlig unabhängig von den obigen Konventionen und kommt alleine vom skalaren Charakter des Feldes Φ . Die analoge Coulombwechselwirkung ist bei gleichen Ladungen bekanntlich abstoßend. Der Unterschied im Vorzeichen der Wechselwirkung rührt daher, dass das vermittelnde Feld in der Elektrodynamik ein Vektorfeld A_μ ist.

Tatsächlich ist die obige Beschreibung keine realistische Beschreibung für den Mesonaustausch. Es stellte sich nämlich heraus, dass das Pion ein pseudoskalares Teilchen ist. Um eine korrekte (skalare) Kopplung dieses Teilchens an ein Nukleon zu beschreiben, muß man den Spin der Nukleonen einbeziehen und sie als Diraceteilchen beschreiben. Wir werden diese Sachverhalte später besser verstehen lernen. Außerdem sollte man die Existenz von 3 Pionen (π^+ , π^0 , π^-) berücksichtigen.

Wir wollen uns jetzt klarmachen, dass das Teilchen–Antiteilchen–Paar (π^+ , π^-) durch ein komplexwertiges Klein–Gordon–Feld beschrieben werden kann. Dazu betrachten wir zwei reelle Klein–Gordon–Felder Φ_1 und Φ_2 mit identischen Massen und bilden daraus die komplexen Felder

$$\Phi = \frac{\Phi_1 + i\Phi_2}{\sqrt{2}}, \quad \Phi^* = \frac{\Phi_1 - i\Phi_2}{\sqrt{2}}.$$

Die Lagrangedichte dieser Felder lautet

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}(\partial_\mu \Phi_1 \partial_\mu \Phi_1 + \mu^2 \Phi_1^2) - \frac{1}{2}(\partial_\mu \Phi_2 \partial_\mu \Phi_2 + \mu^2 \Phi_2^2) = -(\partial_\mu \Phi^* \partial_\mu \Phi + \mu^2 \Phi^* \Phi).$$

Die zugehörigen Feldgleichungen sind

$$\square \Phi_1 - \mu^2 \Phi_1 = 0, \quad \square \Phi_2 - \mu^2 \Phi_2 = 0$$

oder

$$\square \Phi^* - \mu^2 \Phi^* = 0, \quad \square \Phi - \mu^2 \Phi = 0.$$

Letztere kann man als Euler–Lagrange–Gleichungen erhalten, indem man formal Φ und Φ^* als unabhängige Felder auffasst.

Um die elektrischen Ladungen von Φ und Φ^* in Beziehung zu setzen, nehmen wir an, das Φ -Feld habe die Ladung e und koppeln es an das elektromagnetische Feld. Dies geschieht durch die Vorschrift

$$\frac{\hbar}{i} \partial_\mu \rightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \quad (A_\mu = (\mathbf{A}, iA_0))$$

oder

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c} A_\mu.$$

Ist nun $\Phi(x)$ eine Lösung der Feldgleichung $D_\mu D_\mu \Phi - \mu^2 \Phi = 0$, dann ist $\Phi^*(x)$ eine Lösung der Feldgleichung $\tilde{D}_\mu \tilde{D}_\mu \Phi^* - \mu^2 \Phi^* = 0$, wobei $\tilde{D}_\mu = \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu$. Man beachte hierzu, dass die vierte Komponente in ∂_μ rein imaginär ist, so dass

$$\tilde{D}_\mu = \begin{cases} D_\mu^* & (\mu = 1, 2, 3) \\ -D_\mu^* & (\mu = 4). \end{cases}$$

Komplexe Klein–Gordon–Felder stellen also auf natürliche Weise Paare von geladenen skalaren Teilchen und Antiteilchen dar.

Am Beispiel des komplexen Klein–Gordon–Feldes können wir das Prinzip der lokalen Eichinvarianz erläutern. Die Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = -(\partial_\mu \Phi^* \partial_\mu \Phi + \mu^2 \Phi^* \Phi)$$

ist invariant unter der globalen Eichtransformation $\Phi \rightarrow \Phi' = e^{i\chi} \Phi$. Wir zeigen zunächst, dass die globale Eichinvarianz einen globalen Erhaltungssatz – eine Kontinuitätsgleichung – zur Folge hat. Dazu berechnen wir die Wirkung einer infinitesimalen Eichtransformation $\delta\Phi = i\chi\Phi$, $\delta\Phi^* = -i\chi\Phi^*$ auf \mathcal{L} :

$$\begin{aligned} 0 \doteq \delta\mathcal{L} &= \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi} \delta\Phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)} \delta(\partial_\mu\Phi) \right] + \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi^*} \delta\Phi^* + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)} \delta(\partial_\mu\Phi^*) \right] \\ &= \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi} - \partial_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)} \right) \right] \delta\Phi + \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi^*} - \partial_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)} \right) \right] \delta\Phi^* \\ &\quad + \partial_\mu \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)} \delta\Phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)} \delta\Phi^* \right] \quad (\text{Produktregel}) \\ &= -\chi \partial_\mu \left[-i \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)} \Phi - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)} \Phi^* \right) \right] \quad (\text{Euler–Lagrange–Gleichung}). \end{aligned}$$

Die globale Eichinvarianz hat also zur Folge, dass die Viererstromdichte

$$\begin{aligned} j_\mu &\doteq -i\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi)}\Phi - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Phi^*)}\Phi^*\right) \\ &= i(\partial_\mu\Phi^* \cdot \Phi - \Phi^* \cdot \partial_\mu\Phi) \end{aligned}$$

der Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j_\mu = 0$$

genügt.

Mit dem Prinzip der lokalen Eichinvarianz argumentiert man nun, dass jede globale Eichinvarianz lokal sein sollte. Das heißt, \mathcal{L} sollte invariant unter Transformationen

$$\Phi(x) \rightarrow \Phi'(x) = e^{i\chi(x)}\Phi(x)$$

mit beliebigen Skalarfeldern $\chi(x)$ sein. Der Massenterm $\Phi^*\Phi$ hat diese lokale Invarianz, aber der kinetische Term $\partial_\mu\Phi^*\partial_\mu\Phi$ respektiert sie nicht. Man kann die lokale Eichinvarianz dieses Terms jedoch erzwingen durch Einführung eines Eichfeldes A_μ , indem man die Substitution

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu \doteq \partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c}A_\mu \quad \text{bzw.} \quad \partial_\mu \rightarrow \tilde{D}_\mu \doteq \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c}A_\mu$$

durchführt, die den Vierergradienten ∂_μ durch den eichkovarianten Vierergradienten D_μ ersetzt. Wegen der Identitäten

$$e^{i\chi(x)}D_\mu = \left[\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c}(A_\mu + \frac{\hbar c}{e}\partial_\mu\chi)\right]e^{i\chi(x)} \doteq D'_\mu e^{i\chi(x)}$$

und

$$e^{-i\chi(x)}\tilde{D}_\mu = \left[\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c}(A_\mu + \frac{\hbar c}{e}\partial_\mu\chi)\right]e^{-i\chi(x)} \doteq \tilde{D}'_\mu e^{-i\chi(x)}$$

ist

$$\tilde{D}_\mu\Phi^*D_\mu\Phi = \tilde{D}'_\mu\Phi'^*D'_\mu\Phi'$$

eichinvariant, wenn man das Eichfeld simultan der Eichtransformation

$$A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu + \frac{\hbar c}{e}\partial_\mu\chi$$

unterwirft. Dies motiviert die Existenz eines vektoriiellen Eichfeldes (hier des elektromagnetischen Feldes).

Die eichkovariante Lagrangedichte des komplexwertigen Klein–Gordon–Feldes lautet also

$$\mathcal{L} = -(\tilde{D}_\mu\Phi^*D_\mu\Phi + \mu^2\Phi^*\Phi).$$

Daraus folgen die kovarianten Euler–Lagrange–Gleichungen

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Phi^*} - D_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\tilde{D}_\mu\Phi^*)}\right) = 0$$

oder

$$-D_\mu D_\mu\Phi + \mu^2\Phi = 0$$

für das Feld Φ und

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} - \tilde{D}_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (D_\mu \Phi)} \right) = 0$$

oder

$$-\tilde{D}_\mu \tilde{D}_\mu \Phi^* + \mu^2 \Phi^* = 0$$

für das Feld Φ^* . Eine Wiederholung der obigen Herleitung der Kontinuitätsgleichung mit der kovarianten Lagrangedichte führt auf die Stromdichte

$$j_\mu = -i\Phi^* \cdot D_\mu \Phi + i\Phi \cdot \tilde{D}_\mu \Phi^*$$

und die kovariante Kontinuitätsgleichung lautet wie vorher

$$\partial_\mu j_\mu = 0.$$

Zur Vervollständigung der Theorie muß das Eichfeld selbst noch eine eigene Dynamik erhalten, die im Falle der Elektrodynamik wegen der Linearität der Maxwellgleichungen durch eine in A_μ quadratische eichinvariante Lagrangedichte erzeugt wird. Eichinvariant ist der Feldstärketensor

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

(allgemeines Konstruktionsprinzip: $[D_\mu, D_\nu] = \frac{-ie}{\hbar c} F_{\mu\nu}$) und die Lagrangedichte kann als proportional zum Skalar $F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}$ angesetzt werden.

Als zweites Beispiel für ein Teilchen–Antiteilchen–Paar skalarer Mesonen betrachten wir das Paar der seltamen Mesonen (K^0, \bar{K}^0). Diese Mesonen sind zwar nicht elektrisch geladen, unterscheiden sich aber durch eine andere unter der starken Wechselwirkung erhaltene Quantenzahl voneinander, der Strangeness S bzw. der Hyperladung Y . Daher können K^0 und \bar{K}^0 ebenfalls durch ein komplexes Klein–Gordon–Feld Φ beschrieben werden. Die Erhaltung der Hyperladung ist allerdings durch die schwache Wechselwirkung verletzt. Dies bewirkt eine Umwandlung von Φ und Φ^* ineinander (ein Prozess zweiter Ordnung in der schwachen Wechselwirkung), die man phänomenologisch durch Zusatzterme in \mathcal{L} erfassen kann:

$$\mathcal{L} = -\partial_\mu \Phi^* \partial_\mu \Phi - \mu^2 \Phi^* \Phi - \frac{\delta^2}{2} (\Phi \Phi + \Phi^* \Phi^*),$$

die mit dem Parameter δ die schwache Umwandlung der Felder Φ und Φ^* ineinander beschreiben. Hiermit sind Φ und Φ^* keine stationären Zustände der Feldgleichungen mehr, die jetzt

$$\square \Phi - \mu^2 \Phi - \delta^2 \Phi^* = 0 \quad \text{und} \quad \square \Phi^* - \mu^2 \Phi^* - \delta^2 \Phi = 0$$

lauten. Diese Lagrangedichte ist jedoch diagonal, wenn man sie in den reellen Feldern $\Phi_1 = \sqrt{2} \operatorname{Re} \Phi$ und $\Phi_2 = \sqrt{2} \operatorname{Im} \Phi$ schreibt, und man erhält

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} [\partial_\mu \Phi_1 \partial_\mu \Phi_1 + \partial_\mu \Phi_2 \partial_\mu \Phi_2 + (\mu^2 + \delta^2) \Phi_1^2 + (\mu^2 - \delta^2) \Phi_2^2].$$

Stationär (Eigenzustände des Massenoperators) sind jetzt Φ_1 und Φ_2 mit den leicht verschiedenen Massen $m_{1/2} = \frac{\hbar}{c} \sqrt{\mu^2 \pm \delta^2}$ ($\delta^2/\mu^2 \approx 10^{-13}$).

Bemerkung: Das Mesonpaar (K^0, \bar{K}^0) ist dadurch von besonderem Interesse, weil an ihm die CP -Verletzung in der schwachen Wechselwirkung entdeckt wurde. Durch geeignete Phasenwahl kann man Φ und Φ^* so definieren, dass

$$CP \Phi = \Phi^* \quad \text{und} \quad CP \Phi^* = \Phi$$

gilt. Daraus folgt für die Masseneigenzustände

$$CP \Phi_1 = \Phi_1 \quad \text{und} \quad CP \Phi_2 = -\Phi_2.$$

Aufgrund dieser verschiedenen Symmetrie zerfallen Φ_1 und Φ_2 sehr verschieden:

$$\Phi_1 \rightarrow \pi^+ \pi^- \quad (\text{oder } \pi^0 \pi^0) \quad (\tau_{1/2} \approx 10^{-10} s),$$

$$\Phi_2 \rightarrow 3\pi \quad (\tau_{1/2} \approx 5 \cdot 10^{-8} s).$$

Genaueres Studium dieser Zerfälle hat 1964 ergeben, dass Φ_2 in 1% der Fälle in 2π zerfällt. Dies war der Nachweis der CP -Verletzung in der schwachen Wechselwirkung (Nobelpreis für Cronin und Fitch 1980).

4. Das klassische Maxwellfeld

Die inhomogenen Maxwellgleichungen $\nabla \mathbf{E} = 4\pi\rho$ und $\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{E}} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}$ lassen sich mit der Viererstromdichte $j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho)$ und dem antisymmetrischen Feldstärketensor ($F_{\mu\nu} = -F_{\nu\mu}$)

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 & -iE_1 \\ -B_3 & 0 & B_1 & -iE_2 \\ B_2 & -B_1 & 0 & -iE_3 \\ iE_1 & iE_2 & iE_3 & 0 \end{pmatrix}$$

kovariant schreiben als

$$\partial_\mu F_{\mu\nu} = -\frac{4\pi}{c}j_\nu.$$

Wegen der Antisymmetrie von $F_{\mu\nu}$ folgt $\partial_\nu \partial_\mu F_{\mu\nu} = 0$, und damit ist notwendigerweise die Kontinuitätsgleichung für den elektromagnetischen Strom erfüllt:

$$\partial_\nu j_\nu = 0.$$

Die homogenen Maxwellgleichungen $\nabla \mathbf{B} = 0$ und $\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c}\dot{\mathbf{B}} = 0$ haben die Existenz eines Viererpotentials $A_\mu = (\mathbf{A}, i\Phi)$ zur Folge, so dass

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

die homogenen Maxwellgleichungen immer erfüllt. Durch Einsetzen dieses Ausdrucks in die Maxwellgleichungen erhält man $\partial_\mu \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu (\partial_\mu A_\mu) = -\frac{4\pi}{c}j_\nu$ und unter Annahme der Lorentzbedingung $\partial_\mu A_\mu = 0$ die inhomogene Wellengleichung

$$\partial_\mu \partial_\mu A_\nu = -\frac{4\pi}{c}j_\nu.$$

Die inhomogenen Maxwellgleichungen folgen als Euler–Lagrange–Gleichungen aus der Lagrangedichte des elektromagnetischen Feldes

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{16\pi}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} + \frac{1}{c}A_\mu j_\mu,$$

wenn man die Felder A_μ als die fundamentalen Felder betrachtet. Der erste Term mit $F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} = 2(B^2 - E^2)$ ist dabei die Lagrangedichte des elektromagnetischen Feldes und es gilt

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\kappa A_\lambda)} = -\frac{1}{4\pi}F_{\kappa\lambda},$$

der zweite Term erzeugt die Kopplung des Feldes an die Quellen und es gilt

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\kappa} = \frac{1}{c}j_\kappa.$$

Bemerkung: Die Stromdichte für Skalarfelder mit $\mathcal{L}_{\text{kin}} = -\tilde{D}_\mu \Phi^* D_\mu \Phi$ enthält das Viererpotential A_μ explizit, wie wir es auch aus der Schrödingerschen Wellenmechanik

für Elektronen kennen. In solchen Fällen muß der Kopplungsterm in der Lagrangedichte anstelle des Ausdrucks $A_\mu j_\mu$ den Ausdruck

$$\sum_\mu \int_0^{A_\mu} j_\mu da_\mu$$

enthalten. Die richtige Stromdichte für relativistische Elektronen, die das Viererpotential nicht enthält, werden wir später kennenlernen.

Zum Abschluß dieses Abschnitts wollen wir uns noch mit dem Übergang von der Lagrangedichte des Feldes $\mathcal{L}_{\text{em}} = -\frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}$ zur Hamiltondichte befassen, die wir später für die Quantisierung des Strahlungsfeldes brauchen werden. Wir werden dabei die Identitäten $\frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial(\partial_4 A_\mu)} = -\frac{1}{4\pi} F_{4\mu}$, $\partial_4 A_\mu = F_{4\mu} + \partial_\mu A_4$ und $-\frac{1}{4\pi} F_{4\mu} \cdot \partial_\mu A_4 = \frac{1}{4\pi} (A_4 \partial_\mu F_{4\mu} - \partial_\mu (F_{4\mu} A_4))$ benutzen. Laut der üblichen Definition gilt mit den generalisierten Geschwindigkeiten $\partial_4 A_\mu$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{em}} &= \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial(\partial_4 A_\mu)} \partial_4 A_\mu - \mathcal{L}_{\text{em}} = -\frac{1}{4\pi} F_{4\mu} (F_{4\mu} + \partial_\mu A_4) - \mathcal{L}_{\text{em}} \\ &= \frac{1}{4\pi} [E^2 + A_4 \partial_\mu F_{4\mu} - \partial_\mu (F_{4\mu} A_4)] - \mathcal{L}_{\text{em}} \\ &= \frac{1}{8\pi} (E^2 + B^2) + \frac{i}{4\pi} (A_4 \nabla \mathbf{E} - \nabla (\mathbf{E} A_4)). \end{aligned}$$

Der erste Term liefert den uns geläufigen Ausdruck für die Energiedichte des elektromagnetischen Feldes. Den allerletzten Term, den wir durch Anwendung einer Produktregel erzeugt haben, können wir weglassen, weil er eine Divergenz ist und nur einen Oberflächenbeitrag zur Gesamthamiltonfunktion liefern würde. Der vorletzte Term proportional zu $A_4 \nabla \mathbf{E}$ kommt in dem geläufigen Ausdruck für die Feldenergiedichte nicht vor. Wir sollten hier beachten, dass das Feld A_4 kein dynamischer Freiheitsgrad ist, weil seine Geschwindigkeit \dot{A}_4 in \mathcal{L}_{em} nicht vorkommt. Daher verschwindet auch der zugehörige kanonisch konjugierte Impuls $\pi_4 = \partial \mathcal{L}_{\text{em}} / \partial \dot{A}_4$. Beim Übergang zur Hamiltonformulierung sollte man A_4 deshalb nicht als Phasenraumvariable betrachten. (Man beachte auch, dass die Lorentzkovarianz in der Hamiltonformulierung sowieso verletzt ist, weil die Hamiltondichte kein Skalar, sondern eine Komponente des Energie-Impulsdichte-Tensors ist.) Aus demselben Grunde sollte man die zugehörige Maxwellgleichung ($\nu = 4$: $\nabla \mathbf{E} = 4\pi \rho$) nicht als Bewegungsgleichung, sondern als Randbedingung auffassen. In diesem Sinne lautet der obige Zusatzterm

$$\frac{i}{4\pi} A_4 \nabla \mathbf{E} = -\Phi \cdot \rho$$

und verschwindet für freie Felder ($\rho = 0$). Wegen der früher besprochenen Eichfreiheit

$$A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \chi$$

kann man im übrigen, wenn man möchte, A_4 für freie Felder ganz eliminieren.

5. Das klassische Strahlungsfeld

Wir werden die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes kanonisch, d.h. anhand der Hamiltonfunktion durchführen. Gegenüber der alternativen Quantisierung im Lagrangeformalismus hat das den Vorteil größerer Transparenz und Anschaulichkeit, jedoch den Nachteil, dass die Lorentzkovarianz nicht erkennbar ist.

Zunächst machen wir die Freiheitsgrade des Strahlungsfeldes sichtbar, indem wir die Strahlungseichung, auch Coulombeichung genannt, wählen. Man kann immer erreichen, dass das Vektorpotential transversal ist ($\nabla \mathbf{A} = 0$). Dazu führt man die Eichtransformation $\mathbf{A}^{\text{neu}} = \mathbf{A}^{\text{alt}} + \nabla \chi$ mit

$$\chi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{d^3x'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \nabla' \mathbf{A}^{\text{alt}}(\mathbf{x}', t)$$

durch. Aus der Elektrodynamik wissen wir, dass dies die Lösung der poissonartigen Gleichung $\Delta \chi = -\nabla \mathbf{A}^{\text{alt}}$ ist. Daher haben wir mit der Umeichung $\nabla \mathbf{A}^{\text{neu}} = 0$ erreicht.

Mit dieser Eichung erfüllt das Skalarpotential $A_0 = \Phi$ nicht die Wellengleichung, sondern die Poissongleichung

$$\Delta \Phi(\mathbf{x}, t) = -4\pi \rho(\mathbf{x}, t),$$

deren Lösung nicht das retardierte, sondern das instantane Coulombpotential ist:

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \int d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}.$$

Dies ist die Strahlungseichung: Das Vektorpotential besitzt nur einen transversalen Anteil (Zur Erinnerung: Mit der eindeutigen Zerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{A}_{\parallel} + \mathbf{A}_{\perp}$, $\nabla \mathbf{A}_{\perp} = 0$, $\nabla \times \mathbf{A}_{\parallel} = 0$ haben wir $\mathbf{A}_{\parallel} = 0$ erreicht.) und das Skalarpotential ist völlig durch die Freiheitsgrade der Materie festgelegt.

Nun formulieren wir die Hamiltondichte

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{em}} + \mathcal{H}_{\text{int}} + \mathcal{H}_{\text{mat}}, \quad H = \int d^3x \mathcal{H}$$

in der Strahlungseichung. Wir wissen schon aus dem letzten Abschnitt

$$\mathcal{H}_{\text{em}} = \frac{1}{8\pi} (E^2 + B^2) - \rho \Phi$$

und

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -j_{\mu} A_{\mu} / c.$$

Hier werden sich in $\mathcal{H}_{\text{em}} + \mathcal{H}_{\text{int}}$ der $-\rho \Phi$ -Term aus \mathcal{H}_{em} und die vierte Komponente aus \mathcal{H}_{int} wegen $j_{\mu} A_{\mu} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} - c\rho \Phi$ kompensieren! Während sich das magnetische Feld alleine durch \mathbf{A}_{\perp} ausdrücken lässt: $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}_{\perp}$, besitzt das elektrische Feld $\mathbf{E} = -\nabla \Phi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_{\perp}$ auch longitudinale Anteile. Wegen der Eindeutigkeit der Zerlegung $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\parallel} + \mathbf{E}_{\perp}$ ist jedoch offensichtlich

$$\mathbf{E}_{\parallel} = -\nabla \Phi \quad \text{und} \quad \mathbf{E}_{\perp} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_{\perp}.$$

Zur Berechnung der Feldenergie $\int d^3x E^2$ beachten wir

$$\int d^3x \mathbf{E}_{\parallel} \cdot \mathbf{E}_{\perp} = \int d^3x \nabla \Phi \cdot \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_{\perp} = \frac{1}{c} \int d^3x [\nabla(\Phi \dot{\mathbf{A}}_{\perp}) - \Phi \nabla \dot{\mathbf{A}}_{\perp}] = 0$$

und

$$\int d^3x \mathbf{E}_{\parallel}^2 = \int d^3x \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi = \int d^3x [\nabla(\Phi \nabla \Phi) - \Phi \Delta \Phi] = 4\pi \int d^3x \Phi \rho.$$

Daher erhalten wir nunmehr

$$\begin{aligned} H_{\text{em}} + H_{\text{int}} &= \frac{1}{8\pi} \int d^3x (B^2 + E_{\perp}^2) + \int d^3x \left(\frac{1}{2} \rho \Phi - \frac{1}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}_{\perp} \right) \\ &= \frac{1}{8\pi} \int d^3x [(\nabla \times \mathbf{A}_{\perp})^2 + (\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_{\perp})^2] - \frac{1}{c} \int d^3x \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}_{\perp} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \end{aligned}$$

Hier identifizieren wir den ersten Term als die Hamiltonfunktion des Strahlungsfeldes

$$H_{\text{str}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3x [(\nabla \mathbf{A}_{\perp})^2 + (\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_{\perp})^2].$$

Der zweite Term

$$H_{\text{ww}} = -\frac{1}{c} \int d^3x (\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}_{\perp})$$

beschreibt die Kopplung des Strahlungsfeldes an die elektrischen Ströme in der Materie. Der dritte Term stellt nach der oben hervorgehobenen Kompensation von $\rho\Phi$ -Termen die Nettowechselwirkungsenergie der elektrischen Ladungsdichten dar. An der Positivität erkennen wir, dass sich hier gleichnamige Ladungen, deren Wechselwirkung durch ein Vektorfeld vermittelt wird, abstoßen (siehe die Diskussion der Yukawawechselwirkung in Abschnitt 3). Wir betonen noch einmal, dass in der Strahlungseichung sowohl der longitudinale Anteil des Vektorpotentials wie auch das Skalarpotential vollständig aus der Beschreibung eliminiert worden sind.

Wenn wir jetzt noch als H_{mat} die kinetische Energie nichtrelativistischer Teilchen mit Massen m_j und Ladungen e_j hinzufügen, erhalten wir die Hamiltonfunktion, die erstmals von E. Fermi 1930 in dieser Eichung geschrieben wurde:

$$\begin{aligned} H &= \sum_j \frac{p_j^2}{2m_j} + H_{\text{ww}} + H_{\text{str}} + \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= \sum_j \frac{1}{2m_j} \left(\mathbf{p}_j - \frac{e_j}{c} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_j, t) \right)^2 + H_{\text{str}} + \sum_{i < j} \frac{e_i \cdot e_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (+\text{Selbstenergie}). \end{aligned}$$

(Hier kommt die im letzten Abschnitt für den Fall vektorpotentialabhängiger Stromdichten gemachte Bemerkung über die Lagrangedichte der Wechselwirkung zum Tragen.)

Im Jahre 1900 erkannten Physiker wie Rayleigh und Jeans, dass das freie Strahlungsfeld einer Schar von unabhängigen Oszillatoren ähnelt. Wegen $\nabla \mathbf{A}_{\perp} = 0$ und $\Phi = 0$ für $\rho = 0$ gilt für freie Felder in der Strahlungseichung auch die Lorenzkonvention

$\partial_\mu A_\mu = 0$ und daher erfüllt \mathbf{A}_\perp die homogene Wellengleichung $\square \mathbf{A}_\perp = 0$. Wir wollen die Lösungen dieser Wellengleichung durch den Separationsansatz

$$\mathbf{A}_j(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_j(\mathbf{x})q_j(t) \quad (\nabla \mathbf{u}_j = 0)$$

suchen. Wegen $\Delta \mathbf{u} - \frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{q}} \mathbf{u} = 0$ führt dieser Ansatz auf die gewöhnliche Differentialgleichung (Schwingungsgleichung)

$$\ddot{q}_j = -\omega_j^2 q_j$$

für die Zeitentwicklung und die partielle Differentialgleichung

$$\Delta \mathbf{u}_j + \frac{\omega_j^2}{c^2} \mathbf{u}_j = 0$$

für die Eigenmoden. In einem Volumen V seien die transversalen Eigenmoden, die zu verschiedenen Frequenzen ω_j wegen der Hermitizität des Operators Δ orthogonal aufeinander sind, orthonormiert:

$$\int_V d^3x \mathbf{u}_j(\mathbf{x}) \mathbf{u}_l(\mathbf{x}) = \delta_{j,l} \quad (u_j = 0 \text{ auf dem Rand von } V).$$

Die allgemeine Lösung der Wellengleichung lautet damit

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_j \mathbf{u}_j(\mathbf{x}) q_j(t).$$

Zur Berechnung der Hamiltonfunktion dieses Strahlungsfeldes brauchen wir die folgenden Identitäten:

Mit $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_l) = -\Delta \mathbf{u}_l = \frac{\omega_l^2}{c^2} \mathbf{u}_l$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \int d^3x (\nabla \times \mathbf{A}_j)(\nabla \times \mathbf{A}_l) &= q_j q_l \int d^3x (\nabla \times \mathbf{u}_j)(\nabla \times \mathbf{u}_l) \\ &= q_j q_l \int d^3x [\nabla(\mathbf{u}_j \times (\nabla \times \mathbf{u}_l)) + \mathbf{u}_j(\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_l))] \\ &= \frac{\omega_l^2}{c^2} q_l^2 \delta_{j,l} \end{aligned}$$

und

$$\int d^3x \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_j \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}_l = \frac{1}{c^2} \dot{q}_l^2 \delta_{j,l}.$$

Insgesamt wird die Hamiltonfunktion für das Strahlungsfeld damit

$$H_{\text{str}} = \frac{1}{8\pi c^2} \sum_l (\dot{q}_l^2 + \omega_l^2 q_l^2).$$

Wir erkennen, dass die Summanden wegen der Bewegungsgleichung für die q_l zeitunabhängig sind. Zu kanonischen Variablen gelangen wir jetzt durch die einfache Umskalierung $Q_l \doteq q_l / \sqrt{4\pi} c$, $P_l \doteq \dot{q}_l / \sqrt{4\pi} c$. Damit haben wir schließlich

$$H_{\text{str}} = \frac{1}{2} \sum_l (P_l^2 + \omega_l^2 Q_l^2)$$

und die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{P}_l = -\frac{\partial H_{\text{str}}}{\partial Q_l} = -\omega_l^2 Q_l, \quad \dot{Q}_l = \frac{\partial H_{\text{str}}}{\partial P_l} = P_l$$

sind äquivalent zu $\ddot{q}_l + \omega_l^2 q_l = 0$.

6. Quantisierung des Strahlungsfeldes

Wenn man die Oszillatoren des letzten Abschnitts im thermischen Gleichgewicht betrachtet und jedem von ihnen eine mittlere Energie $k_B T$ nach dem Gleichverteilungs- und Virialsatz gibt, erhält man das Rayleigh–Jeanssche Strahlungsgesetz, nach dem die spektrale Verteilung der Energie $\propto \omega^2 k_B T$ ist. (Der Faktor ω^2 kommt dabei von der Zustandsdichte: die Zahl der Eigenmoden mit Frequenz ω ist in einem dreidimensionalen System proportional zu ω^2 .) Für kleine Frequenzen entspricht dies der beobachteten Verteilung in der Hohlraumstrahlung, für große Frequenzen jedoch nicht. Diese eklatante Diskrepanz nahm Max Planck 1901 zum Anlaß vorzuschlagen, dass die Oszillatoren so quantisiert seien, dass die möglichen Energien Vielfache von $\hbar\omega$ sind (mit der neuen Naturkonstante \hbar). In der statistischen Physik lernt man, dass die spektrale Verteilung dann die Form

$$u(\omega) \propto \frac{\hbar\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

hat (Plancksches Strahlungsgesetz) in perfekter Übereinstimmung mit der Beobachtung. Im Jahre 1905 benutzte Albert Einstein dann diese Lichtquanten zur Erklärung des photoelektrischen Effekts.

Für uns ist heute die kanonische Quantisierung der harmonischen Oszillatoren ein Kinderspiel, wie auch schon für Paul Dirac, der sie 1927 kurz nach der Entwicklung der Quantenmechanik erstmals formulierte: Die Variablen Q_l, P_l werden zu Operatoren mit den kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[Q_j, P_l] = i\hbar\delta_{j,l}.$$

Es ist dann nützlich, Auf- und Absteigeoperatoren

$$\begin{aligned} a_l &= (\omega_l Q_l + iP_l)/\sqrt{2\hbar\omega_l} \\ a_l^\dagger &= (\omega_l Q_l - iP_l)/\sqrt{2\hbar\omega_l} \end{aligned}$$

mit den kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[a_j, a_l^\dagger] = \delta_{j,l}$$

einzuführen, die hier die Bedeutung von Photonenvernichtern bzw. -erzeugern bekommen werden und mit denen sich der Hamiltonoperator in der Form

$$H_{\text{str}} = \sum_l \hbar\omega_l (a_l^\dagger a_l + 1/2)$$

schreibt.

Der Hilbertraum des quantisierten Strahlungsfeldes lässt sich auf dem durch die Bedingungen $a_l|0\rangle = 0$ ausgezeichneten Vakuumzustand $|0\rangle$ aufbauen. Eine Basis von Zuständen kann durch die Angabe von Besetzungszahlen $\{n_l\}$ ($n_l = 0, 1, 2, \dots$) gekennzeichnet werden:

$$|\{n_l\}\rangle = \prod_l \frac{(a_l^\dagger)^{n_l}}{\sqrt{n_l!}} |0\rangle.$$

Mit der Umkehrung $Q_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l}}(a_l + a_l^\dagger)$ und $q_l = \sqrt{4\pi} c Q_l$ erhalten wir jetzt für den Operator des transversalen Vektorpotentials (im Heisenbergbild)

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{x}, t) = \sum_l \mathbf{u}_l(\mathbf{x}) \sqrt{4\pi} c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l}} [a_l e^{-i\omega_l t} + a_l^\dagger e^{i\omega_l t}].$$

Falls spezifische geometrische Einschränkungen keine Rolle spielen, wählt man einen Kasten als Quantisierungsvolumen und erhält als Eigenbasis gewöhnliche Impulseigenzustände ($l \rightarrow \mathbf{k}\alpha$ ($\alpha = 1, 2$))

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}.$$

Dabei garantiert ein Rechtsdreibein $\boldsymbol{\epsilon}_1, \boldsymbol{\epsilon}_2, \mathbf{k}$ mit den normierten Polarisationsvektoren $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}$ die Transversalität und es gilt $\omega_{\mathbf{k}\alpha} = c|\mathbf{k}| \doteq \omega_{\mathbf{k}}$. Da die Eigenmoden jetzt komplexwertig sind und wir auch komplexwertige Polarisationsvektoren zulassen wollen (siehe in Kürze die Diskussion des Eigendrehimpulses der Photonen), muß man in sinnvoller Verallgemeinerung der obigen Formel

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{4\pi} c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} [\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}\alpha} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* a_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)}]$$

schreiben. Daraus ergeben sich für die Operatoren der Feldstärken die Formeln

$$\hat{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{x}, t) \doteq -\frac{1}{c} \dot{\hat{\mathbf{A}}} = \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}} [\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}\alpha} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* a_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)}]$$

und

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, t) \doteq \nabla \times \hat{\mathbf{A}} = \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \frac{\mathbf{k}}{k} \times [\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}\alpha} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)} - \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* a_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)}].$$

Für den Impuls des Strahlungsfeldes erhält man nach kurzer Rechnung, wobei Terme proportional zu $a_{\mathbf{k}\alpha} a_{-\mathbf{k}\alpha}$ und $a_{-\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}\alpha}$ einander aufheben und wegen $\sum_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{k}/2 = 0$ kein konstanter Beitrag auftritt,

$$\hat{\mathbf{P}} \doteq \frac{1}{4\pi c} \int d^3x (\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{B}) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar \mathbf{k} a_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger a_{\mathbf{k}\alpha}.$$

Der Drehimpuls des Strahlungsfeldes kann in einen Bahn- und einen Spinanteil zerlegt werden. Mit der Identität (siehe Anhang A)

$$\mathbf{x} \times (\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{B}) = \sum_{m=1}^3 E_{\perp m} (\mathbf{x} \times \nabla) A_{\perp m} + (\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{A}_{\perp}) - \sum_{m=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_m} [E_{\perp m} (\mathbf{x} \times \mathbf{A}_{\perp})]$$

erhält man

$$\hat{\mathbf{J}} \doteq \frac{1}{4\pi c} \int d^3x (\mathbf{x} \times (\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{B})) = \mathbf{J}_o + \mathbf{J}_s$$

mit

$$\mathbf{J}_o = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x \sum_{m=1}^3 E_{\perp m} (\mathbf{x} \times \nabla) A_{\perp m}$$

und

$$\mathbf{J}_s = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x (\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{A}_{\perp}).$$

Die oben mittels reeller $\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}$ eingeführten Basiszustände sind offenbar keine Eigenzustände zu \mathbf{J}_s , weil sie unter Rotationen miteinander vermischt werden. Sie beschreiben linear polarisierte Photonen. Wir können Zustände konstruieren, die bei Rotationen um die \mathbf{k} -Richtung Eigenzustände sind:

$$\epsilon^{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (\epsilon_1 \pm i\epsilon_2).$$

Man macht sich leicht klar, dass bei einer Rotation um den Winkel ϕ um die \mathbf{k} -Achse tatsächlich

$$R_{\mathbf{k}}(\phi)\epsilon^{\pm} = e^{\mp i\phi}\epsilon^{\pm}$$

gilt und damit konsistent der plausible Ausdruck für den Spindrehimpuls

$$\hat{\mathbf{J}}_s = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \frac{\mathbf{k}}{k} [a_{\mathbf{k}+}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+} - a_{\mathbf{k}-}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-}]$$

folgt, wobei

$$a_{\mathbf{k}\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{\mathbf{k}1} \pm ia_{\mathbf{k}2})$$

die Vernichter für die \pm -Photonen sind. Der Eigendrehimpuls der Photonen hat nur nichtverschwindende Komponenten in Richtung \mathbf{k} mit den beiden möglichen Eigenwerten $\pm\hbar$. Die Eigenmoden \pm entsprechen zirkular polarisierten Photonen. Der Spin des Photons ist daher gleich \hbar . Im Unterschied zu einem gewöhnlichen Teilchen mit Spin 1 ist der Zustandsraum nicht drei-, sondern nur zweidimensional und wird von den beiden Zuständen mit $J_s^z = \pm\hbar$ aufgespannt. Wegen der Transversalität fehlt der Zustand mit $J_s^z = 0$. Dass dies möglich ist, ist wiederum eng mit dem Verschwinden der Ruhemasse des Photons verknüpft. Bei einem Teilchen mit positiver Ruhemasse kann man in das Ruhesystem des Teilchens gehen und dann den Spin in jede beliebige Richtung drehen.

Nebenbemerkung: Nach der Einführung der Erzeuger und Vernichter a_l^{\dagger} und a_l für Photonen als Bosonen stellt sich die Frage, ob es möglich ist, ähnliche Operatoren zu finden, die Fermionen erzeugen und vernichten unter Beachtung des Pauliprinzipis. Jordan und Wigner zeigten 1928, wie das gelingt, indem sie anstelle der Vertauschungsrelationen $[a_j, a_l^{\dagger}] = \delta_{j,l}$ die Antikommutatorrelationen

$$\{b_j, b_l^{\dagger}\} \doteq b_j b_l^{\dagger} + b_l^{\dagger} b_j = \delta_{j,l} \quad \{b_j, b_l\} = \{b_j^{\dagger}, b_l^{\dagger}\} = 0$$

setzten. Wegen $b_l^{\dagger 2} = 0$ implizieren diese das Pauliverbot und wegen $b_j^{\dagger} b_l^{\dagger} = -b_l^{\dagger} b_j^{\dagger}$ die Antisymmetrie der Zustände unter Teilchenpermutation. Diese Operatoren werden für die zweite Quantisierung der Fermionfelder benutzt.

Die Operatoren der Felder \mathbf{A} , \mathbf{E} und \mathbf{B} sind linear in den Erzeugern und Vernichtern, verändern die Zahl der Photonen also um ± 1 . Daher ist der Erwartungswert der Felder in Zuständen mit bestimmter Photonenzahl immer gleich 0:

$$\langle \{n_{\mathbf{k}\alpha}\} | \mathbf{E} | \{n_{\mathbf{k}\alpha}\} \rangle = \langle \{n_{\mathbf{k}\alpha}\} | \mathbf{B} | \{n_{\mathbf{k}\alpha}\} \rangle = 0.$$

Dies bedeutet nicht, dass das Feld verschwindet, es schwankt nämlich beträchtlich. Selbst für das Vakuum finden wir

$$\langle 0 | |\mathbf{E}_\perp(\mathbf{x}, t)|^2 | 0 \rangle = \langle 0 | |\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)|^2 | 0 \rangle = \frac{2\pi\hbar}{V} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \omega_{\mathbf{k}} = \infty.$$

Die unendliche Unschärfe kommt von den kurzwelligen Fluktuationen des Feldes ($k \rightarrow \infty$). Wenn man diese durch Mittelung beseitigt, erhält man eine endliche Unschärfe. Wir definieren eine entsprechend über eine Lineardimension l gemittelte elektrische Feldstärke als

$$\bar{\mathbf{E}} \doteq \int d^3x \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}/l) \quad \text{mit} \quad \int d^3s \rho(\mathbf{s}) = 1.$$

Dann ist mit der Fouriertransformierten $\tilde{\rho}(\mathbf{k})$ von $\rho(\mathbf{x})$

$$\langle 0 | |\bar{\mathbf{E}}|^2 | 0 \rangle \propto \frac{\hbar}{V} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} |\tilde{\rho}(\mathbf{k}l)|^2 \propto \hbar c \int d^3k k |\tilde{\rho}(\mathbf{k}l)|^2 \propto \frac{\hbar c}{l^4} \int d^3q q |\tilde{\rho}(\mathbf{q})|^2.$$

Die obigen Ergebnisse können durch eine Unschärferelation verständlich gemacht werden. Dazu stellt man die Feldoperatoren durch Betrag und Phase dar:

$$a_{\mathbf{k}\alpha} = e^{i\hat{\phi}_{\mathbf{k}\alpha}} \sqrt{\hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}}, \quad a_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger = \sqrt{\hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}} e^{-i\hat{\phi}_{\mathbf{k}\alpha}},$$

wobei $\hat{n}_{\mathbf{k}\alpha} = a_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger a_{\mathbf{k}\alpha}$ und $\hat{\phi}_{\mathbf{k}\alpha}$ hermitesche Operatoren sind. Die kanonische Vertauschungsrelation $[a, a^\dagger] = 1$ lautet damit $e^{i\phi} n e^{-i\phi} - n = 1$ oder

$$[n, e^{-i\phi}] = e^{-i\phi}.$$

Dies ist erfüllt, wenn

$$[n, \phi] = i.$$

Daraus folgt bekanntlich die Unschärferelation

$$\Delta n \cdot \Delta \phi \geq 1$$

für die Besetzungszahl einer Photonmode und die Phase, mit der diese Mode zum Feld beiträgt.

Wie sehen Eigenzustände der Feldoperatoren aus? Wir nehmen der Einfachheit halber hier an, wir hätten reelle Modenfunktionen $u_l(\mathbf{x})$ gewählt. Dieser Fall genügt, um das Prinzip der Beantwortung der obigen Frage zu verstehen. Wegen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{E}}_\perp(\mathbf{x}, 0) &= i \sum_l \sqrt{2\pi\hbar\omega_l} \mathbf{u}_l(\mathbf{x}) (a_l - a_l^\dagger) \\ \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, 0) &= c \sum_l \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_l}} (\nabla \times \mathbf{u}_l(\mathbf{x})) (a_l + a_l^\dagger) \end{aligned}$$

muß man dazu Eigenzustände der Operatoren $i(a_l - a_l^\dagger)$ bzw. $(a_l + a_l^\dagger)$ finden. Da man dies für jede Mode unabhängig tun kann, lassen wir im folgenden den Index l weg.

Es ist geschickt, zunächst den Eigenzustand $i(a - a^\dagger)|0\rangle_E = 0$ zum Eigenwert 0 zu suchen. Mit dem Ansatz $|0\rangle_E = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a^{\dagger n} |\text{vak}\rangle$ findet man $c_{2m} = c_0/2^m m!$, $c_{2m-1} = 0$, d.h. $|0\rangle_E = e^{a^{\dagger 2}/2} |\text{vak}\rangle$. Die Verallgemeinerung auf einen beliebigen reellen Eigenwert α des Operators $i(a - a^\dagger)$ gelingt dann mit folgenden Operatorbeziehungen, die sofort aus den kanonischen Vertauschungsrelationen folgen: Aus $e^{i\alpha a^\dagger} a e^{-i\alpha a^\dagger} = a - i\alpha$ folgt $[i(a - a^\dagger), e^{-i\alpha a^\dagger}] = \alpha e^{-i\alpha a^\dagger}$ oder $i(a - a^\dagger)|\alpha\rangle_E = \alpha|\alpha\rangle_E$ mit dem Eigenzustand

$$|\alpha\rangle_E = e^{\frac{a^{\dagger 2}}{2} - i\alpha a^\dagger} |\text{vak}\rangle.$$

Analog folgt für die Eigenzustände des Magnetfeldes \mathbf{B} , $(a + a^\dagger)|\alpha\rangle_B = \alpha|\alpha\rangle_B$:

$$|\alpha\rangle_B = e^{\frac{-a^{\dagger 2}}{2} + \alpha a^\dagger} |\text{vak}\rangle.$$

Bemerkung: Der Eigenzustand des Magnetfeldes kann aus dem des elektrischen Feldes mittels einer (kanonischen) Eichtransformation gewonnen werden. Bei der Ersetzung $a \rightarrow -ia$ und $a^\dagger \rightarrow ia^\dagger$, die die Vertauschungsrelationen nicht berührt, geht $i(a - a^\dagger)$ in $(a + a^\dagger)$ über und der Eigenzustand $|\alpha\rangle_E$ in den Eigenzustand $|\alpha\rangle_B$.

Alle diese Eigenzustände sind nicht normierbar; für kontinuierliche Spektren ist das zu erwarten (siehe dazu Anhang B). Die Photonenzahl hat in diesen Zuständen eine unendliche, die Phase eine verschwindende Unschärfe. Man nennt diese Zustände kohärente Zustände. Man erkennt auch, dass \mathbf{E} - und \mathbf{B} -Felder nicht miteinander vertauschen. Es gibt daher keine Zustände, die (überall) simultane Eigenzustände von \mathbf{E} und \mathbf{B} sind.

Unter welcher Voraussetzung spielen Quanteneffekte bei der Beschreibung elektromagnetischer Felder keine Rolle? In irgendeinem Sinne muß die Photonenzahl $\gg 1$ sein, damit der Kommutator $[a, a^\dagger] = 1$ gegen $a^\dagger a$ bzw. aa^\dagger vernachlässigt werden kann. Wir denken an das Beispiel einer Funkübertragung. Wenn eine Antenne die Linear-dimension l hat, kann sie Quantenfluktuationen des Feldes von höchstens $|\Delta \mathbf{E}|^2 \approx \hbar c/l^4$ wahrnehmen. Diese Unschärfe ist mit dem mittleren Feldquadrat zu vergleichen. Das mittlere Feldquadrat können wir aus der Energiedichte $E^2 \propto \bar{n} \cdot \hbar \omega \propto \bar{n} \hbar c/\lambda$ (\bar{n} = Photonendichte, λ = Wellenlänge) abschätzen. Die klassische Beschreibung gilt sicher, solange die Fluktuationen schwach gegen das mittlere Feld sind:

$$\bar{n} l^4 / \lambda \gg 1.$$

Speziell für $l \approx \lambda$ bedeutet das $\bar{n} \lambda^3 \gg 1$. Ein UKW-Sender, der bei $\lambda \approx 50$ cm mit 100 kW Leistung sendet, hat in 10 km Entfernung $\bar{n} \lambda^3 \approx 10^{17}$.

7. Emission und Absorption von Photonen durch Atome

Wir haben jetzt die Voraussetzungen für eine Beschreibung von atomaren Emissions- und Absorptionsprozessen geschaffen. Die Elektronen des Atoms können dabei, wie im Abschnitt 5 formuliert, nichtrelativistisch durch einen atomaren Hamiltonoperator H_{atom} beschrieben werden. Das Strahlungsfeld wird durch den im Abschnitt 6 eingeführten Hamiltonoperator H_{str} repräsentiert. Damit lautet der ungestörte Hamiltonoperator

$$H_0 = H_{\text{atom}} + H_{\text{str}}.$$

Die Kopplung zwischen dem Strahlungsfeld und den Elektronen lautet im Wechselwirkungsbild

$$H_{\text{ww}}(t) = \sum_{n=1}^N \left[-\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{x}_n, t) \cdot \mathbf{p}_n(t) + \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{x}_n, t) \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{x}_n, t) - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}_n(t) \cdot (\nabla \times \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{x}_n, t)) \right].$$

Hier haben wir schon ausgenutzt, dass wegen der Transversalität des Vektorpotentials $\mathbf{p}_n \cdot \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{x}_n, t) = \hat{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{x}_n, t) \cdot \mathbf{p}_n$ gilt. Wir haben (als relativistische Korrektur) die Zeeman-Wechselwirkung des Magnetfeldes mit dem magnetischen Moment der Elektronen eingeschlossen.

Zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit zwischen verschiedenen Zuständen eines Atoms brauchen wir die “goldene Regel” von Fermi aus der zeitabhängigen quantenmechanischen Störungsrechnung. Sie liefert für die Übergangsrate r (Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit) von einem Anfangszustand i in einen Endzustand f die Formel

$$r_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{\text{ww}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i).$$

Die Anfangs- und Endzustände werden durch den Zustand des Atoms (A, B) und die Photonenzahlen $\{n_{\mathbf{k}\alpha}\}$ charakterisiert.

Wir betrachten zunächst die Absorption eines Photons $\mathbf{k}\alpha$. Dabei ist der Anfangszustand durch $|i\rangle = |A; n_{\mathbf{k}\alpha}\rangle$ und der Endzustand durch $|f\rangle = |B; n_{\mathbf{k}\alpha} - 1\rangle$ gegeben. (Die Zahlen der anderen Photonennmoden ändern sich bei diesem Prozess nicht und werden hier nicht explizit genannt.) Das Übergangsmatrixelement ergibt sich zu (nur der orbitale Term wird hier zunächst betrachtet, zum Spinterm kommen wir später)

$$\langle B; n_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | H_{\text{ww}} | A; n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \langle n_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | a_{\mathbf{k}\alpha} | n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle \langle B | \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \cdot \mathbf{p}_n | A \rangle.$$

Das Photonmatrixelement wertet sich leicht zu $\langle n_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | a_{\mathbf{k}\alpha} | n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\alpha}}$ aus. Es bietet sich an, ein “quasiklassisches” Absorptionspotential

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}^{(\text{abs})}(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar n_{\mathbf{k}\alpha}}{V\omega_{\mathbf{k}}}} c \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$$

zu definieren. Mit ihm schreibt sich nämlich das obige Matrixelement in Analogie zum klassischen Ausdruck als

$$\langle B; n_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | H_{\text{ww}} | A; n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = -\frac{e}{mc} \langle B | \sum_n \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}^{(\text{abs})}(\mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{p}_n | A \rangle.$$

Im Falle der Emission eines Photons $\mathbf{k}\alpha$ setzen wir den Anfangszustand wie oben als $|i\rangle = |A; n_{\mathbf{k}\alpha}\rangle$ an und den Endzustand als $|f\rangle = |B; n_{\mathbf{k}\alpha} + 1\rangle$. Eine analoge Rechnung wie oben ergibt ein quasiklassisches Emissionspotential

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}^{(\text{emi})}(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar(n_{\mathbf{k}\alpha} + 1)}{V\omega_{\mathbf{k}}}} c \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}},$$

mit dem sich das Matrixelement für die Emission als

$$\langle B; n_{\mathbf{k}\alpha} + 1 | H_{\text{ww}} | A; n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = -\frac{e}{mc} \langle B | \sum_n \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}^{(\text{emi})}(\mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{p}_n | A \rangle$$

schreibt.

Die Energieerhaltungsbedingung, die in der goldenen Regel durch die Deltafunktion ausgedrückt ist, lautet für die Absorption $E_B = E_A + \hbar\omega_{\mathbf{k}}$ und für die Emission $E_B = E_A - \hbar\omega_{\mathbf{k}}$.

Aufgrund der obigen Matrixelemente wird die Absorptionsrate proportional zu $n_{\mathbf{k}\alpha}$ und damit zur Intensität der Strahlung, ein Ergebnis, das ganz der klassischen Erwartung entspricht. Die Emissionsrate ist jedoch proportional zu $n_{\mathbf{k}\alpha} + 1$. Emission findet daher auch ohne Anwesenheit von Photonen statt. Dies bezeichnet man als spontane Emission, im Gegensatz zur stimulierten Emission, die wiederum proportional zur Strahlungsintensität $n_{\mathbf{k}\alpha}$ ist und auch klassisch erwartet würde. Die spontane Emission würde man dagegen klassisch nicht erwartet haben, weil der photonfreie Zustand klassisch ein feldfreier Zustand ist. Die spontane Emission erklärt, warum isolierte angeregte Atome unter Emission von Photonen in tiefere Zustände übergehen.

Wir wollen jetzt die spontane Emission eines Atoms genauer betrachten. Sie führt zu einer endlichen Lebensdauer τ angeregter atomarer Zustände. Dabei kann das angeregte Atom alle Photonen $\mathbf{k}\alpha$ mit $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = E_A - E_B$ emittieren. Daher ist die Übergangsrate $\gamma_{A \rightarrow B} = 1/\tau_{A \rightarrow B}$ durch die folgende Formel gegeben:

$$\gamma_{A \rightarrow B} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 |\langle B | \sum_n \mathbf{A}_{(n_{\mathbf{k}\alpha}=0)}^{(\text{emi})}(\mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{p}_n | A \rangle|^2 \delta(E_B - E_A + \hbar\omega_{\mathbf{k}}).$$

Indem wir die Summe $\sum_{\mathbf{k}}$ durch das Integral $\frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$ ersetzen und das Emissionspotential einsetzen, erhalten wir (das Normierungsvolumen V kürzt sich jetzt heraus und wir definieren $\omega \doteq (E_A - E_B)/\hbar$)

$$\gamma_{A \rightarrow B} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \int d^3k \sum_{\alpha} |\langle B | \sum_n e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* \cdot \mathbf{p}_n | A \rangle|^2 \delta(\hbar\omega_{\mathbf{k}} - \hbar\omega)/\omega.$$

Nun ist für einen typischen atomaren Übergang die Wellenlänge der emittierten Strahlung viel größer als der Atomradius, $\lambda_{\text{photon}} \gg r_{\text{atom}}$. Man macht sich leicht klar, dass $r_{\text{atom}}/\lambda_{\text{photon}} = O(\alpha)$, wo $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ die Feinstrukturkonstante ist. Daher gilt für das Argument der Exponentialfunktion im obigen Matrixelement $|\mathbf{k}\mathbf{x}_n| = O(\alpha) \ll 1$. Die Entwicklung der ebenen Welle $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} = 1 - i\mathbf{k}\mathbf{x}_n - (\mathbf{k}\mathbf{x}_n)^2/2 + \dots$ in der Übergangsrate führt auf eine Multipolentwicklung der emittierten Strahlung und der führende Term 1 ergibt die elektrische Dipolstrahlung.

An dieser Stelle erinnern wir uns daran, dass wir den Zeeman-Term in H_{ww} bisher nicht betrachtet haben. Tatsächlich ist dieser Term wegen $\nabla \times \mathbf{A}_{\perp} = -i\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\perp}$ um den Faktor $|\mathbf{k}\mathbf{x}_n|$ kleiner als der $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ -Term (wegen $\mathbf{A}_{\perp} \cdot \nabla_{\mathbf{x}_n} = \mathbf{A}_{\perp} \cdot \mathbf{x}_n/x_n^2$) und trägt zur magnetischen Dipolstrahlung bei, die folglich um einen Faktor $(r_{\text{Atom}}/\lambda_{\text{Photon}})^2 = O(\alpha^2)$ schwächer als die elektrische Dipolstrahlung ist.

Zur weiteren Auswertung des atomaren Matrixelementes $\langle B|\mathbf{p}_n|A\rangle$ für die elektrische Dipolstrahlung beachtet man die Identität

$$\sum_n \mathbf{p}_n = \frac{im}{\hbar} [H_{\text{atom}}, \sum_n \mathbf{x}_n],$$

die für $H_{\text{atom}} = T + V_{\text{Coulomb}}$ gilt. Daraus folgt

$$\langle B|\sum_n \mathbf{p}_n|A\rangle = \frac{im}{\hbar} \langle B|[H_{\text{atom}}, \sum_n \mathbf{x}_n]|A\rangle = -im\omega \mathbf{x}_{BA}$$

mit dem Dipolmatrixelement

$$\mathbf{x}_{BA} \doteq \langle B|\sum_n \mathbf{x}_n|A\rangle.$$

Man macht sich nun leicht klar, dass dieses Ergebnis einer Ersetzung folgender Art im Matrixelement entspricht:

$$-\frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \rightarrow \frac{e}{c} \mathbf{x} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -e\mathbf{x} \cdot \mathbf{E}.$$

Wir kehren jetzt zu der Auswertung der Übergangsrates zurück. Nach Mittelung über die beiden Polarisationsrichtungen kann man die k -Integration in Kugelkoordinaten mittels der δ -Funktion beseitigen und erhält schließlich

$$\gamma_{A \rightarrow B} = \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{\omega^3}{c^2} |\mathbf{x}_{AB}|^2.$$

Die Größenordnung dieser Rate kann man leicht abschätzen, indem man $|\mathbf{x}_{AB}| \approx a_0$ (Bohrscher Radius), $\text{Ry} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \frac{e^2}{2a_0}$ und $\hbar\omega \approx \text{Ry} = mc^2 \cdot \alpha^2/2$ beachtet. Man erhält damit für die Lebensdauerunschärfe des atomaren Zustandes A durch elektrische Dipolstrahlung die Abschätzung

$$\hbar\gamma \approx \text{Ry} \cdot \alpha^3.$$

Das Matrixelement \mathbf{x}_{AB} beinhaltet Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge, wie sie vom Starkeffekt her bekannt sind. Für den speziellen Fall des Wasserstoffatoms kann man die Matrixelemente leicht berechnen. Man erhält dann z.B. die Lebensdauer

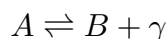
$$\tau(2p \rightarrow 1s) = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ sec.}$$

Typische Lebensdauern für magnetische Dipolübergänge (oder elektrische Quadrupolübergänge) sind nach obiger Abschätzung um etwa vier Größenordnungen länger. Ein besonders interessanter Übergang beim Wasserstoffatom ist der Übergang $2s \rightarrow 1s$,

der in jeder Multipolordnung verboten ist. Dies erklärt die lange Lebensdauer des $2s$ -Zustandes von etwa $\frac{1}{7}$ sec, der durch einen Zweiphotonenübergang zerfällt, der durch den im Vektorpotential quadratischen Term in H_{ww} bewirkt wird.

Anhang: Atome und Photonen im thermischen Gleichgewicht (Herleitung der Boseverteilung bzw. des Planckschen Strahlungsgesetzes in Anlehnung an A. Einstein 1917)

Im thermischen Gleichgewicht halten sich Absorptions- und Emissionsprozesse



die Waage. Wenn $N(A)$ bzw. $N(B)$ die Zahl der Atome in den Zuständen A bzw. B ist und w_{emi} und w_{abs} die Übergangswahrscheinlichkeiten für die Photonmode $\mathbf{k}\alpha$ sind, lautet die Gleichgewichtsbedingung

$$N(B)w_{\text{abs}} = N(A)w_{\text{emi}}.$$

Nach der Gibbsschen Verteilung gilt weiterhin

$$w_{\text{emi}}/w_{\text{abs}} = N(B)/N(A) = e^{-E_B/k_B T} / e^{-E_A/k_B T} = e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}}/k_B T}.$$

Das Verhältnis der beiden Übergangswahrscheinlichkeiten kennen wir aus der obigen Rechnung. Wegen der Hermitizität des Hamiltonoperators H_{ww} und der Transversalitätsbeziehung $\mathbf{k} \perp \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}$ gilt für die atomaren Matrixelemente für Absorption und Emission

$$\langle B | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* \cdot \mathbf{p}_n | A \rangle = \langle A | \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \cdot \mathbf{p}_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} | B \rangle^* = \langle A | e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \cdot \mathbf{p}_n | B \rangle^*.$$

(An dieser Stelle hat A. Einstein statt der Hermitizität die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts verwendet.) Daraus folgt

$$\frac{w_{\text{emi}}}{w_{\text{abs}}} = \frac{(n_{\mathbf{k}\alpha} + 1) |\langle B | \sum_n e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha}^* \cdot \mathbf{p}_n | A \rangle|^2}{n_{\mathbf{k}\alpha} |\langle A | \sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_n} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \cdot \mathbf{p}_n | B \rangle|^2} = \frac{n_{\mathbf{k}\alpha} + 1}{n_{\mathbf{k}\alpha}}.$$

Diese Beziehung zusammen mit der Gleichgewichtsbedingung und der Gibbsverteilung ergibt sofort die Boseverteilung

$$n_{\mathbf{k}\alpha} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}}/k_B T} - 1}.$$

8. Streuung von Licht an Atomen (Kurzfassung)

Bei der Streuung von Licht an Atomen bleibt die Photonenzahl erhalten. Ein Photon $(\mathbf{k}, \boldsymbol{\epsilon}, \omega)$ treffe auf ein Atom im Zustand A . Im Endzustand gebe es ein Photon $(\mathbf{k}', \boldsymbol{\epsilon}', \omega')$ und das Atom befinde sich im Zustand B . Der A_{\perp}^2 -Term in H_{ww} bewirkt solche Prozesse in 1. Ordnung Störungstheorie, der $(\mathbf{A}_{\perp} \cdot \mathbf{p})$ -Term in zweiter Ordnung. Beide Prozesse sind im allgemeinen wichtig. Die hier unterschlagene Rechnung ergibt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt die Kramers-Heisenberg-Formel (der klassische Elektronenradius ist $r_0 = \frac{e^2}{mc^2} = \alpha^2 a_0 = 2.82 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 \frac{\omega'}{\omega} |(\boldsymbol{\epsilon}^* \cdot \boldsymbol{\epsilon}') \delta_{AB} - \frac{1}{m} \sum_I \left(\frac{(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{p}_{BI})(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_{IA})}{E_I - E_A - \hbar\omega} + \frac{(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_{BI})(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{p}_{IA})}{E_I - E_A + \hbar\omega'} \right) |^2.$$

Der erste Term $\propto \delta_{AB}$ ergibt sich in erster Ordnung aus dem A_{\perp}^2 -Term, der Summenterm entsteht in zweiter Ordnung aus dem $(\mathbf{A}_{\perp} \cdot \mathbf{p})$ -Term und summiert über Zwischenzustände I des Atoms. Dabei ergibt sich der erste Term in der Summe aus Zwischenzuständen ohne Photonen, der zweite Term aus solchen mit zwei Photonen. Die Matrixelemente des Impulsoperators wie z.B. \mathbf{p}_{BI} verstehen sich in Analogie zu \mathbf{x}_{BA} im vorigen Abschnitt als Matrixelemente des Gesamtimpulses der Elektronen. In der Kramers-Heisenberg-Formel wurde wie bei der Dipolnäherung für die Absorption angenommen, dass $\bar{\lambda} \doteq \lambda/2\pi = c/\omega \gg a_0$.

Für elastische Streuung gilt $\omega' = \omega$ und $B = A$. Im Grenzfall kleiner Lichtfrequenz $\omega \ll \omega_{IA} \doteq (E_I - E_A)/\hbar$ spricht man von der Rayleighstreuung. Wenn man nach Potenzen von ω/ω_{IA} entwickelt, gibt es in führender Ordnung eine Kompensation der Terme erster und zweiter Ordnung und man erhält schließlich

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Rayl}} = \left(\frac{r_0 m}{\hbar} \right)^2 \omega^4 \left| \sum_I \frac{1}{\omega_{IA}} [(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{x}_{AI})(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{x}_{IA}) + (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{x}_{AI})(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{x}_{IA})] \right|^2.$$

Mit $|\mathbf{x}_{IA}| \approx a_0$, $\hbar\omega_{IA} \approx \text{Ry}$ und $\hbar\omega/2\text{Ry} = a_0/\alpha\bar{\lambda}$ hat dieser Streuquerschnitt die Größenordnung

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Rayl}} \approx r_0^2 (\hbar\omega/2\text{Ry})^4 = a_0^2 (a_0/\bar{\lambda})^4.$$

Der Grenzfall $\omega \gg \omega_{IA}$ heißt Thomsonstreuung. Hier dominiert der A_{\perp}^2 -Term und es gilt einfach das klassische Ergebnis

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Thom}} = r_0^2 |\boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon}'^*|^2$$

unabhängig von der Frequenz ω . Diese Formel gilt daher auch für $\omega_{IA} = 0$, d.h. für freie Elektronen, d.h. für die Comptonstreuung.

Im Falle der inelastischen Streuung spricht man von Ramanstreuung. Die Energieerhaltung bewirkt $E_A + \hbar\omega = E_B + \hbar\omega'$. Hier trägt nur der Prozess 2. Ordnung bei und der Streuquerschnitt hat die allgemeine Größenordnung

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Raman}} \approx r_0^2.$$

Eine besondere Situation entsteht, wenn $E_I = E_A + \hbar\omega$. Offenbar versagt die Kramers–Heisenberg–Formel in diesem Fall, in dem man von resonanter Ramanstreuung oder von Resonanzfluoreszenz spricht. Die unphysikalische Divergenz des Querschnitts wird durch Berücksichtigung der Unschärfe der Energie E_I vermieden. Diese Unschärfe kann im Experiment verschiedene Ursachen haben: Dopplerverbreiterung, Stoßverbreiterung, Strahlungsdämpfung. Bei isolierten ruhenden Atomen kommt die natürliche Lebensdauererbreiterung durch Strahlungsdämpfung zum Tragen. Man kann zeigen (Weißkopf und Wigner), dass man den resonanten Energienenner $E_I - E_A - \hbar\omega$ durch $E_I - E_A - \hbar\omega - i\Gamma_I/2$ ersetzen muß, wobei $\Gamma_I/\hbar = 1/\tau_I$ die Zerfallsrate des Zwischenzustands ist. Wenn man so dicht bei der Resonanz liegt, dass die resonante Amplitude für den Zwischenzustand $I = R$ dominiert, kann man alle anderen Beiträge weglassen und erhält

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{res}} = r_0^2 \frac{\omega'}{\omega} \frac{1}{m^2} \frac{|\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{p}_{BR}|^2 \cdot |\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_{RA}|^2}{(E_R - E_A - \hbar\omega)^2 + \Gamma_R^2/4}.$$

Da die natürliche Linienbreite von der Größenordnung $\Gamma_R \approx \text{Ry} \cdot \alpha^3$ ist, kann der Querschnitt im Zentrum der Resonanz gegenüber der nicht resonanten Ramanstreuung um den Faktor α^{-6} verstärkt werden:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{res}} \approx r_0^2/\alpha^6 = a_0^2/\alpha^2 \approx \bar{\lambda}^2.$$

9. Die Diracgleichung

Bevor wir nun eine relativistische Quantenmechanik für das Elektron formulieren, wollen wir uns erinnern, wie man den Spin in die nichtrelativistische Quantenmechanik einbezieht. Es ist üblich, nach Pauli einen Zeeman-Term der Gestalt

$$H_{\text{Spin}} = -\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

hinzuzufügen, wobei ein g -Faktor $g = 2$ Anwendung fand. Angesichts des Prinzips der lokalen Eichinvarianz, das auf die Vorschrift der minimalen Kopplung führt, erscheint dieses Vorgehen als sehr künstlich. Tatsächlich kann man H_{Spin} auch aus einer Minimalkopplungsvorschrift gewinnen, wenn man nur nicht von der üblichen Form der kinetischen Energie

$$H_{\text{kin}} = p^2/2m$$

ausgeht. Unter Einbeziehung des Spinoperators kann man die kinetische Energie nämlich auch als

$$H_{\text{kin}} = (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})/2m$$

schreiben. (Zur Erinnerung die Identität $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{a} \times \mathbf{b})$.) Wegen $(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}) = i\hbar\frac{e}{c}\mathbf{B}$ ergibt dann die Minimalkopplung die kinetische Energie einschließlich des Zeeman-Terms

$$H_{\text{kin}} = \frac{1}{2m}[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})][\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})] = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

mit dem g -Faktor 2.

Die Diracgleichung ergibt sich nach dieser Vorbemerkung nun zwanglos, wenn man in die relativistische Energie-Impuls-Beziehung in analoger Weise den Spin einbaut und dann nach der üblichen Vorschrift $E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\hbar c\frac{\partial}{\partial x_4}$, $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ zu Operatoren übergeht. Ohne den Spin waren wir so zur Klein-Gordon-Gleichung gekommen. Mit Spin erhalten wir die Energie-Impuls-Beziehung

$$(E/c - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(E/c + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = (mc)^2$$

und daraus die Feldgleichung (\hbar/mc ist die Comptonwellenlänge)

$$\frac{\hbar}{mc}\left(-\frac{\partial}{\partial x_4} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\right)\frac{\hbar}{mc}\left(-\frac{\partial}{\partial x_4} - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\right)\Phi = \Phi.$$

Dabei muß Φ eine zweikomponentige Wellenfunktion sein, wie wir sie aus der Paulitheorie des Spins 1/2 kennen. Die obige Gleichung ist im wesentlichen die Diracgleichung. Es ist nützlich und üblich, sie in zwei Differentialgleichungen erster Ordnung umzuschreiben. Wir definieren dazu

$$\begin{aligned} \Phi_L &= \Phi & (\text{L steht für linkshändig}) \\ \Phi_R &= \frac{\hbar}{mc}\left(-\frac{\partial}{\partial x_4} - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\right)\Phi & (\text{R steht für rechtshändig}). \end{aligned}$$

Damit folgt die Weyl-Darstellung der Diracgleichung

$$\begin{aligned} \hbar(i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial x_4})\Phi_L &= -mc\Phi_R \\ \hbar(-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla + \frac{\partial}{\partial x_4})\Phi_R &= -mc\Phi_L. \end{aligned}$$

Wir beachten, dass Φ_L und Φ_R für $m \neq 0$ miteinander verkoppelt sind.

Erläuterung der Bezeichnungen L und R :

Wir betrachten einmal den Fall verschwindender Masse $m = 0$, so dass Φ_L und Φ_R nicht miteinander vermischt werden. Mit dem Impulseigenzustand $\Phi_L = \chi e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$ als Lösungsansatz folgt für die Spinwellenfunktion χ die Gleichung $(-\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} - \omega/c)\chi = 0$. Daher finden wir eine linkshändige Eigenfunktion für $\omega > 0$ mit $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k})\chi = -k\chi$ und $\omega = ck$, bei der die Spinkomponente in Richtung \mathbf{k} den Eigenwert $-\hbar/2$ hat (negative Helizität). Für $\omega < 0$ und $|\omega| = ck$ erhalten wir eine rechtshändige Eigenfunktion mit dem Eigenwert $+\hbar/2$ (positive Helizität). Für Φ_R ist die Beziehung zwischen den Vorzeichen von Energie und Spinkomponente offenbar umgekehrt. Neutrinos, die Fermionen mit nach allen bisherigen Beobachtungen verschwindender Ruhemasse sind, sind nur mit negativer Helizität bekannt, werden also durch die Wellenfunktion Φ_L mit positiven Energien $\omega > 0$ beschrieben. Ähnlich wie beim komplexen Klein–Gordon–Feld werden die Zustände von Φ_L mit negativer Energie $\omega < 0$ als Antineutrinos interpretiert. Sie haben positive Helizität.

Die meist gebrauchte Form der Diracgleichung benutzt den vierkomponentigen Diracspinor

$$\psi \doteq \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} \Phi_R + \Phi_L \\ \Phi_R - \Phi_L \end{pmatrix}$$

als Wellenfunktion. Durch Addition bzw. Subtraktion der obigen Wellengleichungen folgt

$$\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_4} & -i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -\frac{\partial}{\partial x_4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = -mc \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}.$$

Zur kompakteren Schreibweise dieser Gleichung führt man die Diracschen vierdimensionalen γ -Matrizen ein:

$$\gamma_k \doteq \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad (k = 1, 2, 3), \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

mit den kartesischen Komponenten σ_k und der zweidimensionalen Einheitsmatrix I . Damit bekommt die Diracgleichung die Gestalt

$$D\psi \doteq (\hbar\gamma_\mu \partial_\mu + mc)\psi = 0$$

mit dem Diracoperator D .

Folgende Eigenschaften der Diracmatrizen sind wichtig:

$$\begin{aligned} \gamma_\mu^\dagger &= \gamma_\mu && \text{(Hermitizität),} \\ \text{Spur } \gamma_\mu &= 0 && \text{(Spurfreiheit),} \\ \{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} &\doteq \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}. \end{aligned}$$

Letzteres bedeutet, dass verschiedene γ -Matrizen antivertauschen und dass $\gamma_\mu^2 = 1$. Die vier Diracmatrizen spannen eine 16–dimensionale Algebra von (4×4) -Matrizen auf (Clifford–Algebra), die wir im Abschnitt 13 noch näher kennenlernen werden. Diese Matrizen sind - wie in der nichtrelativistischen Paulitheorie die 3 Spinmatrizen - als ein erweiterter Satz von neuen Observablen aufzufassen.

Durch Multiplikation mit γ_4 erhält die Diracgleichung die Hamiltonsche Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_D \psi$$

mit dem Hamiltonoperator

$$H_D = -ic\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2 \beta,$$

den wir im Abschnitt 14 mittels Legendretransformation herleiten werden. Hierbei sind die neuen (4×4) -Matrizen

$$\beta \doteq \gamma_4, \quad \alpha_k \doteq i\gamma_4 \gamma_k = \frac{i}{2}(\gamma_4 \gamma_k - \gamma_k \gamma_4) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad (k = 1, 2, 3)$$

benutzt worden. Die Matrizen α_k und β haben die gleichen Eigenschaften wie die γ -Matrizen: Sie sind hermitesch und spurfrei und gehorchen den Antivertauschungsrelationen

$$\{\alpha_k, \alpha_l\} = 2\delta_{kl}, \quad \{\beta, \beta\} = 2, \quad \{\alpha_k, \beta\} = 0.$$

Ähnlich wie bei den Paulimatrizen haben wir oben gewisse Konventionen zur Festlegung der Diracmatrizen verwendet (Standarddarstellung). Man kann zeigen, dass die Antivertauschungsrelationen

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}$$

die entscheidende darstellungsunabhängige Eigenschaft dieser neuen Observablen sind. Wenn γ' andere Matrizen sind, die denselben Antivertauschungsrelationen genügen, so ist eine Diracgleichung

$$(\hbar\gamma'_\mu \partial_\mu + mc)\psi' = 0$$

äquivalent zu $(\hbar\gamma_\mu \partial_\mu + mc)\psi = 0$ in folgendem Sinne (Theorem von Pauli):

- (1) Es existiert eine (nichtsinguläre) (4×4) -Matrix S mit $S\gamma_\mu S^{-1} = \gamma'_\mu$, die bis auf einen multiplikativen Faktor eindeutig bestimmt ist.
- (2) Daraus folgt offenbar, dass $\psi' = S\psi$.
- (3) Falls γ'_μ hermitesch ist, kann S unitär gewählt werden.

Wie könnte die Lagrangedichte aussehen, die auf die Diracgleichung führt? Man muß eine reelle quadratische Form in der Wellenfunktion bilden. Dazu definieren wir zunächst den zu

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

konjugierten Spinor

$$\psi^\dagger \doteq (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*).$$

Weil alle γ_μ hermitesch sind, $\partial_4 = \frac{\partial}{ic\partial t}$ ein hermitescher Operator ist, ∂_k für $k = 1, 2, 3$ jedoch antihermitesch, ergäbe die Lagrangedichte $\psi^\dagger (\hbar\gamma_\mu \partial_\mu + mc)\psi$ keine reelle Wirkung - das Integral über $\psi^\dagger \gamma_k \partial_k \psi$ ($k = 1, 2, 3$) ist rein imaginär. Daher führt man den zu ψ adjungierten Spinor

$$\bar{\psi} \doteq \psi^\dagger \gamma_4 = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*)$$

ein. Mit ihm definieren wir die Dirac-Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_D \doteq -c\hbar \bar{\psi} \gamma_\mu \partial_\mu \psi - mc^2 \bar{\psi} \psi.$$

Wir werden im Abschnitt 12 erkennen, dass diese Lagrangedichte invariant unter Lorentztransformationen ist.

Das Hamiltonsche Prinzip liefert bei Variation der (reellen) Wirkung $\int d^3r dt \mathcal{L}_D$ nach den vier unabhängigen Komponenten von $\bar{\psi}$ die Diracgleichung $(\hbar \gamma_\mu \partial_\mu + mc)\psi = 0$. Variation nach ψ ergibt die adjungierte Diracgleichung (Vorzeichenwechsel durch partielle Integration!)

$$\bar{D}\bar{\psi} \doteq (-\hbar \partial_\mu \bar{\psi} \gamma_\mu + mc\bar{\psi}) = 0.$$

Letztere folgt auch aus der Diracgleichung durch Adjungieren (d.h. Komplexkonjugieren und Transponieren) und Multiplizieren mit γ_4 von rechts; hierbei ist $(\partial_k)^* = \partial_k$, $(\partial_4)^* = -\partial_4$ und $\gamma_k \gamma_4 = -\gamma_4 \gamma_k$ zu beachten.

Die globale Eichinvarianz $\psi \rightarrow e^{i\phi} \psi$ der Dirac-Lagrangedichte hat einen lokalen Erhaltungssatz zur Folge: Es sollte $\partial_\mu j_\mu = 0$ gelten mit der Viererstromdichte

$$j_\mu \doteq -iA \left[\frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial (\partial_\mu \psi)} \psi - \bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi})} \right] = ic\hbar A \bar{\psi} \gamma_\mu \psi.$$

(Bemerkung: Wie in der Schrödingertheorie kann man die Kontinuitätsgleichung auch direkt aus der Diracgleichung und der adjungierten Diracgleichung herleiten, indem man $\bar{\psi} \cdot (D\psi) - (\bar{D}\bar{\psi}) \cdot \psi = 0$ bildet.)

Mit $A = 1/\hbar$ und $j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho)$ ergibt dies die positive Dichte

$$\rho \doteq \bar{\psi} \gamma_4 \psi = \psi^\dagger \psi = \sum_{\nu=1}^4 \psi_\nu^* \psi_\nu,$$

die in Analogie zur Schrödingertheorie als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann. Die zugehörige Stromdichte ist

$$\mathbf{j} = (ic\bar{\psi} \gamma_k \psi)_{(k=1,2,3)} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi.$$

In der Diractheorie hat die Forderung der lokalen Eichinvarianz die Minimalkopplung eines Diraceteilchens mit der elektrischen Ladung e an das Maxwellfeld nach der einfachen Vorschrift $\partial_\mu \rightarrow D_\mu \doteq \partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c} A_\mu$ zur Folge. Man beachte hier insbesondere, dass das Viererpotential in die eichinvariante Lagrangedichte und in die Diracgleichung im Gegensatz zur Schrödingertheorie linear eingeht.

10. Der nichtrelativistische Grenzfall

Wir wollen Eigenzustände $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ der Diracgleichung in zeitunabhängigen äußeren Feldern betrachten. Um den nichtrelativistischen Limes zu studieren, gehen wir zurück auf die (ψ_A, ψ_B) -Darstellung der Diracgleichung und erhalten mit $A_\mu = (\mathbf{A}, i\Phi)$

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})]\psi_B &= \frac{1}{c}[E - e\Phi - mc^2]\psi_A \\ [\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})]\psi_A &= \frac{1}{c}[E - e\Phi + mc^2]\psi_B. \end{aligned}$$

Wir betrachten jetzt Lösungen mit positiver Energie. Im nichtrelativistischen Grenzfall sind die nichtrelativistische Energie $E_{\text{nr}} \doteq E - mc^2$ und die elektrostatische Energie $e\Phi$ um einen Faktor der Ordnung $(v/c)^2 = \alpha^2$ kleiner als mc^2 (α ist hier die Feinstrukturkonstante). Weil der Impuls \mathbf{p} von der Ordnung $mv = (v/c)mc$ ist, hat der Operator $\frac{1}{mc}[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})]$ die Ordnung v/c . Aus diesen Abschätzungen schließt man, dass die Wellenfunktion ψ_B um einen Faktor der Ordnung v/c kleiner als die Wellenfunktion ψ_A ist. Deshalb nennt man ψ_A die große Komponente und ψ_B die kleine Komponente des Diracspinors. Durch Elimination von ψ_B erhält man die folgende Gleichung für die große Komponente:

$$[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})][\frac{c^2}{E_{\text{nr}} - e\Phi + 2mc^2}][\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})]\psi_A = (E_{\text{nr}} - e\Phi)\psi_A.$$

Indem man nun für den Nenner $1/(E_{\text{nr}} - e\Phi + 2mc^2) \sim (1 - \frac{E_{\text{nr}} - e\Phi}{2mc^2} + \dots)/2mc^2$ den Wert in führender Ordnung $2mc^2$ einsetzt, erhält man sofort die Pauligleichung

$$[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + e\Phi]\psi_A = E_{\text{nr}}\psi_A.$$

Die Berücksichtigung von Korrekturen der Ordnung $(v/c)^2$ zur Pauligleichung erfordert nicht nur mehr Rechnung, sondern auch eine grundsätzliche Überlegung. Es kann nämlich nicht sinnvoll sein, als nichtrelativistische zweikomponentige Wellenfunktion einfach die große Komponente ψ_A zu benutzen, weil diese nicht normiert ist. Außerdem sollte der Energieeigenwert E_{nr} nicht wie oben im effektiven Hamiltonoperator stehen. Diese beiden Probleme sind miteinander verknüpft. (Der obige effektive Hamiltonoperator ist jedoch entgegen der Behauptung im Lehrbuch von Sakurai hermitesch.) Die Lösung der Probleme gelingt dadurch, dass man eine unitäre Transformation konstruiert, die die 4-komponentige Wellenfunktion auf eine 2-komponentige abbildet. Diese Aufgabe wird durch die sogenannte Foldy-Wouthuysen-Transformation geleistet (mehr dazu findet sich z.B. im Lehrbuch von Messiah).

Die führenden Korrekturen zur Pauligleichung gewinnt man nun folgendermaßen (der Einfachheit halber betrachten wir den Fall verschwindenden Vektorpotentials). Wegen $\psi_B \sim \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{2mc}\psi_A$ lautet die Normierungsbedingung bis zur Ordnung $(v/c)^2$

$$\int d^3r (\psi_A^\dagger \psi_A + \psi_B^\dagger \psi_B) \sim \int d^3r \psi_A^\dagger (1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2})\psi_A \doteq 1.$$

Daher kann man die normierte 2-komponentige Wellenfunktion in folgender Form ansetzen:

$$\Psi \doteq \Omega \psi_A \quad \text{mit} \quad \Omega = 1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}, \quad \Omega^{-1} = 1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}.$$

Die obige Gleichung $H_A\psi_A = E_{\text{nr}}\psi_A$ für ψ_A mit dem problematischen effektiven Hamiltonoperator

$$H_A = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \frac{1}{2m} \left(1 - \frac{E_{\text{nr}} - e\Phi}{2mc^2}\right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + e\Phi$$

wird dann nach Multiplikation mit Ω^{-1} von links umgeschrieben als Wellengleichung

$$H_{\text{eff}}\Psi = E_{\text{nr}}\Psi \quad \text{mit} \quad H_{\text{eff}} \doteq \Omega^{-1}H_A\Omega^{-1} + E_{\text{nr}}(1 - \Omega^{-2})$$

für die normierte Wellenfunktion Ψ . Der dadurch gewonnene effektive Hamiltonoperator H_{eff} ist offenbar hermitesch und enthält den Eigenwert E_{nr} bis zur Ordnung $(v/c)^2$ nicht mehr. Die explizite Auswertung der obigen Formel ergibt das bekannte Resultat

$$H_{\text{eff}} = \frac{p^2}{2m} + e\Phi - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{E} \times \mathbf{p})}{4m^2c^2} - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\mathbf{E}$$

mit der Spinbahnwechselwirkung samt Darwinterm und der relativistischen Korrektur zur kinetischen Energie. Die Herkunft des Darwinterts wird in den Lehrbüchern auf die sogenannte Zitterbewegung zurückgeführt. Dabei wird fast nirgendwo betont (Ausnahme: Gordon Baym, Lectures on Quantum Mechanics, Seite 561), dass dieser Term als ein Teil der Spinbahnwechselwirkung zu betrachten ist. Mit Hilfe einer ähnlichen Manipulation wie bei der Herleitung des Zeeman-Terms zu Anfang des Kapitels 9 kann man die beiden letzten Terme in der Formel für H_{eff} kompakt in der Form

$$H_{\text{SB}} = -i \frac{e}{2\hbar m^2 c^2} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}, \mathbf{E} \cdot \mathbf{s}]$$

schreiben.

11. Freie Diracteilchen

Wir wollen zunächst zeigen, dass die Lösungen der freien Diracgleichung

$$(\hbar\gamma_\mu\partial_\mu + mc)\psi = 0$$

komponentenweise die Klein–Gordon–Gleichung erfüllen. Dazu multiplizieren wir die Diracgleichung von links mit dem Operator $(\hbar\gamma_\nu\partial_\nu - mc)$. Wegen der Identität

$$\gamma_\nu\gamma_\mu\partial_\nu\partial_\mu = \gamma_\nu\gamma_\mu\partial_\mu\partial_\nu = \gamma_\mu\gamma_\nu\partial_\nu\partial_\mu = \frac{1}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu)\partial_\nu\partial_\mu = \partial_\mu\partial_\mu = \square$$

ergibt sich damit die Klein–Gordon–Gleichung

$$(\hbar^2\square - m^2c^2)\psi = 0.$$

Daher können wir die Lösungen der freien Diracgleichung als

$$\psi = u(\mathbf{p})e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar}$$

ansetzen mit der Energie

$$E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4},$$

wobei $u(\mathbf{p})$ ein vierkomponentiger Spinor ist.

Diesen Lösungsansatz setzen wir nun in die Diracgleichung ein. Wir betrachten zunächst den Spezialfall $\mathbf{p} = 0$, in dem die Diracgleichung fordert, dass

$$\hbar\gamma_4\frac{\partial}{\partial(ict)}\psi = -mc\psi.$$

Für Lösungen positiver Energie $E = +mc^2$ bedeutet dies

$$-mc\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = -mc\begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix},$$

d.h. $u_B = 0$ und für u_A kann man die beiden Basiszustände

$$u_A = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

wählen. Für negative Energien $E = -mc^2$ wird umgekehrt $u_A = 0$ und

$$u_B = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Insgesamt haben wir damit die vier linear unabhängigen Lösungen

$$\begin{aligned} \psi_{+\uparrow} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imc^2t/\hbar}, & \psi_{+\downarrow} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imc^2t/\hbar} \\ \psi_{-\uparrow} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{imc^2t/\hbar}, & \psi_{-\downarrow} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{imc^2t/\hbar}. \end{aligned}$$

zu $\mathbf{p} = 0$ gefunden.

Anhand der nichtrelativistischen Näherung wissen wir, dass $u_A = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ einem Spin \uparrow und $u_A = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ einem Spin \downarrow entspricht; analoges gilt für u_B . Wir können daher den Operator

$$\Sigma_3 \doteq \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{i} = \frac{\gamma_1 \gamma_2 - \gamma_2 \gamma_1}{2i}$$

zur Messung der 3-Komponente des Spins benutzen. In offensichtlicher Verallgemeinerung identifizieren wir damit den Spinoperator für Diraceteilchen als $\hbar \Sigma / 2$ mit den kartesischen Komponenten

$$\Sigma_k \doteq \frac{\gamma_i \gamma_j \epsilon_{ijk}}{2i} = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix}.$$

Es zeigt sich, dass der durch

$$\mathbf{J} \doteq \mathbf{r} \times \mathbf{p} + \hbar \Sigma / 2$$

definierte Gesamtdrehimpuls für freie Teilchen (bzw. allgemeiner im Zentralpotential) erhalten ist: $[H_D, \mathbf{J}] = 0$.

Zur Lösung der freien Diracgleichung im Fall $\mathbf{p} \neq 0$ benutzen wir die Zerlegung der Diracgleichung vom Anfang des Abschnitts 10 für $\mathbf{A} = 0$ und $\Phi = 0$ und erhalten mit dem Ansatz

$$\psi = \begin{pmatrix} u_A(\mathbf{p}) \\ u_B(\mathbf{p}) \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar}$$

die beiden äquivalenten Gleichungen

$$u_A = \frac{c}{E - mc^2} (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) u_B \quad \Longleftrightarrow \quad u_B = \frac{c}{E + mc^2} (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) u_A.$$

Wir brauchen jetzt die Identität

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 + ip_2 & -p_3 \end{pmatrix}.$$

Für positive Energien $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} > 0$ setzen wir wieder $u_A = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ oder $u_A = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ und erhalten u_B aus der zweiten obigen Gleichung. Für negative Energien $E = -\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} < 0$ setzen wir $u_B = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ oder $u_B = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ und erhalten u_A aus der ersten obigen Gleichung. Die Resultate sind für $E > 0$ (N ist ein Normierungsfaktor)

$$u^{(1)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p_3 c / (E + mc^2) \\ (p_1 + ip_2) c / (E + mc^2) \end{pmatrix}, \quad u^{(2)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ (p_1 - ip_2) c / (E + mc^2) \\ -p_3 c / (E + mc^2) \end{pmatrix}$$

und für $E < 0$

$$u^{(3)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} -p_3 c / (|E| + mc^2) \\ -(p_1 + ip_2)c / (|E| + mc^2) \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$u^{(4)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} -(p_1 - ip_2)c / (|E| + mc^2) \\ p_3 c / (|E| + mc^2) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Die obigen Spinoren sind im allgemeinen nicht mehr Eigenzustände des Operators Σ_3 ; sie sind es nur dann, wenn der Impuls \mathbf{p} in Richtung der z -Achse zeigt, so dass $p_1 = p_2 = 0$. Aus Gründen der Rotationsinvarianz muß es immer möglich sein, je zwei Basiszustände für $E > 0$ bzw. für $E < 0$ so zu wählen, dass sie Eigenzustände zum Operator $\Sigma \cdot \mathbf{p}$ mit den Eigenwerten $\pm |\mathbf{p}|$ sind. Dies folgt schon aus der Erhaltung des Drehimpulses \mathbf{J} , weil $\mathbf{J} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{2} \Sigma \cdot \mathbf{p}$ wegen $(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{p} = 0$ gilt. Den Eigenwert ± 1 des Helizitätsoperators $h \doteq \Sigma \cdot \mathbf{p} / p$ nennt man auch die Helizität des Teilchens, den Eigenzustand bezeichnet man als rechts- bzw. linkshändig. Unter Benutzung der Polarwinkel (θ, ϕ) des Impulses $\mathbf{p} = p(\cos \theta, \sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi)$ kann man die 2-komponentigen Paulispinoren, die Helizitätseigenzustände sind, als

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} -b^* \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

schreiben. Mit diesen Paulispinoren lauten die 4-komponentigen Helizitätseigenzustände für beliebige Impulsrichtung mit der abkürzenden Notation $s \doteq pc / (|E| + mc^2)$

$$u^{(1/2)}(\mathbf{p}) \doteq u^{(+\pm)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \chi_{\pm} \\ \pm s \chi_{\pm} \end{pmatrix} \quad (E > 0),$$

$$u^{(3/4)}(\mathbf{p}) \doteq u^{(-\pm)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \mp s \chi_{\pm} \\ \chi_{\pm} \end{pmatrix} \quad (E < 0).$$

Die so definierten Basisspinoren sind paarweise orthogonal aufeinander:

$$u^{(r)\dagger}(\mathbf{p}) u^{(s)}(\mathbf{p}) = 0 \quad (r \neq s).$$

Ihre Normierung wählt man gerne so, dass

$$u^{(r)\dagger}(\mathbf{p}) u^{(r)}(\mathbf{p}) = |E| / mc^2;$$

dann ergibt sich für die Normierungskonstante der Wert $N = \sqrt{(|E| + mc^2) / 2mc^2}$. Man nennt dies eine kovariante Normierung, weil - wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden - $u^\dagger u$ die vierte Komponente eines Vierervektors ist.

Das Spektrum der Zustände für freie Teilchen besteht nach obigem aus allen Energien $E \geq mc^2$ und allen Energien $E \leq -mc^2$. Die physikalische Interpretation dieses Spektrums werden wir später noch besprechen.

12. Kovarianz der Diracgleichung

Unter einer Lorentztransformation

$$x'_\mu = a_{\mu\nu}x_\nu \quad (a_{\mu\nu}a_{\lambda\nu} = \delta_{\mu\lambda}, \quad \partial'_\mu = a_{\mu\nu}\partial_\nu)$$

sollte die Diracgleichung

$$(\hbar\gamma_\mu\partial_\mu + mc)\psi(x) = 0$$

ihre Form nicht ändern und die Gestalt

$$(\hbar\gamma_\mu\partial'_\mu + mc)\psi'(x') = 0$$

erhalten. Es ist hier zu beachten, dass der Spinor natürlich kein Vierervektor ist. Er sollte sich unter der Lorentztransformation mit einer noch zu bestimmenden linearen Abbildung S (nichtsinguläre 4×4 -Matrix) wie

$$\psi'(x') = S\psi(x)$$

transformieren. Aus der mit S^{-1} von links multiplizierten transformierten Diracgleichung

$$(S^{-1}\hbar\gamma_\mu a_{\mu\nu}\partial_\nu S + mc)\psi = 0$$

lesen wir die Bedingung $S^{-1}\gamma_\mu S a_{\mu\nu} = \gamma_\nu$ oder

$$S^{-1}\gamma_\lambda S = a_{\lambda\nu}\gamma_\nu$$

ab. Wir werden die Matrix S für folgende Transformationen aus der Lorentzgruppe angeben:

- (1) Rotationen um eine der Koordinatenachsen,
- (2) Boosts entlang einer der Koordinatenachsen,
- (3) die räumliche Inversion.

Die unter (1) und (2) genannten Transformationen erzeugen die eigentliche Lorentzgruppe.

Wir beginnen mit einer Rotation um die z -Achse um den Winkel ω

$$a = \begin{pmatrix} \cos \omega & \sin \omega & 0 & 0 \\ -\sin \omega & \cos \omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

In Verallgemeinerung des Transformationsverhaltens von 2-komponentigen Paulispinoren $S = e^{i\omega\sigma_z/2} = \cos \frac{\omega}{2} + i\sigma_z \sin \frac{\omega}{2}$ versuchen wir den Ansatz

$$S_{\text{rot}} = e^{i\omega\Sigma_3/2} = \cos \frac{\omega}{2} + i\Sigma_3 \sin \frac{\omega}{2} \quad (i\Sigma_3 = \gamma_1\gamma_2).$$

Damit dieser Ansatz richtig ist, muß die Identität

$$\left(\cos \frac{\omega}{2} - \gamma_1\gamma_2 \sin \frac{\omega}{2}\right)\gamma_\lambda \left(\cos \frac{\omega}{2} + \gamma_1\gamma_2 \sin \frac{\omega}{2}\right) = a_{\lambda\nu}\gamma_\nu$$

gelten. Von deren Richtigkeit überzeugt man sich für $\lambda = 1, 2, 3, 4$ unter Benutzung der Antivertauschungsregeln für die γ -Matrizen. Dabei benutzt man für:

$$\lambda = 3, 4: \gamma_1 \gamma_2 \gamma_\lambda = \gamma_\lambda \gamma_1 \gamma_2, a_{\lambda\nu} = \delta_{\lambda\nu} \text{ und } \gamma_1 \gamma_2 \gamma_\lambda \gamma_1 \gamma_2 = -\gamma_\lambda.$$

$$\lambda = 1: \gamma_1 (\cos \frac{\omega}{2})^2 + 2\gamma_2 \sin \frac{\omega}{2} \cos \frac{\omega}{2} - \gamma_1 (\sin \frac{\omega}{2})^2 = \gamma_1 \cos \omega + \gamma_2 \sin \omega.$$

$$\lambda = 2: \gamma_2 (\cos \frac{\omega}{2})^2 - 2\gamma_1 \sin \frac{\omega}{2} \cos \frac{\omega}{2} - \gamma_2 (\sin \frac{\omega}{2})^2 = \gamma_2 \cos \omega - \gamma_1 \sin \omega.$$

Für beliebige Drehachsen mit dem vektoriellen Drehwinkel $\boldsymbol{\omega} = \omega \mathbf{n}_\omega$ folgt nun

$$S_{\text{rot}} = e^{i\boldsymbol{\omega}\Sigma/2} = \cos \frac{\omega}{2} + i(\Sigma \cdot \mathbf{n}_\omega) \sin \frac{\omega}{2}.$$

Wir halten fest, dass der Diracspinor bei einer Rotation um 360° wie der Paulispinor das Vorzeichen wechselt:

$$S_{\text{rot}}(|\boldsymbol{\omega}| = 2\pi) = -1.$$

Bei einem Boost mit der Geschwindigkeit $v = \beta c$ längs der k -Achse führt man die Rapidity χ durch die Beziehung $\text{tgh}\chi = \beta$ ein. Damit schreibt sich die Lorentztransformation für $k = 3$ als

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cosh \chi & i \sinh \chi \\ 0 & 0 & -i \sinh \chi & \cosh \chi \end{pmatrix}.$$

Mit den schon früher eingeführten α -Matrizen $\alpha_k = i\gamma_4\gamma_k$ ($\alpha_k^2 = 1$) setzen wir jetzt an:

$$S_{\text{boost}} = e^{-\chi\alpha_k/2} = \cosh \frac{\chi}{2} - \alpha_k \sinh \frac{\chi}{2}.$$

Die Bestätigung dieses Ansatzes erfolgt analog zum Fall der Rotation.

Man beachte, dass S_{rot} unitär ist, S_{boost} jedoch nicht! Dies passt mit unserer früheren Beobachtung zusammen, dass $\psi^\dagger\psi$ kein Lorentzskalar ist ($\psi'^\dagger\psi' = \psi^\dagger S^\dagger S\psi \neq \psi^\dagger\psi$).

Die räumliche Inversion (Paritätstransformation) wird offenbar durch

$$S_{\text{P}} = \gamma_4$$

geleistet, weil $a_{\text{P}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ und $\gamma_4\gamma_k\gamma_4 = -\gamma_k$ ($k = 1, 2, 3$). Hier wird

per Konvention ein grundsätzlich möglicher Phasenfaktor gleich 1 gesetzt.

Im Ruhssystem eines freien Teilchens ($\mathbf{p} = 0$) haben die Lösungen mit positiver Energie die Parität $+1$ und diejenigen mit negativer Energie die Parität -1 . Die entgegengesetzte Parität dieser beiden Lösungen hängt nicht von Konventionen ab. Sie wird sich im folgenden in der entgegengesetzten Parität von Teilchen und Antiteilchen und in der negativen intrinsischen Parität des Positroniums und der Mesonen niederschlagen.

Wichtig wird im nächsten Abschnitt folgende Beobachtung werden: Für Rotationen gilt $\gamma_4\Sigma = \Sigma\gamma_4$ und daher $S_{\text{rot}}\gamma_4 = \gamma_4 S_{\text{rot}}$. Dagegen ist $\gamma_4\alpha_k = -\alpha_k\gamma_4$ und daher gilt für Boosts $S_{\text{boost}}\gamma_4 = \gamma_4 S_{\text{boost}}^{-1}$. In jedem Fall gilt deshalb aber (S_{boost} hermitesch)

$$S^\dagger\gamma_4 = \gamma_4 S^{-1}.$$

13. Bilineare Kovarianten

Wir sind jetzt in der Lage, das Transformationsverhalten bilinearer Dichten der Form $\psi^\dagger \Gamma \psi$ bzw. $\bar{\psi} \Gamma \psi$ unter Lorentztransformationen zu untersuchen. Mit $\psi' = S\psi$ folgt $\psi'^\dagger = \psi^\dagger S^\dagger$ und $\bar{\psi}' = \psi'^\dagger \gamma_4 = \psi^\dagger S^\dagger \gamma_4 = \bar{\psi} S^{-1}$. Daher ist die Dichte

$$\bar{\psi} \psi,$$

die wir für den Massenterm in der Lagrangedichte verwendet hatten, tatsächlich ein Lorentzskalar. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^\dagger \psi$ ist dagegen kein Skalar, sondern die vierte Komponente des (reellen) Vierervektors (hier natürlich mit imaginärer vierter Komponente)

$$i\bar{\psi} \gamma_\mu \psi,$$

den wir für die Viererstromdichte $j_\mu = ic\bar{\psi} \gamma_\mu \psi$ verwendet hatten. Tatsächlich überprüfen wir noch einmal leicht die Vierervektoreigenschaft:

$$\bar{\psi}' \gamma_\mu \psi' = \bar{\psi} S^{-1} \gamma_\mu S \psi = a_{\mu\nu} \bar{\psi} \gamma_\nu \psi.$$

Daraus folgt sofort, dass

$$\bar{\psi} \gamma_\mu \partial_\mu \psi$$

ein weiterer Skalar ist.

Welche anderen Kovarianten gibt es? Um diese Frage zu beantworten, muß man die Algebra der γ -Matrizen, die Clifford-Algebra, überblicken. Es zeigt sich, dass sie 16 linear unabhängige (4×4) -Matrizen enthält. Natürlich gibt es auch genau 16 linear unabhängige hermitesche (4×4) -Matrizen. Mit 1 und γ_μ haben wir 5 dieser Matrizen, mit denen wir oben schon Kovarianten gebildet haben. Die Vorschrift

$$\sigma_{\mu\nu} \doteq -\frac{i}{2}(\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu) = -\sigma_{\nu\mu},$$

die einen antisymmetrischen Tensor zweiter Stufe erzeugt, der die früher schon eingeführten Matrizen Σ_k und α_k enthält, gibt uns 6 weitere Matrizen aus der Clifford-Algebra. Damit bilden wir die antisymmetrische Tensordichte

$$\bar{\psi} \sigma_{\mu\nu} \psi,$$

die sich wie ein Lorentztensor zweiter Stufe transformiert:

$$\bar{\psi}' \sigma_{\mu\nu} \psi' = \bar{\psi} S^{-1} \sigma_{\mu\nu} S \psi = -\frac{i}{2} \bar{\psi} S^{-1} [\gamma_\mu S S^{-1} \gamma_\nu - \gamma_\nu S S^{-1} \gamma_\mu] S \psi = a_{\mu\lambda} a_{\nu\kappa} \bar{\psi} \sigma_{\lambda\kappa} \psi.$$

Eine weitere wichtige γ -Matrix ist die Matrix

$$\gamma_5 \doteq \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}.$$

Sie antivertauscht mit allen γ_μ ($\mu = 1, \dots, 4$):

$$\{\gamma_5, \gamma_\mu\} = 0 \quad (\mu = 1, 2, 3, 4).$$

Weil daher γ_5 mit allen $\sigma_{\mu\nu}$ vertauscht, gilt $S_{\text{rot}}^{-1}\gamma_5 S_{\text{rot}} = \gamma_5$, $S_{\text{boost}}^{-1}\gamma_5 S_{\text{boost}} = \gamma_5$, aber $S_{\text{P}}^{-1}\gamma_5 S_{\text{P}} = -\gamma_5$. Daher ist die Bilinearform

$$i\bar{\psi}\gamma_5\psi$$

ein wegen $(\bar{\psi}\gamma_5\psi)^* = (\psi^\dagger\gamma_4\gamma_5\psi)^* = \psi^\dagger\gamma_5\gamma_4\psi = -\psi^\dagger\gamma_4\gamma_5\psi = -\bar{\psi}\gamma_5\psi$ reeller Pseudoskalar. Schließlich gibt uns $\gamma_5\gamma_\mu$ vier weitere Matrizen. Die damit gebildeten Dichten

$$\bar{\psi}\gamma_5\gamma_\mu\psi$$

bilden einen ebenfalls reellen Pseudovektor (mit imaginärer vierter Komponente).

Die 16 hermiteschen Basismatrizen der Clifford-Algebra

$$\Gamma_A = 1, \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}, i\gamma_5\gamma_\mu, \gamma_5$$

haben die Eigenschaften

$$\Gamma_A^2 = 1 \quad \text{und} \quad \text{Spur } \Gamma_A = 0 \quad (\text{letzteres außer für } \Gamma_A = 1).$$

Um die physikalische Bedeutung der Matrizen $\sigma_{\mu\nu}$ zu verstehen, wollen wir jetzt die Beziehung der elektrischen Viererstromdichte

$$j_\mu = iec\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$$

zu dem entsprechenden Ausdruck im nichtrelativistischen Grenzfall beleuchten. Wir werden dabei die Diracgleichung in der Form $c\psi = -\frac{\hbar}{m}\gamma_\nu(\partial_\nu - \frac{ie}{\hbar c}A_\nu)\psi$ und die adjungierte Diracgleichung $c\bar{\psi} = \frac{\hbar}{m}(\partial_\nu + \frac{ie}{\hbar c}A_\nu)\bar{\psi}\gamma_\nu$ zum Einsetzen benutzen. Wir erhalten so

$$j_\mu = \frac{iec}{2}(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi + \bar{\psi}\gamma_\mu\psi) = \frac{ie\hbar}{2m}[-\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_\nu(\partial_\nu - \frac{ie}{\hbar c}A_\nu)\psi + ((\partial_\nu + \frac{ie}{\hbar c}A_\nu)\bar{\psi})\gamma_\nu\gamma_\mu\psi].$$

Diesen Ausdruck zerlegen wir jetzt in die Beiträge mit $\mu = \nu$ und $\mu \neq \nu$ und erhalten

$$j_\mu = j_\mu^{(1)} + j_\mu^{(2)}$$

mit den beiden Anteilen

$$\begin{aligned} j_\mu^{(1)} &= \frac{ie\hbar}{2m}((\partial_\mu\bar{\psi})\psi - \bar{\psi}(\partial_\mu\psi)) - \frac{e^2}{mc}A_\mu\bar{\psi}\psi \\ j_\mu^{(2)} &= \frac{ie\hbar}{2m}[-\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_\nu\partial_\nu\psi + (\partial_\nu\bar{\psi})\gamma_\nu\gamma_\mu\psi + \frac{ie}{\hbar c}A_\nu\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_\nu\psi + \frac{ie}{\hbar c}A_\nu\bar{\psi}\gamma_\nu\gamma_\mu\psi]_{\nu \neq \mu} \\ &= -\frac{e\hbar}{2m}\partial_\nu(\bar{\psi}\sigma_{\nu\mu}\psi). \end{aligned}$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall haben wir damit eine Zerlegung des Viererstroms in den Bahnstrom und den Spinstrom (Gordon-Zerlegung), wobei der Spinstrom die σ -Matrizen enthält. Man beachte hier, dass die volle Viererstromdichte $j_\mu(x)$ das Viererpotential nicht enthält und vollständig durch den Spinor $\psi(x)$ am selben Punkt festgelegt ist. Die beiden Anteile $j_\mu^{(1)}(x)$ und $j_\mu^{(2)}(x)$ enthalten Ableitungen des Spinors und (im Falle des Bahnanteils) das Viererpotential.

Die Kopplung des Spinterms $j_\mu^{(2)}$ an das elektromagnetische Feld im Hamiltonoperator liefert im nichtrelativistischen Grenzfall genau den Zeeman-Term:

$$\begin{aligned} H_{\text{ww}} &= -\frac{1}{c} \int d^3r A_\mu j_\mu^{(2)} = \frac{e\hbar}{2mc} \int d^3r A_\mu \partial_\nu (\bar{\psi} \sigma_{\nu\mu} \psi) = -\frac{e\hbar}{2mc} \int d^3r (\bar{\psi} \sigma_{\nu\mu} \psi) \partial_\nu A_\mu \\ &= -\frac{e\hbar}{4mc} \int d^3r (\bar{\psi} \sigma_{\nu\mu} \psi) (\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu) \sim -\frac{e\hbar}{2mc} \int d^3r \mathbf{B} \psi_A^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi_A. \end{aligned}$$

Hier wurde zuletzt der Spinor im nichtrelativistischen Grenzfall durch seine große Komponente ersetzt. Dabei brauchte man

$$\Sigma_k = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix}, \quad \alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{\nu\mu} = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_3 & -\Sigma_2 & \alpha_1 \\ -\Sigma_3 & 0 & \Sigma_1 & \alpha_2 \\ \Sigma_2 & -\Sigma_1 & 0 & \alpha_3 \\ -\alpha_1 & -\alpha_2 & -\alpha_3 & 0 \end{pmatrix}.$$

Man sieht, dass $\bar{\psi} \Sigma_k \psi$ immer groß ist, weil es einen in der großen Komponente quadratischen Term enthält, während $\bar{\psi} \alpha_k \psi$ immer klein ist, weil es linear in der großen und der kleinen Komponente ist.

Die Matrix γ_5 spielt im Zusammenhang mit der elektromagnetischen Wechselwirkung keine Rolle. Bei der starken Wechselwirkung taucht sie in der korrekten Beschreibung des Yukawa-Mechanismus auf. Weil die Pionen Teilchen negativer Parität sind und die starke Wechselwirkung die Parität erhält, hat der Kopplungsterm invariant unter der Paritätstransformation zu sein und lautet daher

$$iG \bar{\psi}_n \gamma_5 \psi \cdot \Phi.$$

Diese Kopplung führt auf eine spinabhängige Wechselwirkung zwischen Nukleonen, die recht verschieden von der ursprünglich von Yukawa erhaltenen ist. Insbesondere die Tensorkraft zwischen Nukleonen findet hierdurch ihre Erklärung.

Eine besonders wichtige Rolle spielt die Matrix γ_5 für die Beschreibung der schwachen Wechselwirkung. Sie kann nämlich zu einer Zerlegung des Neutrino-feldes in links- und rechtshändige Anteile benutzt werden. Wir definieren dazu die Operatoren

$$P_+ \doteq \frac{1}{2}(1 + \gamma_5) \quad \text{und} \quad P_- \doteq \frac{1}{2}(1 - \gamma_5).$$

Wegen $P_\pm^\dagger = P_\pm$, $P_\pm^2 = \frac{1}{4}(1 \pm \gamma_5)^2 = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5) = P_\pm$ und $P_+ + P_- = 1$ sind sie komplementäre Projektoren. Wir zerlegen den Spinor in

$$\psi = P_+ \psi + P_- \psi = \psi_+ + \psi_-.$$

Wegen $P_+ \gamma_\mu = \gamma_\mu P_-$ ($\mu = 1, \dots, 4$) gilt mit $\psi_+^\dagger = \psi^\dagger P_+$ und $\psi_-^\dagger = \psi^\dagger P_-$ schließlich $\bar{\psi}_+ = \bar{\psi} P_-$ und $\bar{\psi}_- = \bar{\psi} P_+$. Daher folgt

$$\bar{\psi} \psi = \bar{\psi} (P_+ + P_-)^2 \psi = \bar{\psi} (P_+^2 + P_-^2) \psi = \bar{\psi}_- \psi_+ + \bar{\psi}_+ \psi_-$$

und

$$\bar{\psi} \gamma_\mu \psi = \bar{\psi} \gamma_\mu (P_+ + P_-)^2 \psi = \bar{\psi} (P_- \gamma_\mu P_+ + P_+ \gamma_\mu P_-) \psi = \bar{\psi}_+ \gamma_\mu \psi_+ + \bar{\psi}_- \gamma_\mu \psi_-.$$

Daher sind die \pm -Anteile des Spinors in der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_D = -c\hbar[\bar{\psi}_+\gamma_\mu\partial_\mu\psi_+ + \bar{\psi}_-\gamma_\mu\partial_\mu\psi_-] - mc^2(\bar{\psi}_-\psi_+ + \bar{\psi}_+\psi_-)$$

im kinetischen Term separiert, im Massenterm jedoch gemischt.

Zur Rechtfertigung der Interpretation von P_+ und P_- berechnen wir jetzt deren Wirkung auf die freien Spinoren. Man findet folgende Relationen ($s \doteq pc/(|E|+mc^2)$):

$$(1 \pm \gamma_5)u^{(++)} = (1 \mp s) \begin{pmatrix} \chi_+ \\ \mp\chi_+ \end{pmatrix}, \quad (1 \pm \gamma_5)u^{(+-)} = (1 \pm s) \begin{pmatrix} \chi_- \\ \mp\chi_- \end{pmatrix},$$

$$(1 \pm \gamma_5)u^{(-+)} = (1 \pm s) \begin{pmatrix} \mp\chi_+ \\ \chi_+ \end{pmatrix}, \quad (1 \pm \gamma_5)u^{(--) } = (1 \mp s) \begin{pmatrix} \mp\chi_- \\ \chi_- \end{pmatrix}.$$

Daraus lesen wir ab, dass im für Neutrinos relevanten Grenzfall $m \rightarrow 0$, $s \rightarrow 1$

$$P_+u^{(++)} = P_+u^{(--) } = 0 \quad \text{und} \quad P_-u^{(+-)} = P_-u^{(-+)} = 0.$$

Daher projiziert der Operator P_- für positive Energien auf rechtshändige, für negative Energien auf linkshändige Zustände (und der Operator P_+ natürlich umgekehrt).

Nach diesen Erläuterungen kann man das Auftauchen der Matrix γ_5 im Kopplungsterm für die schwache Wechselwirkung verstehen. Weil man weiß, dass nur die linkshändigen Ströme dort an die Eichfelder koppeln, wird die schwache Wechselwirkung durch die Ströme

$$j_\mu^{\text{schw}} = iec\bar{\psi}\gamma_\mu(1 + \gamma_5)\psi$$

beschrieben.

14. Quantisierung des Diracfeldes

Grundlage der Diractheorie ist die kovariante Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_D = -c\hbar \bar{\psi} \gamma_\mu \partial_\mu \psi - mc^2 \bar{\psi} \psi.$$

Aus \mathcal{L}_D leiten wir mittels des üblichen Verfahrens die Hamiltondichte \mathcal{H}_D ab. Der zu $\partial\psi/\partial t$ kanonisch konjugierte Impuls ist der Zeilenspinor

$$\pi \doteq \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial\psi/\partial t)} = i\hbar \bar{\psi} \gamma_4 = i\hbar \psi^\dagger$$

und es ergibt sich mit $\gamma_4 \gamma_k = -i\alpha_k$, $\gamma_4 = \beta$ und H_D aus Abschnitt 9

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_D &= \pi \frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathcal{L}_D = i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} + c\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial(ict)} + c\hbar \bar{\psi} \gamma_k \partial_k \psi + mc^2 \bar{\psi} \psi \\ &= \psi^\dagger (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2 \beta) \psi = \psi^\dagger H_D \psi. \end{aligned}$$

Außerdem betrachten wir die Operatoren für die elektrische Ladung

$$Q = e \int d^3r \psi^\dagger \psi,$$

den Impuls

$$\mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \int d^3r \psi^\dagger \nabla \psi,$$

und den Spin

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \int d^3r \psi^\dagger \boldsymbol{\Sigma} \psi.$$

Aufgrund der Vollständigkeit der früher angegebenen Eigenbasis für freie Teilchen können wir eine beliebige Lösung der Diracgleichung folgendermaßen entwickeln:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{r=1}^4 \sqrt{\frac{mc^2}{|E_{\mathbf{p}}|}} b_{\mathbf{p}}^{(r)} u^{(r)}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - E_{\mathbf{p}}^{(r)} t)/\hbar}$$

mit Entwicklungskoeffizienten $b_{\mathbf{p}}^{(r)}$ und kovariant normierten Spinoren $u^{(r)}$. Die Basiseigenfunktionen seien hierbei Eigenfunktionen der Helizität.

Es gibt eine Reihe von Gründen, in Analogie zum elektromagnetischen Feld das klassische Diracfeld $\psi(\mathbf{r}, t)$ durch einen Operator zu ersetzen (zweite Quantisierung). Es wird sich zeigen, dass man dadurch mehrere Probleme gleichzeitig lösen kann.

Wir wollen die Quantisierung so vornehmen, dass die Antisymmetrie der Zustände unter Teilchenvertauschung und das Pauliverbot folgen. Dieses Ziel wird durch die früher schon erwähnte Jordan–Wigner–Quantisierung erreicht, bei der Erzeuger b^\dagger und Vernichter b eingeführt werden, die Antivertauschungsregeln erfüllen:

$$\{b_{\mathbf{p}}^{(r)}, b_{\mathbf{q}}^{(s)\dagger}\} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \delta_{rs}, \quad \{b_{\mathbf{p}}^{(r)}, b_{\mathbf{q}}^{(s)}\} = 0.$$

Ausgehend von einem Vakuumzustand $|0\rangle$ mit der Eigenschaft

$$b_{\mathbf{p}}^{(r)} |0\rangle = 0$$

erzeugt man eine Basis des Hilbertraums, indem man beliebige Produkte von Erzeugern anwendet, jedoch jeden wegen $(b_{\mathbf{p}}^{(r)\dagger})^2 = 0$ höchstens einmal:

$$|\{n_{\mathbf{p}}^{(r)}\}\rangle = \prod_{\mathbf{p}, r} (b_{\mathbf{p}}^{(r)\dagger})^{n_{\mathbf{p}}^{(r)}} |0\rangle.$$

Zur Rechtfertigung dieses Quantisierungsverfahrens berechnen wir die folgenden Operatoren:

(1) den Hamiltonoperator (beachte hier $H_D\psi = E\psi$)

$$\hat{H} = \int d^3r \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{p}} |E_{\mathbf{p}}| [b_{\mathbf{p}}^{(1)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(1)} + b_{\mathbf{p}}^{(2)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(2)} - b_{\mathbf{p}}^{(3)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(3)} - b_{\mathbf{p}}^{(4)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(4)}],$$

(2) die Ladung

$$\hat{Q} = e \sum_{\mathbf{p}} \sum_{r=1}^4 b_{\mathbf{p}}^{(r)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(r)},$$

(3) den Impuls

$$\hat{P} = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{r=1}^4 \mathbf{p} b_{\mathbf{p}}^{(r)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(r)},$$

(4) die Helizität

$$\hat{h} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}/p = \frac{\hbar}{2} \sum_{\mathbf{p}} [b_{\mathbf{p}}^{(1)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(1)} - b_{\mathbf{p}}^{(2)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(2)} + b_{\mathbf{p}}^{(3)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(3)} - b_{\mathbf{p}}^{(4)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(4)}].$$

Es stellt sich nun das Problem, die Zustände mit negativer Energie zu interpretieren. Der oben eingeführte Vakuumzustand ist ja nicht der Zustand tiefster Energie. Dieses Problem wird durch die sogenannte Löchertheorie gelöst. Es handelt sich hierbei um eine Umformulierung, die uns heute z.B. durch die Halbleiterphysik sehr geläufig ist. Wir wählen als neues Vakuum $|\text{vak}\rangle$ den Zustand im Hilbertraum mit der tiefsten Energie, d.h. den Zustand, in dem alle Einteilchenzustände negativer Energie (einfach) besetzt sind. Dieser Zustand hätte zwar nach Maßgabe des oben definierten Hamiltonoperators die Energie $-\infty$, aber wir können uns auf den Standpunkt stellen, dass die Wahl des Energienullpunktes eine Frage der Konvention ist.

Die Vernichtung eines Elektrons (negativer Energie) mit Impuls \mathbf{p} , Helizität h und Ladung $e (= -|e|)$ in diesem neuen Vakuum erhöht die Energie um den Betrag $E_{\mathbf{p}} > 0$, ändert den Impuls um $-\mathbf{p}$, die Helizität um $-h$ und die Ladung um $-e = |e|$. Wir können diese Vernichtung daher auch als die Erzeugung eines Teilchens - des Positrons - mit positiver Energie, Impuls $-\mathbf{p}$, Helizität $-h$ und Ladung $|e|$ identifizieren.

Zur formalen Fixierung dieser Interpretation führen wir eine kanonische Transformation von den Fermionenoperatoren $b_{\mathbf{p}}^{(r)}$ zu neuen Operatoren $c_{\mathbf{p}}^{(r)}$ (Teilchen-Loch-Transformation) durch:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{p}}^{(1)} &= b_{\mathbf{p}}^{(1)}, & c_{\mathbf{p}}^{(2)} &= b_{\mathbf{p}}^{(2)} \\ c_{\mathbf{p}}^{(3)} &= -b_{-\mathbf{p}}^{(4)\dagger}, & c_{\mathbf{p}}^{(4)} &= b_{-\mathbf{p}}^{(3)\dagger}. \end{aligned}$$

(Das Minuszeichen in der Definition von $c_{\mathbf{p}}^{(3)}$ wurde gewählt, damit alle Komponenten des Spinoperators \mathbf{S} die übliche Gestalt bewahren.)

Eine solche Vertauschung von Teilchen und Löchern ist kanonisch nur für Fermionen, nicht für Bosonen. Wir erkennen hier, dass es nicht möglich wäre, das Diracfeld bosonisch zu quantisieren. Damit verstehen wir eine Teilaussage des Paulischen Spin-Statistik-Theorems.

Die Teilchenzahloperatoren werden bei der obigen kanonischen Transformation für $r = 3, 4$ wie folgt transformiert:

$$n_{\mathbf{p}}^{(3)} \doteq b_{\mathbf{p}}^{(3)\dagger} b_{\mathbf{p}}^{(3)} = c_{-\mathbf{p}}^{(4)} c_{-\mathbf{p}}^{(4)\dagger} = 1 - c_{-\mathbf{p}}^{(4)\dagger} c_{-\mathbf{p}}^{(4)} \doteq 1 - \tilde{n}_{-\mathbf{p}}^{(4)}$$

und analog

$$n_{\mathbf{p}}^{(4)} = 1 - \tilde{n}_{-\mathbf{p}}^{(3)}.$$

Das neue Vakuum ist durch die Eigenschaft

$$c_{\mathbf{p}}^{(r)} |\text{vak}\rangle = 0$$

charakterisiert. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{p}} |E_{\mathbf{p}}| \sum_{r=1}^4 \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(r)} && (-2 \sum_{\mathbf{p}} |E_{\mathbf{p}}| \text{ wurde ignoriert}), \\ \hat{Q} &= e \sum_{\mathbf{p}} [\tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(1)} + \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(2)} - \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(3)} - \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(4)}] && (+2e \sum_{\mathbf{p}} 1 \text{ wurde ignoriert}), \\ \hat{P} &= \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \sum_{r=1}^4 \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(r)}, \\ \hat{h} &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\mathbf{p}} [\tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(1)} - \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(2)} + \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(3)} - \tilde{n}_{\mathbf{p}}^{(4)}]. \end{aligned}$$

Wir benennen die Basisspinoren analog zu den Feldoperatoren von u nach v um:

$$\begin{aligned} v^{(1)}(\mathbf{p}) &= u^{(1)}(\mathbf{p}), & v^{(2)}(\mathbf{p}) &= u^{(2)}(\mathbf{p}) \\ v^{(3)}(\mathbf{p}) &= -u^{(4)}(-\mathbf{p}), & v^{(4)}(\mathbf{p}) &= u^{(3)}(-\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Damit lautet der quantisierte Feldoperator schließlich (im Heisenbergbild)

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sqrt{\frac{mc^2}{|E_{\mathbf{p}}|}} [(c_{\mathbf{p}}^{(1)} v^{(1)}(\mathbf{p}) + c_{\mathbf{p}}^{(2)} v^{(2)}(\mathbf{p})) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - E_{\mathbf{p}}t)/\hbar} \\ &\quad + (c_{\mathbf{p}}^{(3)\dagger} v^{(3)}(\mathbf{p}) + c_{\mathbf{p}}^{(4)\dagger} v^{(4)}(\mathbf{p})) e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r} - |E_{\mathbf{p}}|t)/\hbar}]. \end{aligned}$$

Zum Abschluß dieses Abschnitts analysieren wir noch die Bedeutung der Kopplung des quantisierten Diracfeldes an das elektromagnetische Feld. Mit der eichinvarianten Ableitung $D_{\mu} = \partial_{\mu} - \frac{ie}{\hbar c} A_{\mu}$ lautet der Kopplungsterm in der Lagrangedichte \mathcal{L}_{D}

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = ie \bar{\psi} \gamma_{\mu} A_{\mu} \psi$$

und die zugehörige Hamiltondichte ist

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -\mathcal{L}_{\text{int}} = -ie\bar{\psi}\gamma_{\mu}A_{\mu}\psi.$$

Dieser Operator hat hinsichtlich des elektromagnetischen Feldes die Wirkung, dass er ein Photon vernichtet oder erzeugt. Seine Wirkung auf die Fermionen enthält die folgenden vier verschiedenen Prozesse:

- (1) Vernichtung und Erzeugung eines Elektrons (Elektronstreuung),
- (2) Vernichtung und Erzeugung eines Positrons (Positronstreuung),
- (3) Vernichtung eines Elektrons und eines Positrons (Paarvernichtung),
- (4) Erzeugung eines Elektrons und eines Positrons (Paarerzeugung).

Wir haben somit gesehen, wie die Jordan–Wigner–Quantisierung des Diracfeldes zur Vorhersage des Positrons geführt hat und wie auf sehr natürliche Weise Fermionenvernichtungs- und -erzeugungsprozesse in der Theorie auftauchen.

15. Bemerkungen zur Quantisierung des Klein–Gordon–Feldes

In der vorliegenden Vorlesung haben wir uns auf die Quantisierung des Maxwellfeldes und des Diracfeldes, d.h. auf die Quantisierung von Feldern mit Spin 1 und mit Spin 1/2 konzentriert. Dieser abschließende Abschnitt enthält einige Bemerkungen in Bezug auf die Quantisierung des Klein–Gordon–Feldes, d.h. von Feldern mit Spin 0.

Die erste Bemerkung betrifft die Hamiltondichte des Klein–Gordon–Feldes. Die Klein–Gordon–Gleichung hat wie die Diracgleichung Lösungen mit positiver und negativer Energie. Es liegt nahe zu fragen, ob dies nicht auf ähnliche Probleme wie beim Diracfeld führt, die nur durch eine Löchertheorie gelöst werden können. Tatsächlich treten solche Probleme nicht auf, weil sich herausstellt, dass die Hamiltondichte des Klein–Gordon–Feldes positiv definit ist. Zu

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}(\partial_\mu\Phi\partial_\mu\Phi + \mu^2\Phi^2)$$

gehört nämlich

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 + (\nabla\Phi)^2 + \mu^2\Phi^2\right].$$

Diese Eigenschaft zeigt, dass es möglich ist, den Hilbertraum eines reellen Klein–Gordon–Feldes auf die Lösungen der Klein–Gordon–Gleichung mit positiver Energie einzuschränken. Die Quantisierung dieses Feldes, das zur Beschreibung von neutralen Teilchen mit Spin 0 wie dem π_0 -Meson, die mit ihrem Antiteilchen identisch sind, benutzt werden kann, erfolgt dann sehr analog zur Quantisierung des Maxwellfeldes.

Entsprechend erhält man für das komplexwertige Klein–Gordon–Feld mit

$$\mathcal{L} = -(\partial_\mu\Phi^*\partial_\mu\Phi + \mu^2\Phi^*\Phi)$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial\Phi^*}{\partial t}\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \nabla\Phi^*\nabla\Phi + \mu^2\Phi^*\Phi.$$

Auch hier kann die Quantisierung deshalb in analoger Weise erfolgen.

Historisch gesehen gibt es für das komplexwertige Klein–Gordon–Feld eine Schwierigkeit, die in den Jahren 1925 bis 1934 die Entwicklung der Theorie behinderte. Für die Beschreibung des Elektrons kommt die Klein–Gordon–Gleichung ja deshalb nicht in Frage, weil sie den Spin nicht enthält. Diese Gleichung wurde jedoch für einige Zeit total als mögliche Bewegungsgleichung für ein quantenmechanisches System verworfen, weil sie keine positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte besitzt.

Wir erinnern uns an die Situation in der Schrödingertheorie. Hier gibt es die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho = |\psi|^2 \geq 0$$

und die Wahrscheinlichkeitsflussdichte

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*),$$

die die Kontinuitätsgleichung

$$\dot{\rho} + \nabla\mathbf{j} = 0$$

erfüllen. Dies garantiert die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit $\int d^3r \rho$. Diese Kontinuitätsgleichung kann sogar mittels $j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho)$ kovariant in der Form

$$\partial_\mu j_\mu = 0$$

geschrieben werden.

Zur Klein–Gordon–Gleichung

$$\hbar^2 \square \Phi - m^2 c^2 \Phi = 0$$

für ein komplexes Feld Φ hatten wir früher die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j_\mu = 0$$

mit

$$j_\mu = -iA(\Phi^* \partial_\mu \Phi - \Phi \partial_\mu \Phi^*)$$

hergeleitet. Im nichtrelativistischen Grenzfall folgt aus dieser Kontinuitätsgleichung tatsächlich die Schrödingersche Kontinuitätsgleichung. Wir müssen nur die Verschiebung des Energienullpunktes (für positive Energien)

$$E_{\text{rel}} = mc^2 + E_{\text{nrel}} \quad (|E_{\text{nrel}}| \ll mc^2)$$

beachten. Es gilt $\Phi \approx \psi e^{-imc^2 t/\hbar}$ und daher

$$j_4 = -iA(\Phi^* \frac{\partial}{ic\partial t} \Phi - \Phi \frac{\partial}{ic\partial t} \Phi^*) \approx \frac{2imc}{\hbar} A |\psi|^2 \doteq ic\rho$$

und

$$\mathbf{j} = -iA(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*).$$

Mit $A = \frac{\hbar}{2m}$ sind dies die Ausdrücke im Schrödingerfall.

Soweit ist dies erfreulich. Als Problem wurde jedoch angesehen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte des Klein–Gordon–Feldes

$$\rho = j_4/ic = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t})$$

nicht definit ist. Im Gegensatz zur Schrödingergleichung ist die Klein–Gordon–Gleichung in der Zeitableitung von zweiter Ordnung und erlaubt deshalb Lösungen positiver wie negativer Energie

$$\Phi = u(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar} \quad \text{und} \quad \Phi^* = u^*(\mathbf{x}) e^{iEt/\hbar}.$$

Erst 1934 entfiel dieser Einwand, als Pauli und Weißkopf die Kontinuitätsgleichung des Klein–Gordon–Feldes als Gleichung für die Ladungsdichte interpretierten ($j_\mu \rightarrow e j_\mu$), wobei Φ mit $E > 0$ als Teilchen der Ladung e und Φ^* als Antiteilchen der Ladung $-e$ angesehen werden, wie wir das früher schon besprochen haben. Damit wird einfach $\rho = \rho_+ - \rho_-$ die Differenz der Dichten oder die Summe der Ladungsdichten.

Mit diesen Bemerkungen, die deutlich machen sollten, dass einer bosonischen Quantisierung reeller wie komplexer Klein–Gordon–Felder nichts im Wege steht, wollen wir es hier bewenden lassen.

16. Struktur nichtabelscher Eichtheorien

In Kapitel 3 hatten wir das Prinzip der lokalen Eichinvarianz zur Begründung der Existenz des elektromagnetischen Feldes und der Struktur seiner Kopplung an geladene Teilchenfelder beschrieben. Mittels dieses Prinzips kann man in analoger Weise die anderen in der Natur vorhandenen Wechselwirkungen erfassen. Wir wollen in diesem Kapitel die Struktur der Lagrangedichte für die starke Wechselwirkung zwischen Quarks beleuchten, der Chromodynamik.

Ausgangspunkt der Theorie ist die Erkenntnis, dass jedes Quark eine Farbquantenzahl trägt, nach der es in drei Farben vorkommt (blau, rot, grün), und dass die Lagrangedichte des Quarks unter beliebigen unitären Transformationen in dem von den Basiszuständen ψ_b, ψ_r, ψ_g aufgespannten Farb-Hilbertraum lokal eichinvariant ist. Die dementsprechende Diracsche Lagrangedichte ist die Summe der Lagrangedichten der drei Quarkfelder und schreibt sich unter Benutzung des dreidimensionalen Farbvektors $\psi = (\psi_b, \psi_r, \psi_g)$ kompakt als

$$\mathcal{L}_D = -c\hbar \bar{\psi} \gamma_\mu \partial_\mu \psi - mc^2 \bar{\psi} \psi = - \sum_{f=b,r,g} (c\hbar \bar{\psi}_f \gamma_\mu \partial_\mu \psi_f + mc^2 \bar{\psi}_f \psi_f).$$

Da die hier maßgebliche Eichgruppe aller speziellen unitären Transformationen $SU(3)$ nicht jedem Physiker geläufig ist, werden wir in diesem Kapitel nur eine Karikatur der Chromodynamik darstellen, indem wir die richtige Eichgruppe $SU(3)$ durch die von den Rotationen im dreidimensionalen Raum jedem Physiker gut bekannte Drehgruppe $SO(3)$ der speziellen reell orthogonalen Transformationen ersetzen, die eine Untergruppe der $SU(3)$ ist. Entscheidend ist nur, dass die betrachtete Eichgruppe nicht miteinander vertauschende Transformationen enthält, also nichtabelsch ist, weil dies der entscheidende Gesichtspunkt ist, der für die strukturellen Unterschiede im Vergleich zum auf der abelschen Eichgruppe $U(1)$ beruhenden Elektromagnetismus verantwortlich ist.

Wir erinnern kurz an die Eigenschaften dreidimensionaler orthogonaler Matrizen $R \in SO(3)$. Wenn man sie durch eine Exponentialfunktion $R = \exp[I]$ darstellt, sind die Exponenten I wegen $R^{-1} = \exp[-I] = R^t = \exp[I^t]$ antisymmetrisch, $I^t = -I$. Die antisymmetrischen Matrizen I bilden einen dreidimensionalen reellen Vektorraum, den man durch die drei Basismatrizen

$$I^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I^3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

aufspannen kann, deren Matrixelemente auch kurz durch $I_{kl}^i = -\epsilon_{ikl}$ beschrieben sind und die man die infinitesimalen Erzeugenden der Drehgruppe $SO(3)$ nennt. Die Quadrate dieser Basismatrizen sind einfache diagonale Matrizen

$$(I^1)^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (I^2)^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (I^3)^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Daher erkennt man leicht, dass durch I^i beschriebene Rotationen Drehungen um die i -Achse sind, z.B.

$$\exp[I^1 \chi^1] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \chi^1 & -\sin \chi^1 \\ 0 & \sin \chi^1 & \cos \chi^1 \end{pmatrix}.$$

Für später halten wir noch die leicht nachzurechnende Identität

$$\text{Spur}(I^i I^j) = -2 \delta_{ij}$$

fest.

Da Drehungen um verschiedene Achsen nicht miteinander vertauschen, ist die Gruppe $\text{SO}(3)$ eine nichtabelsche Gruppe. Die Struktur dieser Gruppe kann man durch die Vertauschungsrelationen ihrer infinitesimalen Erzeugenden charakterisieren, die durch die Lie-Algebra

$$[I^i, I^j] \equiv I^i I^j - I^j I^i = \epsilon_{ijk} I^k \quad (\text{Summationskonvention für Doppelindex } k)$$

gegeben sind. Die Koeffizienten ϵ_{ijk} , die die Linearkombination von Basismatrizen bestimmen, durch die die Kommutatoren sich darstellen lassen, heißen die Strukturkonstanten der Gruppe und werden eine zentrale Rolle in der Eichtheorie spielen. Die Zahl der linear unabhängigen Erzeugenden, hier gleich 3, nennt man die Dimension der Gruppe. Sie sollte nicht mit der Dimension der Matrizen I verwechselt werden, die im Falle der Gruppe $\text{SO}(3)$ zufällig ebenfalls drei ist. Die Matrizen der wirklichen Farbgruppe $\text{SU}(3)$ lassen sich als $R = \exp[iI]$ darstellen, wo die dreidimensionalen Matrizen I hermitesch und spurfrei sein müssen, damit die Matrix R unitär und ihre Determinante gleich 1 ist. Der Vektorraum solcher Matrizen und damit die Gruppe $\text{SU}(3)$ haben daher die Dimension 8.

Wir fordern nun, dass die Lagrangedichte nicht nur invariant unter globalen Eichtransformationen $R = \exp[I^i \chi^i]$ ist, sondern auch unter lokalen Eichtransformationen $R(\mathbf{x}) = \exp[I^i \chi^i(\mathbf{x})]$, bei denen die Drehwinkel χ^i Funktionen der Raumzeitkoordinaten \mathbf{x} sind. Da der Diracspinor sich wie $\psi' = R(\mathbf{x})\psi$ und der adjungierte Spinor sich wie $\bar{\psi}' = \bar{\psi} R^t(\mathbf{x}) = \bar{\psi} R^{-1}(\mathbf{x})$ transformieren, ist der Massenterm in der Lagrangedichte auch hier lokal eichinvariant, $\bar{\psi}' R^t(\mathbf{x}) R(\mathbf{x}) \psi = \bar{\psi} \psi$. Für den kinetischen Term gilt das aber wieder nicht, weil die Ableitungen ∂_μ auf die Eichmatrix $R(\mathbf{x})$ wirken. Eine kurze Rechnung ergibt

$$\partial_\mu \psi' = \partial_\mu (R(\mathbf{x})\psi) = R(\mathbf{x})\partial_\mu \psi + (\partial_\mu R(\mathbf{x}))\psi = R(\mathbf{x})[\partial_\mu + R^t(\mathbf{x})(\partial_\mu R(\mathbf{x}))]\psi.$$

Daher muss man die Ableitungen ∂_μ in Analogie zum Vorgehen beim Elektromagnetismus durch kovariante Ableitungen D_μ ersetzen, bei denen der letzte Term in der obigen Rechnung durch Eichfelder kompensiert wird. Hier ist der Zusatzterm $R^t(\mathbf{x})(\partial_\mu R(\mathbf{x}))$ allerdings eine Matrix. Diese Matrix ist jedoch wegen $R^t R = 1 \Rightarrow R^t(\partial_\mu R) + (\partial_\mu R^t)R = 0 \Rightarrow R^t(\partial_\mu R) = -(\partial_\mu R^t)^t$ antisymmetrisch und lässt sich daher als Linearkombination der erzeugenden Matrizen I^i darstellen. Für die kovariante Ableitung kann man deshalb den Ansatz

$$D_\mu = \partial_\mu - g I^i A_\mu^i$$

machen, durch den 3 Eichfelder A_μ^i eingeführt werden. Wir erkennen, dass die Zahl der benötigten Eichfelder gleich der Dimension der Eichgruppe ist. Der Parameter g ist eine Kopplungskonstante und kann als Farbladung interpretiert werden.

Die Eichinvarianz des kinetischen Terms in der Lagrangedichte ergibt sich nun offensichtlich aus der Forderung

$$D'_\mu \psi' \equiv D'_\mu R \psi \doteq R D_\mu \psi, \quad \text{d.h.} \quad D'_\mu \doteq R D_\mu R^t,$$

aus der man das Transformationsverhalten der Eichfelder unter der Eichtransformation ableiten kann. Wir erhalten

$$D'_\mu \psi' = (\partial_\mu - gI^i A_\mu^{i'}) R \psi = R[\partial_\mu - R^t gI^i A_\mu^{i'} R + R^t (\partial_\mu R)] \psi \doteq R[\partial_\mu - gI^i A_\mu^i] \psi,$$

woraus wir die Eichtransformation

$$I^i A_\mu^{i'} = R[I^i A_\mu^i + \frac{1}{g} R^t (\partial_\mu R)] R^t$$

ablesen, die die transformierten Eichfelder $A_\mu^{i'}$ durch Koeffizientenvergleich eindeutig bestimmt, weil alle Matrizen in dieser Gleichung antisymmetrisch sind.

Um eine explizite Formel für die Eichtransformation zu erhalten, werden wir die obige Gleichung für eine infinitesimale Eichtransformation $R = 1 + I^i \chi^i + O(\chi^2)$ bis zur ersten Ordnung in χ auswerten. Wir erhalten

$$\begin{aligned} I^i A_\mu^{i'} &= (1 + I^j \chi^j)(I^i A_\mu^i)(1 - I^k \chi^k) + \frac{1}{g} I^i \partial_\mu \chi^i + O(\chi^2) \\ &= I^i A_\mu^i + \frac{1}{g} I^i \partial_\mu \chi^i + [I^j, I^i] A_\mu^i \chi^j + O(\chi^2) \\ &= I^i A_\mu^i + \frac{1}{g} I^i \partial_\mu \chi^i + \epsilon_{jik} I^k A_\mu^i \chi^j + O(\chi^2) \end{aligned}$$

und entnehmen daraus die infinitesimale Eichtransformation

$$A_\mu^{i'} = A_\mu^i + \frac{1}{g} \partial_\mu \chi^i + \epsilon_{ijk} A_\mu^k \chi^j + O(\chi^2).$$

Bemerkenswert ist hierbei, dass abweichend vom Fall abelscher Eichgruppen die Eichfelder durch die nichtabelsche Eichtransformation vermischt werden. Die Vermischung wird durch die Strukturkonstanten der Eichgruppe bestimmt.

Nachdem wir dasjenige Eichverhalten für die Eichfelder identifiziert haben, das die Ableitung D_μ kovariant macht, müssen wir noch die Lagrangedichte finden, die die Eichfelder dynamisch macht. Hierbei können wir nicht einfach auf die Feldstärketensoren $\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ aus der Elektrodynamik zurückgreifen, weil diese aufgrund der Vermischung der Eichfelder nicht mehr eichinvariant sind. Das allgemeine Konstruktionsprinzip zur Identifikation geeigneter Feldstärketensoren, das auch für nichtabelsche Eichgruppen zum Ziel führt, beruht auf der Bildung der Kommutatortensoren

$$C_{\mu\nu} = [D_\mu, D_\nu]$$

aus kovarianten Ableitungen. Wegen ihrer Kommutatorstruktur enthalten diese Tensoren keine Ableitungen ∂_λ mehr, die auf rechts davon stehende Raumzeitfunktionen wirken könnten. Sie transformieren sich zudem kovariant unter Eichtransformationen,

$$C'_{\mu\nu} = [D'_\mu, D'_\nu] = R[D_\mu, D_\nu]R^t = RC_{\mu\nu}R^t.$$

Die explizite Berechnung der Kommutatoren liefert

$$\begin{aligned} C_{\mu\nu} &= (\partial_\mu - gI^i A_\mu^i)(\partial_\nu - gI^j A_\nu^j) - (\partial_\nu - gI^j A_\nu^j)(\partial_\mu - gI^i A_\mu^i) \\ &= -gI^j \partial_\mu A_\nu^j + gI^i \partial_\nu A_\mu^i + g^2 [I^i, I^j] A_\mu^i A_\nu^j \\ &= -gI^i \underbrace{[\partial_\mu A_\nu^i - \partial_\nu A_\mu^i - g\epsilon_{ijk} A_\mu^j A_\nu^k]}_{=F_{\mu\nu}^i}. \end{aligned}$$

Die hierdurch gewonnenen antisymmetrischen Feldstärketensoren $F_{\mu\nu}^i$ sind abweichend von denen in der Elektrodynamik nicht mehr linear in den Eichfeldern, sondern enthalten quadratische Terme in den Eichfeldern, die wiederum durch die Strukturkonstanten der Eichgruppe bestimmt sind. Die einzelnen $F_{\mu\nu}^i$ selbst sind auch nicht eichinvariant, sondern transformieren sich wegen der Kovarianz der $C_{\mu\nu}$, aus der

$$\begin{aligned} I^i F_{\mu\nu}^{i'} &= R I^i R^t F_{\mu\nu}^i = (1 + I^j \chi^j) I^i (1 - I^k \chi^k) F_{\mu\nu}^{i'} + O(\chi^2) \\ &= I^i F_{\mu\nu}^i + [I^j, I^i] \chi^j F_{\mu\nu}^i + O(\chi^2) = I^i [F_{\mu\nu}^i + \epsilon_{ijk} \chi^j F_{\mu\nu}^k] + O(\chi^2) \end{aligned}$$

folgt, unter infinitesimalen Eichtransformationen wie

$$F_{\mu\nu}^{i'} = F_{\mu\nu}^i + \epsilon_{ijk} \chi^j F_{\mu\nu}^k + O(\chi^2).$$

Die Feldstärketensoren werden durch die Eichtransformationen also ebenfalls miteinander vermischt.

Aufgrund der Kovarianz der Kommutatoren $C_{\mu\nu}$ findet man in dem Ausdruck $\text{Spur}(C_{\mu\nu} C_{\mu\nu})$ aber nun leicht einen Lorentzskalar, der wegen $\text{Spur}(C'_{\mu\nu} C'_{\mu\nu}) = \text{Spur}(R C_{\mu\nu} R^t R C_{\mu\nu} R^t) = \text{Spur}(C_{\mu\nu} C_{\mu\nu})$ (zyklische Vertauschung der Matrizen unter der Spur) auch eichinvariant ist. Diese Invariante steht zu den Feldstärketensoren in der Beziehung

$$\text{Spur}(C_{\mu\nu} C_{\mu\nu}) = g^2 F_{\mu\nu}^i F_{\mu\nu}^j \text{Spur}(I^i I^j) = -2g^2 F_{\mu\nu}^i F_{\mu\nu}^i.$$

Die Lagrangedichte der Eichfelder kann daher in völliger Analogie zu der des Maxwellfeldes angesetzt werden, wenn nur über alle Eichfelder summiert wird.

Zusammenfassend erhalten wir damit die lorentz- und lokal eichinvariante Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = -(c\hbar \bar{\psi} \gamma_\mu D_\mu \psi + mc^2 \bar{\psi} \psi) - \frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu}^i F_{\mu\nu}^i$$

mit der kovarianten Ableitung

$$D_\mu = \partial_\mu - g I^i A_\mu^i$$

und den Feldstärketensoren

$$F_{\mu\nu}^i = \partial_\mu A_\nu^i - \partial_\nu A_\mu^i - g \epsilon_{ijk} A_\mu^j A_\nu^k.$$

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich aus dieser Lagrangedichte mittels des Hamiltonschen Prinzips durch Variation der Wirkung nach dem Diracspinor $\bar{\psi}$ und nach den Eichfeldern A_μ^i . Die Diracgleichung hat daher jetzt offenbar die Gestalt

$$\hbar \gamma_\mu D_\mu \psi + mc \psi = 0.$$

Für die Bewegungsgleichungen der Eichfelder brauchen die zum einen die Ableitung

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_\nu^i)} = -\frac{1}{4\pi} F_{\mu\nu}^i,$$

die sich in direkter Verallgemeinerung der entsprechenden Formel für das elektromagnetische Feld ergibt. Auch die Farbstromdichten der Diracfelder j_μ^i ergeben sich in enger Analogie zum Elektromagnetismus aus der Ableitung

$$\frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial A_\mu^i} = \frac{1}{c} j_\mu^i = c \hbar g \bar{\psi} \gamma_\mu I^i \psi$$

der Dirac–Lagrangedichte. Anders als in der abelschen Eichtheorie hängen in den nichtabelschen Theorien die Feldstärketensoren allerdings auch von den Eichfeldern selbst, nicht nur von deren Ableitungen ab. Wir brauchen daher die Ableitung

$$\frac{\partial F_{\mu\nu}^k}{\partial A_\kappa^i} = -g \epsilon_{ijk} (A_\nu^j \delta_{\kappa\mu} - A_\mu^j \delta_{\kappa\nu}),$$

mittels der wir schließlich die Formel

$$\frac{\partial (F_{\mu\nu}^k F_{\mu\nu}^k)}{\partial A_\kappa^i} = 4g \epsilon_{ijk} A_\mu^j F_{\mu\kappa}^k$$

erhalten. Insgesamt ergeben sich so anstelle der Maxwellgleichungen die Farbfeldgleichungen

$$\partial_\mu F_{\mu\nu}^i = -\frac{4\pi}{c} j_\nu^i + g \epsilon_{ijk} A_\mu^j F_{\mu\nu}^k.$$

Sie zeigen, dass nicht nur die Diraceteilchen Quellen des Farbfeldes sind, sondern auch die Farbfelder selbst. Während das elektromagnetische Feld keine elektrische Ladung trägt, tragen nichtabelsche Eichfelder immer selbst Farbladung. Da wegen der Antisymmetrie der Feldstärketensoren $\partial_\mu \partial_\nu F_{\mu\nu}^i = 0$ gilt, lesen wir aus den Feldgleichungen die Erhaltungssätze

$$\partial_\nu (j_\nu^i - \frac{cg}{4\pi} \epsilon_{ijk} A_\mu^j F_{\mu\nu}^k) = 0$$

ab.

Die echte Lagrangedichte der Chromodynamik hat dieselbe Struktur. Man muss nur entsprechend der Dimension der Eichgruppe $SU(3)$ acht Eichfelder (Gluonen) einführen, die infinitesimalen Erzeugenden I^i durch die der $SU(3)$ und die ϵ_{ijk} durch die Strukturkonstanten der $SU(3)$ ersetzen.

Anhang A

In diesem Anhang erläutern wir die Herleitung der Identität auf Seite 22 unten, mit der die Zerlegung des Drehimpulses des Strahlungsfeldes in einen Bahn- und einen Spinanteil gewonnen wird. Es ist ratsam, dazu eine Tensorschreibweise unter Benutzung des Levi-Civita-Symbols ϵ_{ijk} zu verwenden. Indem wir von den Beziehungen (Summationskonvention)

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k$$

und

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}$$

Gebrauch machen, erhalten wir

$$\begin{aligned} [\mathbf{x} \times (\mathbf{E}_\perp \times \mathbf{B})]_i &= \epsilon_{ijk} x_j \underbrace{(\mathbf{E}_\perp \times \mathbf{B})_k}_{=\epsilon_{klm} E_{\perp l} B_m} = \epsilon_{ijk} \cdot \underbrace{\epsilon_{klm} \cdot \epsilon_{mnr}}_{=\delta_{kn} \delta_{lr} - \delta_{kr} \delta_{ln}} \cdot x_j E_{\perp l} \partial_n A_{\perp r} \\ &= \epsilon_{ijk} x_j E_{\perp l} (\partial_k A_{\perp l} - \partial_l A_{\perp k}). \end{aligned}$$

Der erste Term in dieser Gleichung ergibt schon der ersten Term auf der rechten Seite der erstrebten Identität. Den zweiten Term formen wir mittels der Produktregel weiter um in

$$\begin{aligned} -\epsilon_{ijk} x_j E_{\perp l} \partial_l A_{\perp k} &= -\epsilon_{ijk} \partial_l [x_j E_{\perp l} A_{\perp k}] + \epsilon_{ijk} \delta_{jl} E_{\perp l} A_{\perp k} + \epsilon_{ijk} x_j A_{\perp k} \underbrace{\partial_l E_{\perp l}}_{=0} \\ &= -\epsilon_{ijk} \partial_l [x_j E_{\perp l} A_{\perp k}] + \epsilon_{ijk} E_{\perp j} A_{\perp k} \end{aligned}$$

und erhalten damit die volle Identität.

Anhang B

Die nicht normierbaren Eigenzustände des elektrischen (oder magnetischen) Feldes am Ende des Kapitels 6 kann man durch Reduktion des Gewichts großer Photonenzahlen normierbar machen. Man kann dazu z.B. die Zustände

$$|0, x\rangle_E = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(xa^{\dagger 2}/2)^n}{n!} |\text{vak}\rangle = e^{xa^{\dagger 2}/2} |\text{vak}\rangle$$

betrachten, die für $x < 1$ keine exakten Eigenzustände des elektrischen Feldes zum Eigenwert 0 mehr sind. Für das Normquadrat dieser Zustände erhält man

$${}_E\langle 0, x | 0, x \rangle_E = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)! (x/2)^{2n}}{(n!)^2} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Der Erwartungswert des elektrischen Feldes ist immer noch

$${}_E\langle 0, x | i(a - a^{\dagger}) | 0, x \rangle_E = 0.$$

Für das Schwankungsquadrat erhalten wir jedoch

$$\begin{aligned} {}_E\langle 0, x | -(a - a^{\dagger})^2 | 0, x \rangle_E &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{(4n+1)(2n)! (x/2)^{2n}}{(n!)^2} - 2 \frac{(2n+2)! (x/2)^{2n+1}}{n!(n+1)!} \right) \\ &= \frac{1-x}{(1+x)\sqrt{1-x^2}} \end{aligned}$$

und damit für den normierten Erwartungswert

$$\langle -(a - a^{\dagger})^2 \rangle_{|0, x\rangle_E} = \frac{1-x}{1+x}.$$

Zur Berechnung der mittleren Zahl der Photonen und deren Schwankung im Zustand $|0, x\rangle_E$ betrachten wir die erzeugende Funktion

$$f(s) = {}_E\langle 0, x | e^{sa^{\dagger}a} | 0, x \rangle_E = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)! (xe^s/2)^{2n}}{(n!)^2} = \frac{1}{\sqrt{1-(xe^s)^2}}.$$

Aus ihr erhält man durch Differentiation nach dem Parameter s und Normierung die mittlere Photonenzahl

$$\langle a^{\dagger}a \rangle_{|0, x\rangle_E} = f'(0)/f(0) = \frac{x^2}{1-x^2}$$

und deren Schwankungsquadrat

$$\langle (a^{\dagger}a)^2 \rangle_{|0, x\rangle_E} - \langle a^{\dagger}a \rangle_{|0, x\rangle_E}^2 = f''(0)/f(0) - (f'(0)/f(0))^2 = \frac{2x^2}{(1-x^2)^2}.$$

Man sieht, wie für $x \rightarrow 1$ die mittlere Photonenzahl und deren Schwankung beide in vergleichbarer Weise divergieren.