
Andreas Schadschneider
Quantenmechanik II

Version: 11. April 2005

Sommersemester 2002

Vorbemerkungen

Die Vorlesung baut auf der Kursvorlesung zur *Quantenmechanik* auf und diskutiert ergänzenden Stoff, der jedoch in der Praxis sehr wichtig ist. Zum einen ist dies die relativistische Quantenmechanik, insbesondere die Gleichungen von Klein/Gordon und Dirac. Relativistische Effekte sind oft auch bei Messungen von besonderer Bedeutung. Zum anderen wollen wir uns mit der Theorie der *Vielteilchensysteme* beschäftigen, die in vielen Bereichen eine wichtige Rolle spielt, z.B. der Festkörperphysik. Hier soll zunächst der Formalismus der 2. Quantisierung entwickelt werden, mit dem sich auch Prozesse beschreiben lassen, bei denen Teilchen erzeugt oder vernichtet werden. Außerdem kommt hier die Statistik der Teilchen (Bosonen vs. Fermionen) ins Spiel. Danach wollen wir untersuchen, wie sich klassische Felder quantisieren lassen. Die Kombination mit der relativistischen Quantenmechanik führt schließlich zu relativistischen Quantenfeldtheorien. Zusätzlich zur Vorlesung werden in unregelmäßigen Abständen begleitende Übungen angeboten. Diese sollen in erster Linie zur Einübung von Formalismen dienen und zum Nachdenken anregen.

Die Grundlagen des hier besprochenen Stoffes werden in vielen Standard-Lehrbüchern der Quantenmechanik diskutiert, z.B. in

- Albert Messiah: *Quantenmechanik (Band 2)*, de Gruyter (1979).

Der gesamte Stoff wird gut abgedeckt von dem relativ preiswerten Buch

- Franz Schwabl: *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*, Springer Verlag (1997).

Etwas spezieller sind die Bücher

- F.J. Ynduráin: *Relativistic Quantum Mechanics and Introduction to Field Theory*, Springer Verlag (1996)
- M. Kaku: *Quantum Field Theory*, Oxford University Press (1993)
- J.D. Bjorken, S.D. Drell: *Relativistische Quantenmechanik und Relativistische Quantenfeldtheorie*, B.I. Hochschultaschenbücher, Band 98 und 101.

Letzteres ist ein Klassiker, aber nicht mehr ganz auf dem neuesten Stand.

Weitere Literaturhinweise werden in der Vorlesung und dieser Ausarbeitung gegeben.

Für Fehlermeldungen und Verbesserungsvorschläge bin ich jederzeit dankbar. Sie können auch per email an mich (as@thp.uni-koeln.de) geschickt werden. Die jeweils aktuellste Version des Skripts ist im Internet über meine Homepage

<http://www.thp.uni-koeln.de/~as/as.html>

verfügbar.

Andreas Schadschneider

Inhaltsverzeichnis

I	Relativistische Quantenmechanik	3
I.0	Axiomatischer Aufbau der Quantenmechanik	3
I.1	Invarianzen der Schrödinger-Gleichung	4
I.2	Relativitätstheorie	7
I.3	Klein-Gordon-Gleichung	12
I.3.1	Kontinuitätsgleichung und Interpretation der Wellenfunktion	15
I.3.2	Probleme der Klein-Gordon-Gleichung	17
I.3.3	Schrödinger-Form der Klein-Gordon-Gleichung	19
I.4	Dirac-Gleichung	23
I.4.1	Kovariante Form der Dirac-Gleichung	28
I.4.2	Interpretation, freie Teilchen	31
I.4.3	Löchertheorie und Ladungskonjugation	36
I.4.4	Nichtrelativistischer Grenzfall	40
I.4.5	Relativistisches Wasserstoffproblem	43
II	Quantenfeldtheorie	49
II.1	Klassische Feldtheorie	49
II.1.1	Klassische kontinuierliche Systeme	50
II.2	Quantenmechanische Vielteilchensysteme	52
II.2.1	Systeme gleicher Teilchen	52
II.2.2	Einfache Beispiele: 2-Teilchen-Probleme	56
II.2.3	Zweite Quantisierung (Besetzungszahldarstellung)	62
II.2.4	Hartree-Fock-Näherung und homogenes Elektronengas	73
II.3	Kanonische Quantisierung eines Skalarfeldes	79
II.3.1	Das geladene Skalarfeld	87
II.4	Quantisierung des elektromagnetischen Feldes	89
II.4.1	Energie, Impuls, Drehimpuls von Teilchen und elektromagnetischen Feld	92
II.4.2	Quantisierung des Strahlungsfeldes	95
II.4.3	Teilchen- vs. Wellenaspekte	101
II.5	Quantisierung der Dirac-Gleichung	104
II.6	Wechselwirkung von Teilchen mit Strahlung	107

Kapitel I

Relativistische Quantenmechanik

I.0 Axiomatischer Aufbau der Quantenmechanik

Als kleine Erinnerung an die Vorlesung *Quantenmechanik I* wollen wir zunächst die wesentlichen Tatsachen der Quantenmechanik in kompakter Form zusammenstellen. Die Quantentheorie kann durch folgende "Axiome" charakterisiert werden:

1. Die *Zustände* eines physikalischen Systems werden durch Zustandsvektoren $|\psi\rangle$ in einem linearen (Hilbert-) Raum beschrieben.
2. Alle beobachtbaren Größen (*Observablen*) werden durch hermitesche Operatoren A dargestellt und Funktionen von Observablen durch die entsprechenden Funktionen von A .
Beispiel: Die kinetische Energie $E_{\text{kin}} \propto p^2$ wird durch das Quadrat des Impulsoperators dargestellt.
3. Meßbare Größen der Observablen sind deren *Eigenwerte*:

$$A|\psi\rangle = a_n|\psi\rangle. \quad (\text{I.0.1})$$

4. Operatoren einer Observablen lassen sich meistens durch Korrespondenz zu klassischen Größen konstruieren (Korrespondenzprinzip), indem kanonisch konjugierte Größen durch die quantenmechanischen Operatoren ersetzt werden, z.B. in der Ortsdarstellung

$$x \rightarrow \hat{x}, \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}. \quad (\text{I.0.2})$$

Alle grundlegenden kanonisch-konjugierten Operatoren erfüllen

$$[q_j, q_k] = 0, \quad [p_j, p_k] = 0, \quad [p_j, q_k] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jk}, \quad (\text{I.0.3})$$

mit dem Kommutator $[A, B] := AB - BA$.

5. Die *Messung einer Observablen* (eines Eigenwertes) bedeutet: Das System wird in einen (zu dem Eigenwert gehörigen) Eigenzustand des entsprechenden Operators versetzt. Eine unmittelbar zeitlich angeschlossenes gleiches Experiment würde den selben Eigenwert liefern.
6. Ist das System vor der Messung einer Observablen nicht in einem Eigenzustand des entsprechenden Operators, so wird die Messung nicht mit Sicherheit sondern nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit einen bestimmten Eigenwert ergeben. Der Mittelwert (Erwartungswert) wiederholter gleicher Messungen einer Observablen A im Zustand $|\psi\rangle$ ist

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad (\text{I.0.4})$$

wenn der Zustand normiert ist: $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

7. Die *zeitliche Entwicklung (Dynamik)* eines Zustandes wird durch die *Schrödinger-Gleichung*

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H |\psi\rangle} \quad (\text{I.0.5})$$

bestimmt, wobei H der Hamilton-Operator ist. Es gilt dann

$$|\psi(t)\rangle = T(t) |\psi(0)\rangle \quad (\text{I.0.6})$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator

$$T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}. \quad (\text{I.0.7})$$

Neben diesen Axiomen gibt es noch ein weiteres, das die Symmetrie der Wellenfunktionen für Systeme gleicher Teilchen beschreibt und mit dem Spin in Verbindung bringt. Wir werden darauf in Kap. II zurück kommen.

I.1 Invarianzen der Schrödinger-Gleichung

Zunächst wollen wir die Invarianzeigenschaften der Schrödinger-Gleichung untersuchen. Dazu betrachten wir ein nichtrelativistisches freies Teilchen mit dem Hamilton-Operator

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (\text{I.1.1})$$

Wir wollen nun das Verhalten unter drei verschiedenen Koordinatentransformationen untersuchen. Im einzelnen sind dies:

- 1) *Translationen*: $x' = x - a$, $y' = y$, $z' = z$, $t' = t$.

Dabei nehmen wir o.B.d.A. an, dass die Translation entlang der x -Achse des ursprünglichen¹ Systems erfolgt.

¹ungestrichene Koordinaten x, y, z, t

2) *Rotationen:* $x'_j = \sum_l a_{jl} x_l$

Drehungen sind dadurch charakterisiert, daß sie die Länge invariant lassen:

$$\sum_j x_j'^2 = \sum_j \sum_{k,l} a_{jk} a_{jl} x_k x_l \stackrel{!}{=} \sum_j x_j^2. \quad (\text{I.1.2})$$

Hieraus folgt dann²

$$\sum_j a_{jk} a_{jl} = \delta_{kl} \quad \text{und} \quad \sum_k a_{ik} a_{jk} = \delta_{ij}, \quad (\text{I.1.3})$$

wobei die zweite Identität analog abgeleitet werden kann. Faßt man die Elemente a_{jl} zu einer Matrix $\mathbb{A} = (a_{jl})$ zusammen, so kann man (I.1.3) auch kompakt schreiben als

$$\mathbb{A} \cdot \mathbb{A}^t = \mathbb{A}^t \cdot \mathbb{A} = \mathbb{I}. \quad (\text{I.1.4})$$

3) *Galilei-Transformationen:* Das gestrichene Koordinatensystem bewegt sich gleichmäßig mit der Geschwindigkeit v gegenüber dem ungestrichenen:

$$x' = x - vt, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = t, \quad (\text{I.1.5})$$

wobei wieder o.B.d.A. die Bewegung in x -Richtung stattfinden soll.

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.1.6})$$

transformiert sich *kovariant* unter diesen Transformationen, d.h. sie ist forminvariant beim Übergang zu den neuen Koordinaten:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi'(\vec{r}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta' \psi'(\vec{r}', t'). \quad (\text{I.1.7})$$

Dies wollen wir im folgenden explizit überprüfen.

zu 1) Nach Kettenregel ist

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial x}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}, \quad (\text{I.1.8})$$

was natürlich trivialerweise auch für die Ableitungen nach y , z und t gilt. Mit

$$\psi'(x') = \psi'(x - a) = \psi(x) \quad (\text{I.1.9})$$

ist die Kovarianz der Schrödinger-Gleichung unter Translationen offensichtlich.

² δ_{kl} ist das Kronecker-Symbol, d.h. $\delta_{kk} = 1$ und $\delta_{kl} = 0$ für $k \neq l$.

zu 2) Zunächst überlegen wir uns, wie sich Ableitungen unter Rotationen transformieren. Nach Kettenregel gilt

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = \sum_j \frac{\partial x'_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x'_j} = \sum_j a_{jk} \frac{\partial}{\partial x'_j}. \quad (\text{I.1.10})$$

Hiermit ergibt sich für das Transformationsverhalten des Laplace-Operators:

$$\begin{aligned} \Delta &= \sum_k \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} = \sum_k \sum_{j,l} a_{jk} a_{lk} \frac{\partial}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x'_l} \\ &= \sum_{j,l} \delta_{jl} \frac{\partial}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x'_l} = \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x'^2_j} = \Delta'. \end{aligned} \quad (\text{I.1.11})$$

Mit $\psi'(\vec{r}', t') = \psi(\vec{r}, t)$ ist dann die Kovarianz unter Rotationen sichergestellt.

zu 3) Für die Impulse in den beiden Systemen gilt

$$p'_x = p_x - mv, \quad p'_y = p_y, \quad p'_z = p_z. \quad (\text{I.1.12})$$

Der Impulsoperator in den beiden Systemen hat die Form

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}'_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'}. \quad (\text{I.1.13})$$

Im folgenden werden wir zeigen, daß die Forminvarianz der Schrödinger-Gleichung unter Galilei-Transformationen durch die Transformation

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} m v x'} \psi'(\vec{r}', t') \quad (\text{I.1.14})$$

der Wellenfunktion gewährleistet wird. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \psi(\vec{r}, t) &= (\hat{p}'_x + mv) \psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} + mv \right] e^{-\frac{i}{\hbar} m v x'} \psi'(\vec{r}', t') \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} m v x'} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \psi'(\vec{r}', t') = e^{-\frac{i}{\hbar} m v x'} \hat{p}'_x \psi'(\vec{r}', t'). \end{aligned} \quad (\text{I.1.15})$$

Hieraus folgt analog

$$\hat{p}_x^2 \psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} m v x'} \hat{p}'_x{}^2 \psi'(\vec{r}', t'). \quad (\text{I.1.16})$$

Eingesetzt in die Schrödinger-Gleichung erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \right] \psi(\vec{r}, t) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} m v x'} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{1}{2m} (\hat{p}'_x{}^2 + \hat{p}'_y{}^2 + \hat{p}'_z{}^2) \right] \psi'(\vec{r}', t'). \end{aligned} \quad (\text{I.1.17})$$

Damit diese Gleichung erfüllt ist, muß offensichtlich

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi'(\vec{r}', t) = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}'_x{}^2 + \hat{p}'_y{}^2 + \hat{p}'_z{}^2 \right] \psi'(\vec{r}', t) \quad (\text{I.1.18})$$

gelten. Wichtig ist nun, daß offensichtlich aus Gleichung (I.1.14)

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \left| \psi'(\vec{r}', t') \right|^2 \quad (\text{I.1.19})$$

folgt, d.h. die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten der ursprünglichen und transformierten Wellenfunktionen sind gleich und damit auch die von ihnen beschriebene Physik.

Wir haben also gesehen, daß die Schrödinger-Gleichung forminvariant unter den genannten Transformationen ist. Insbesondere erfüllt sie das *klassische Relativitätsprinzip*: Zwei Beobachter, die sich relativ zueinander mit der Geschwindigkeit v bewegen, sehen physikalische Ereignisse in gleicher Weise.

Wir wissen allerdings aus der Mechanik, daß Galilei-Transformationen nur für $v \ll c$ richtig sind. Für eine korrekte Formulierung des Relativitätsprinzips müssen wir berücksichtigen, daß die Lichtgeschwindigkeit c in allen Bezugssystemen gleich ist.

I.2 Relativitätstheorie

Bevor wir uns mit der relativistischen Erweiterung der Quantenmechanik beschäftigen, wollen wir den dazu notwendigen Formalismus aus der Relativitätstheorie rekapitulieren. Damit läßt sich dann die Galilei-Invarianz zur *Lorentz-Invarianz* verallgemeinern.

Zunächst sei daran erinnert, daß wir statt der Galilei-Transformation *Lorentz-Transformationen*

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad ct' = \frac{ct - \frac{v}{c}x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (\text{I.2.1})$$

betrachten müssen. Später werden wir häufig die Abkürzungen

$$\beta := \frac{v}{c} \quad \text{und} \quad \gamma := \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (\text{I.2.2})$$

verwenden.

Wie sich herausstellt, ist die Schrödinger-Gleichung nicht invariant unter Lorentz-Transformationen, weshalb eine relativistische Verallgemeinerung notwendig ist.

Im folgenden soll an den relativistischen Formalismus erinnert werden, den sie wahrscheinlich schon in der Mechanik- und/oder Elektrodynamik-Vorlesung kennengelernt haben. Wir setzen zunächst

$$x^0 := ct, \quad x^1 := x, \quad x^2 := y, \quad x^3 := z \quad (\text{I.2.3})$$

und definieren den (*kontravarianten*) *Vierervektor*³

³Die angegebenen Schreibweisen werden wir von Fall zu Fall benutzen.

$$x^\mu := (x^0, x^1, x^2, x^3) = (x^0, x^k) = (x^0, \vec{r}) \quad (\text{I.2.4})$$

Hierbei ist es entscheidend, daß der Index μ oben steht. Wir werden später auch einen Vektor x_μ einführen, der aber von x^μ verschieden ist. Außerdem muß man sich daran gewöhnen, daß x^μ sowohl den gesamten Viervektor als auch eine einzelne Komponente bezeichnen kann. I.a. ist jedoch aus dem Zusammenhang klar, was gemeint ist.

In diesem vierdimensionalen *Minkowski-Raum* definieren wir nun eine Metrik durch das Abstandsquadrat

$$\begin{aligned} s^2 &:= c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = c^2 t^2 - \vec{r}^2 \\ &=: g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu \end{aligned} \quad (\text{I.2.5})$$

mit dem *metrischen Tensor*

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.2.6})$$

Genauer muß man sagen, daß es sich um eine pseudo-euklidische Metrik handelt, da sie nicht positiv-semidefinit ist. Abstände, für die $s^2 < 0$ ist, bezeichnet man auch als *raumartig*. Ereignisse, die einen raumartigen Abstand haben, können sich nicht gegenseitig beeinflussen⁴. Ereignisse mit $s^2 > 0$ bezeichnet man als *zeitartig*. Hier ist eine gegenseitige Beeinflussung oder Kommunikation möglich. Ist $s^2 = 0$, so spricht man von einem *lichtartigen* Abstand. Hier ist eine Kommunikation nur über Signale möglich, die sich mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten.

Man beachte, daß wir in Gleichung (I.2.5) die sogenannte *Einsteinsche Summenkonvention* verwendet haben. Diese besagt, daß über doppelt vorkommende Indizes, von denen einer oben und einer unten steht, zu summieren ist (von 0 bis 3). Wir werden diese Konvention im folgenden immer verwenden, ohne jedesmal explizit darauf hinzuweisen.

In Analogie zur Beschreibung von Rotationen wollen wir Lorentz-Transformationen durch eine (reelle) Matrix $\Lambda^\mu{}_\nu$ charakterisieren:

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu. \quad (\text{I.2.7})$$

Dabei ist zu beachten, daß der erste Index oben, der zweite unten steht!

Lorentz-Transformationen sind nun dadurch charakterisiert, daß sie den Abstand s^2 invariant lassen. Genau wie bei den Drehungen⁵ aus Kap. I.1 führt dies zu Bedingungen an die Matrix $\Lambda^\mu{}_\nu$:

$$s'^2 = g_{\mu\nu} x'^\mu x'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho x^\rho \Lambda^\nu{}_\lambda x^\lambda \stackrel{!}{=} g_{\rho\lambda} x^\rho x^\lambda = s^2, \quad (\text{I.2.8})$$

woraus folgt

⁴Dies ist eine Konsequenz der Konstanz der Lichtgeschwindigkeit.

⁵Dort stellte sich heraus, daß Drehmatrizen orthogonal sein müssen.

$$g_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\lambda = g_{\rho\lambda} \quad (\text{I.2.9})$$

bzw. in Matrixdarstellung

$$\Lambda^t g \Lambda = g. \quad (\text{I.2.10})$$

Die Gesamtheit aller Lorentz-Transformationen bildet eine Gruppe⁶, die sog. *Lorentz-Gruppe*. Speziell die “Standard”-Lorentz-Transformation (I.2.1) wird durch die Matrix

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \xi & -\sinh \xi & 0 & 0 \\ -\sinh \xi & \cosh \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.2.11})$$

beschrieben, wobei wir die sogenannte *Rapidity* ξ eingeführt haben, die durch $\tanh \xi = \beta$ definiert ist.

Neben dem kontravarianten Ortsvektor x^μ führen wir nun einen *kovarianten Vektor* x_μ ein:

$$x_\mu := g_{\mu\nu}x^\nu = (ct, -\vec{r}) \quad (\text{I.2.12})$$

mit der Umkehrung

$$x^\mu = g^{\mu\nu}x_\nu. \quad (\text{I.2.13})$$

Durch Multiplikation mit $g^{\mu\nu}$ bzw. $g_{\mu\nu}$ können also Indizes herauf- bzw. herunter gezogen werden. Dies hat u.a. den Vorteile, daß gewisse Effekte der Metrik bereits in den Vektor eingebaut werden können, was später eine kompaktere Darstellung erlaubt. Für die bekannte euklidische Metrik ist $g_{\mu\nu} = \mathbb{1}$ und es gibt keinen Unterschied zwischen ko- und kontravarianten Vektoren. Die Konsistenz der Gleichungen (I.2.12) und (I.2.13) wird durch

$$g_{\mu\rho}g^{\rho\nu} = \delta_\mu{}^\nu \quad (\text{I.2.14})$$

sichergestellt, wobei $\delta_\mu{}^\nu$ das bekannte Kronecker-Delta bezeichnet.

Für die Lorentz-Transformation Λ definieren wir analog:

$$\Lambda_\mu{}^\nu := g_{\mu\nu}\Lambda^\lambda{}_\rho g^{\rho\nu} \quad (\text{I.2.15})$$

$$=: \Lambda_{\mu\rho}g^{\rho\nu} \quad (\text{I.2.16})$$

$$=: g_{\mu\lambda}\Lambda^{\lambda\nu}. \quad (\text{I.2.17})$$

Dies gilt allgemein für Objekte mit zwei Indizes.

Die Bezeichnung “kovariant” und “kontravariant” spiegelt das unterschiedliche Transformationsverhalten der entsprechenden Vektoren unter Lorentz-Transformationen wieder (siehe auch Aufgabe 2). Auf Grund von Gleichung (I.2.7) wird das Transformationsverhalten des kontravarianten Vektors x^μ durch die Matrix $\Lambda^\mu{}_\nu$ beschrieben. Im Gegensatz dazu, transformiert sich der kovariante Vektor mit der Matrix $\Lambda_\mu{}^\nu$, denn:

$$\Lambda_\mu{}^\nu x_\nu = g_{\mu\lambda}\Lambda^\lambda{}_\rho g^{\rho\nu}x_\nu = g_{\mu\lambda}\Lambda^\lambda{}_\rho x^\rho = g_{\mu\lambda}x'^\lambda = x'_\mu, \quad (\text{I.2.18})$$

⁶Bei Hintereinanderausführung, die durch das Produkt der zugehörigen Λ -Matrizen beschrieben wird.

wobei wir im ersten Schritt mittels (I.2.15) die Indizes von Λ verschoben haben. Im zweiten Schritt wurde (I.2.12) ausgenutzt, um den Index des Ortsvektors zu verschieben, und schließlich (I.2.7).

Wir wissen nun, wie sich Ortsvektoren unter Lorentz-Transformationen verhalten. Ein analoges Verhalten findet man bei allen Vierervektoren. Man definiert daher:

Ein *kontravarianter Vierervektor* a^μ transformiert sich wie x^μ , d.h. gemäß Gleichung (I.2.7) mit $\Lambda^\mu{}_\nu$:

$$a'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu a^\nu. \quad (\text{I.2.19})$$

Ein *kovarianter Vierervektor* a_μ transformiert sich dagegen wie x_μ mit $\Lambda_\mu{}^\nu$:

$$a'_\mu = \Lambda_\mu{}^\nu a_\nu. \quad (\text{I.2.20})$$

Als nächstes wollen wir die Wirkung von Lorentz-Transformationen auf Ableitungen untersuchen. Dazu definieren wir die Ableitungsvektoren

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial ct}, \vec{\nabla} \right) =: \partial_\mu \quad (\text{I.2.21})$$

und

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\frac{\partial}{\partial x}, -\frac{\partial}{\partial y}, -\frac{\partial}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right) =: \partial^\mu. \quad (\text{I.2.22})$$

Wie die Bezeichnung ∂_μ und ∂^μ schon andeuten, transformieren sich die entsprechenden Vektoren kovariant bzw. kontravariant, also genau umgekehrt, wie die Ortsvektoren, nach denen abgeleitet wird.

Zum Beweis gehen wir von Gleichung (I.2.7) aus und multiplizieren diese mit⁷ $g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda{}_\rho$:

$$g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda{}_\rho x'^\mu = g_{\mu\lambda} \Lambda^\lambda{}_\rho \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu. \quad (\text{I.2.23})$$

Hieraus folgt unter Beachtung von (I.2.9)

$$x_\rho = \Lambda^\lambda{}_\rho x'_\lambda. \quad (\text{I.2.24})$$

Unter der Berücksichtigung der Kettenregel ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial x'_\mu} = \frac{\partial x_\nu}{\partial x'_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} = \Lambda^\mu{}_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu}, \quad (\text{I.2.25})$$

womit die Kontravarianz von ∂^μ gezeigt ist. Die Kovarianz von ∂_μ folgt analog. Aus Gleichung (I.2.24) folgt nach Multiplikation mit $\Lambda_\mu{}^\rho$

$$x'_\mu = \Lambda_\mu{}^\rho x_\rho = \Lambda_\mu{}^\rho \Lambda^\lambda{}_\rho x'_\lambda \quad (\text{I.2.26})$$

⁷natürlich unter Beachtung der Summenkonvention!

und somit

$$\Lambda_{\mu}{}^{\rho} \Lambda^{\lambda}{}_{\rho} = \delta_{\mu}^{\lambda}. \quad (\text{I.2.27})$$

Dies bedeutet, daß die Transformationsmatrizen für ko- und kontravariante Viervektoren im wesentlichen invers zueinander sind. Genauer gilt in Matrixdarstellung:

$$\text{kontravariant: } x' = \Lambda x, \quad (\text{I.2.28})$$

$$\text{kovariant: } x' = (\Lambda^{-1})^t x. \quad (\text{I.2.29})$$

Es ist nützlich zu wissen, daß das Skalarprodukt

$$a_{\mu} b^{\mu} = g_{\mu\nu} a^{\mu} b^{\nu} = a^{\mu} b_{\mu} \quad (\text{I.2.30})$$

zweier Vierervektoren a_{μ}, b^{μ} invariant unter Lorentz-Transformationen ist (Aufgabe 1g). Somit ist z.B. sofort klar, daß der d'Alembert-Operator

$$\square := \partial_{\mu} \partial^{\mu} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 \quad (\text{I.2.31})$$

ein invarianter Skalar unter Lorentz-Transformationen ist.

Wir betrachten nun ein elektromagnetische Feld mit Skalarpotential $\varphi(\vec{r}, t)$ und Vektorpotential $\underline{A}(\underline{r}, t)$, die zusammen einen Vierervektor

$$A^{\mu} := (\varphi, \underline{A}) \quad (\text{I.2.32})$$

bilden. Die Felder erhält man dann wie üblich über

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A}. \quad (\text{I.2.33})$$

Weiterhin müssen wir uns mit den relativistischen Eigenschaften der Grundgrößen der klassischen Mechanik befassen. Wir betrachten daher ein Teilchen mit der Ruhemasse m_0 und der Ladung e . Dieses befindet sich in einem elektromagnetischen Feld, das durch das elektromagnetische Potential (φ, \vec{A}) beschrieben wird.

Wie aus der Mechanik-Vorlesung bekannt, ist die relativistische Masse durch

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \gamma m_0 \quad (\text{I.2.34})$$

gegeben. Die mechanische Energie mc^2 und der mechanische Impuls $\vec{\Pi} = m\vec{v}$ bilden zusammen den (kontravarianten) Vierervektor

$$\Pi^{\mu} = (mc, \vec{\Pi}). \quad (\text{I.2.35})$$

Dessen Betrag ist wegen

$$\Pi_{\mu} \Pi^{\mu} = m^2 c^2 - \vec{\Pi}^2 = m_0^2 c^2 \quad (\text{I.2.36})$$

invariant unter Lorentz-Transformationen. Dies ist natürlich nach Aufgabe 1g) zu erwarten gewesen, zeigt aber nochmals, daß es sich bei dem in Gleichung (I.2.35) definierten Vektor wirklich um einen Vierervektor (mit den bekannten Transformationseigenschaften unter Lorentz-Transformationen) handelt.

Berücksichtigt man die Kopplung an das elektromagnetische Feld, so kommt man zum kanonischen Impuls

$$p^\mu = \Pi^\mu + \frac{e}{c} A^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \quad (\text{I.2.37})$$

mit

$$E = mc^2 + e\varphi = \gamma m_0 c^2 + e\varphi, \quad \vec{p} = \vec{\Pi} + \frac{e}{c} \vec{A}. \quad (\text{I.2.38})$$

In niedrigster Ordnung liefert die Energie den bekannten nichtrelativistischen Ausdruck:

$$E = m_c^2 + \frac{m}{2} v^2 + e\varphi + O(1/c^2). \quad (\text{I.2.39})$$

Die Dynamik der klassischen relativistischen Mechanik folgt dann aus der Hamiltonfunktion

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = e\varphi(\vec{r}, \vec{p}) + \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}. \quad (\text{I.2.40})$$

Die kanonischen Gleichungen

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} \quad (\text{I.2.41})$$

liefern dann die erwarteten Beziehungen

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}, \quad \frac{d\vec{\Pi}}{dt} = e \left[\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right], \quad (\text{I.2.42})$$

d.h. gerade die Lorentz-Kraft.

I.3 Klein-Gordon-Gleichung

Wir versuchen nun, eine relativistische Grundgleichung mittels des Korrespondenzprinzips abzuleiten. Dazu werden wir die klassischen Größen Energie E und Impuls \vec{p} durch Operatoren ersetzen:

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \longrightarrow -i\hbar \vec{\nabla}, \quad (\text{I.3.1})$$

bzw. für den Vierervektor

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \longrightarrow i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right) = i\hbar \partial^\mu. \quad (\text{I.3.2})$$

Offensichtlich liefert eine solche Ersetzung im Energiesatz $E = H(\vec{r}, \vec{p})$ mit der klassischen nichtrelativistischen Energie $E = \frac{p^2}{2m}$ gerade die Schrödinger-Gleichung.

Als einen ersten Versuch zur Ableitung einer relativistischen Theorie nehmen wir nun die Substitution (I.3.1) im relativistischen Energiesatz (I.2.40) vor. Dies liefert die Wellengleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[e\varphi + \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2} \right] \psi(\vec{r}, t), \quad (\text{I.3.3})$$

die im wesentlichen einer Schrödinger-Gleichung mit relativistischem Hamilton-Operator H entspricht, da nur Zeitableitungen erster Ordnung auftreten.

Die Entwicklung nach $1/c^2$ liefert die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2} &= m_0 c^2 \left[1 + \frac{1}{2m_0^2 c^2} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right] + O\left(\frac{1}{c^4}\right) \\ &= m_0 c^2 + \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + O\left(\frac{1}{c^4}\right). \end{aligned} \quad (\text{I.3.4})$$

Der Beitrag der Ruheenergie $m_0 c^2$ läßt sich durch die Transformation

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-i \frac{m_0 c^2}{\hbar} t} \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.5})$$

wegtransformieren, so daß für $\phi(\vec{r}, t)$ die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.6})$$

resultiert.

Obwohl die Wellengleichung (I.3.3) relativistisch konstruiert wurde, so birgt sie doch einige Probleme:

- Formal gibt es eine Asymmetrie zwischen Raum- und Zeitableitungen. Während nur 1. Ableitungen nach t auftreten, stehen unter der Wurzel auch 2. Ableitungen nach den Ortsvariablen. Diese Asymmetrie verschleiert etwas die relativistische Invarianz, die schwer zu erkennen ist.
- Neben diesem ästhetischen Problem gibt es auch ein mathematisches. Der Quadratwurzeloperator ist nicht einfach definiert. Um damit Rechnen zu können, muß man die Wurzel entwickeln. Dabei können natürlich Probleme wie Konvergenzbereich etc. auftreten. Auch physikalisch ist dies unbefriedigend. Bei einer Entwicklung treten beliebig hohe Potenzen des Differentialoperators auf. Dies entspricht dann einer nichtlokalen Theorie, da dies - ähnlich wie einer Taylorreihe - bedeutet, daß der gesamte Verlauf der Wellenfunktion wichtig ist, und nicht nur der "in der Nähe" des betrachteten Punktes.

Ein möglicher Ausweg zur Lösung dieser Probleme besteht in der Beseitigung der Wurzel im Energiesatz durch Quadrieren:

$$(E - e\varphi)^2 = m_0^2 c^4 + c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2. \quad (\text{I.3.7})$$

Damit nimmt man aber in Kauf, daß man es nun mit zwei Lösungen zu tun hat, nämlich

$$E = e\varphi \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}. \quad (\text{I.3.8})$$

Insbesondere existiert also eine Lösung mit negativer Energie. Dies führt zu gewissen Problemen, wie wir noch sehen werden.

Das Korrespondenzprinzip angewandt auf Gleichung (I.3.7) liefert dann

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 - c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \right] \psi(\vec{r}, t) = m_0^2 c^4 \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.3.9})$$

bzw. nach Division durch $(i\hbar c)^2$

$$\left[\left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) \left(\partial^\mu + \frac{ie}{\hbar c} A^\mu \right) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{I.3.10})$$

Dies ist die *Klein-Gordon-Gleichung*, die 1926 unabhängig vom schwedischen Physiker Oskar Klein und dem Deutschen Walter Gordon gefunden wurde⁸.

Die relativistische Invarianz der Klein-Gordon-Gleichung ist in der Darstellung (I.3.10) offensichtlich, da das Skalarprodukt des Vierervektors $\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu$ mit sich selbst ist nach Aufg. 1g invariant ist. Mit der Transformation $\psi'(\vec{r}', t') = \psi(\vec{r}, t)$ wird die relativistische Invarianz sichergestellt. Wir haben es also mit einer skalaren Wellenfunktion zu tun.

Speziell für freie Teilchen reduziert sich die Klein-Gordon-Gleichung auf

$$\left(\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{I.3.11})$$

mit dem in (I.2.31) definierten d'Alembert-Operator \square . Die *freie Klein-Gordon-Gleichung* (I.3.11) entspricht einer klassischen Wellengleichung mit einem zusätzlichen Massenterm. Als Lösungen ergeben sich ebene Wellen

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu} = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad (\text{I.3.12})$$

wobei der Zusammenhang zwischen Energie E und Impuls \vec{p} durch die relativistische Dispersionsbeziehung

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_0^2 c^2 \quad (\text{I.3.13})$$

⁸Tatsächlich haben zeitgleich auch Schrödinger und Fock diese Gleichung betrachtet.

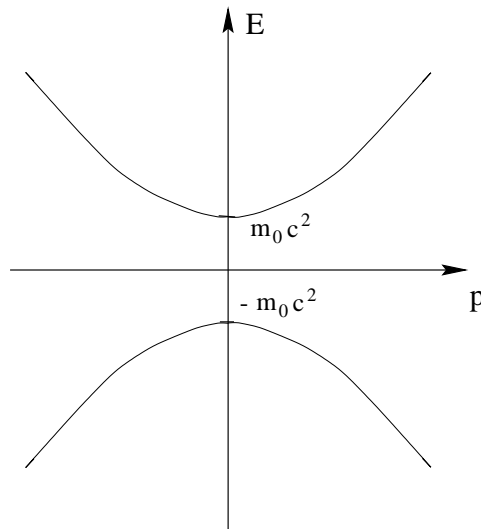


Abbildung I.3.1: Spektrum der freien Klein-Gordon-Gleichung.

gegeben sein muß. Wie erwartet gibt es daher Lösungen mit positiver und negativer Energie

$$E = \pm c\sqrt{m_0^2 c^2 + p^2}. \quad (\text{I.3.14})$$

Dies ist in Abb. I.3.1 dargestellt. Wie man sieht, gibt es eine Lücke auf Grund der endlichen Masse m_0 . Zustände mit Energien zwischen $-m_0 c^2$ und $m_0 c^2$ existieren nicht.

Ein nach unten unbeschränktes Spektrum führt aber zu Stabilitätsproblemen, da im Grundzustand die Energie minimal⁹ sein sollte. Eine mögliche Lösung, die wir im nächsten Kapitel genauer diskutieren werden, ist die Interpretation der Zustände mit $E < 0$ als *Antiteilchen*.

I.3.1 Kontinuitätsgleichung und Interpretation der Wellenfunktion

Wie bei der Schrödinger-Gleichung stellt sich auch hier die Frage nach der Interpretation der Wellenfunktion. Im Falle der Schrödinger-Gleichung konnte eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (\text{I.3.15})$$

hergeleitet werden, die eine Interpretation von

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (\text{I.3.16})$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte nahelegt. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist bekanntlich durch

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (\text{I.3.17})$$

⁹Aber endlich!

gegeben.

In einer relativistischen Theorie erwartet man eine ähnliche Kontinuitätsgleichung, die sich in kovarianter Form schreiben läßt als

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (\text{I.3.18})$$

mit dem Strom-Viervektor

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}). \quad (\text{I.3.19})$$

Wir wollen nun für die Klein-Gordon-Gleichung eine solche Beziehung ableiten und gehen dabei vor wie im Falle der Schrödinger-Gleichung. Dazu multiplizieren wir die (freie) Klein-Gordon-Gleichung von links mit ψ^* und ihr konjugiert-komplexes¹⁰ von links mit ψ und subtrahieren die Gleichungen voneinander:

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^* \left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar} \right) \psi - \psi \left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar} \right) \psi^* \\ &= \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*). \end{aligned} \quad (\text{I.3.20})$$

Der Ausdruck in der Klammer ist im wesentlichen die gesuchte Stromdichte j^μ . Aus Dimensionsgründen fügen wir noch einen Faktor $\frac{i\hbar}{2m_0}$ ein:

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m_0} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*). \quad (\text{I.3.21})$$

Damit gilt dann die Kontinuitätsgleichung (I.3.18). Der eingeführte Faktor stellt dabei sicher, daß 1) die 0.-te Komponente die Dimension (1/Volumen) einer Wahrscheinlichkeitsdichte hat und 2) der nichtrelativistische Grenzfall korrekt wiedergegeben wird.

Explizit haben wir für den Stromanteil \vec{j} in $j^\mu = (c\rho, \vec{j})$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im_0} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*), \quad (\text{I.3.22})$$

also den gleichen Ausdruck (I.3.17) wie in der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Für den Dichteanteil ρ ergibt sich aber

$$\rho = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right). \quad (\text{I.3.23})$$

Diese Größe ist im Gegensatz zum nichtrelativistischen Ausdruck $\rho = |\psi|^2$ nicht positiv-definit und kann daher nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden. Der Grund liegt in der Tatsache, daß die Klein-Gordon-Gleichung von 2. Ordnung in der Zeit ist. Somit können als Randbedingung ψ und $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ an einem Punkt so vorgegeben werden, daß der Ausdruck dort negativ ist.

Wir betrachten noch den nichtrelativistischen Grenzfall. Mit Hilfe der Transformation (I.3.5) kann man einsehen¹¹, daß in diesem Fall

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx -i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \psi \quad (\text{I.3.24})$$

¹⁰Dabei ist in (I.3.11) lediglich ψ durch ψ^* zu ersetzen.

¹¹Details sind Gegenstand von Aufgabe 3.

gilt. Hieraus ergibt sich dann der bekannte nichtrelativistische Ausdruck

$$\rho \approx |\psi|^2 \quad (\text{I.3.25})$$

für die Wahrscheinlichkeitsdichte.

I.3.2 Probleme der Klein-Gordon-Gleichung

Zusammenfassend halten wir fest, daß es die Klein-Gordon-Gleichung mit einigen Problemen behaftet ist:

- a) Es existieren Lösungen mit negativer Energie, wobei das Spektrum freier Teilchen sogar nach unten unbeschränkt ist.
- b) Eine positiv-definite Wahrscheinlichkeitsdefinition im üblichen Sinne ist nicht möglich.
- c) Da die Wellenfunktion ψ nur von den Koordinaten \vec{r}, t abhängt, gibt es keine Möglichkeit, innere Freiheitsgrade (z.B. den Spin) einzubauen.

Die Probleme a) und b) sind im Prinzip lösbar, wie wir gleich sehen werden. Später werden wir noch ausführlich darlegen, daß sich die Lösungen mit negativer Energie als *Antiteilchen* interpretieren lassen. Problem b) werden wir gleich genauer diskutieren.

Das Problem c) macht die Suche nach einer anderen relativistischen Gleichung notwendig, mit der sich auch Elektronen (mit ihrem Spin $1/2$) beschreiben lassen. c) war der Hauptgrund, warum man lange Zeit nicht an die physikalische Relevanz der Klein-Gordon-Gleichung geglaubt hat, denn 1926 waren eigentlich nur Teilchen mit Spin $1/2$ bekannt (Elektronen, Protonen, Neutronen). Später hat sich dann aber gezeigt, daß sich mit der Klein-Gordon-Gleichung im Prinzip spinlose ($S = 0$) Skalarteilchen beschreiben lassen. Ein prominentes Beispiel sind die sogenannten π -Mesonen, die 1947 entdeckt wurden. Da die Klein-Gordon-Gleichung Teilchen mit Spin 0 beschreibt sieht man z.B. daran, daß sie im nichtrelativistischen Grenzfall in die (spinlose) Schrödinger-Gleichung übergeht. Außerdem kann man dies auch aus dem Transformationsverhalten der Wellenfunktion unter Lorentz-Transformationen ersehen.

Wir kommen nun zu Problem b) zurück. Es stellt sich die Frage, ob ρ und \vec{j} vielleicht anders interpretiert werden können? Dies ist tatsächlich so. Dazu gehen wir über zur *Ladungsdichte*

$$j'^{\mu} = ej^{\mu} = (c\rho', \vec{j}') = \frac{ie\hbar}{2m_0} (\psi^* \partial^{\mu} \psi - \psi \partial^{\mu} \psi^*), \quad (\text{I.3.26})$$

wobei e die Elementarladung ist. ρ' ist nun eine Ladungsdichte und kann deshalb positive und negative Werte annehmen. \vec{j}' ist die zugehörige Ladungsstromdichte. Wir werden noch sehen, daß dies in natürlicher Weise mit der Interpretation der $E < 0$ -Zustände als Antiteilchen zusammenpasst.

Um ein besseres Gefühl für die oben angegebene Interpretation zu bekommen, betrachten wir nun speziell ein freies Teilchen. Der Ansatz

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \quad (\text{I.3.27})$$

liefert nach Einsetzen in die (freie) Klein-Gordon-Gleichung die Bedingung

$$E^2 = c^2 (p^2 + m_0^2 c^2) \quad (\text{I.3.28})$$

und somit die beiden Lösungen

$$\psi_{\pm} = A_{\pm} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} \mp E_p t)} \quad (\text{I.3.29})$$

mit der Energie

$$E_p = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}. \quad (\text{I.3.30})$$

Hieraus ergibt sich für die Ladungsdichte (I.3.26)

$$\rho'_{\pm} = \pm \frac{e E_p}{m_0 c^2} |\psi_{\pm}|^2. \quad (\text{I.3.31})$$

Dies legt folgende Interpretation der Wellenfunktionen ψ_{\pm} nahe: ψ_+ beschreibt ein Teilchen mit der Ladung $+e$ und ψ_- eines mit derselben Masse m_0 , aber der Ladung $-e$.

Um zu einer normierbaren Wellenfunktion zu gelangen, sperren wir das Teilchen in einen Kasten der Kantenlänge L ein. Auf Grund der periodischen Randbedingungen ergibt sich

$$\psi_{\pm}^{(n)} = A_{\pm}^{(n)} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_n \cdot \vec{r} \mp E_n t)} \quad (\text{I.3.32})$$

mit dem Impuls

$$\vec{p}_n = \frac{2\pi}{L} \vec{n} \quad \text{mit} \quad \vec{n} = (n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^3 \quad (\text{I.3.33})$$

und der zugehörigen Energie $E_n := E_{p_n}$. Auf Grund der Normierungsbedingung

$$\pm e = \int_{L^3} d^3 r \rho'_{\pm}(\vec{r}) = \pm \frac{e E_n}{m_0 c^2} |A_{\pm}^{(n)}|^2 L^3 \quad (\text{I.3.34})$$

ergibt sich die normierte Wellenfunktion

$$\psi_{\pm}^{(n)} = \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_n L^3}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_n \cdot \vec{r} \mp E_n t)}. \quad (\text{I.3.35})$$

Man beachte, daß der Normierungsfaktor für beide Lösungen gleich ist, ein Unterschied besteht lediglich im Zeitfaktor $\exp(\pm \frac{i}{\hbar} E_n t)$. Somit hat die allgemeine Lösung für positive bzw. negative freie Spin-0-Teilchen die Form

$$\psi_+ = \sum_n A_n \psi_+^{(n)} = \sum_n A_n \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_n L^3}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_n \cdot \vec{r} - E_n t)}, \quad (\text{I.3.36})$$

$$\psi_- = \sum_n B_n \psi_-^{(n)} = \sum_n B_n \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_n L^3}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_n \cdot \vec{r} + E_n t)}. \quad (\text{I.3.37})$$

Als nächstes drängt sich die Frage auf, ob auch neutrale Teilchen beschrieben werden können. Aus

$$\rho' = \frac{ie\hbar}{2m_0c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{e\hbar}{m_0c^2} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \quad (\text{I.3.38})$$

lesen wir ab, daß in diesem Falle ψ reell sein muß. Somit ergibt sich als allgemeine Wellenfunktion für ein neutrales Teilchen

$$\begin{aligned} \psi_0^{(n)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_+^{(n)}(\vec{p}_n) + \psi_-^{(n)}(-\vec{p}_n) \right] \\ &= \sqrt{\frac{m_0c^2}{E_n L^3}} 2 \cos \left(\frac{\vec{p}_n \cdot \vec{r} - E_n t}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (\text{I.3.39})$$

Man beachte dabei, daß $\psi_-^{(n)}$ mit dem entgegengesetzten Impuls $-\vec{p}_n$ eingeht. Damit ist $(\psi_0^{(n)})^* = \psi_0^{(n)}$ gewährleistet und somit verschwindet die zugehörige Ladungsdichte $\rho' = 0$ wegen (I.3.38). Allerdings verschwindet auch die zugehörige Stromdichte $\vec{j}' = 0$, d.h. die Kontinuitätsgleichung wird zu einer trivialen Identität.

Zusammenfassend können wir also feststellen, daß es für die relativistische freie Bewegung eines spinlosen Teilchens zu jedem Impuls \vec{p} drei Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung gibt, die mit den elektrischen Ladungen $(+, -, 0)$ korrespondieren. Außerdem zeigt sich (siehe Gleichung (I.3.38)), daß die Wellenfunktionen ψ und ψ^* entgegengesetzte Ladungen beschreiben.

I.3.3 Schrödinger-Form der Klein-Gordon-Gleichung

Wie jede Differentialgleichung 2. Ordnung kann auch die Klein-Gordon-Gleichung in ein System aus zwei gekoppelten DGL 1. Ordnung (in der Zeit) umgewandelt werden. Dies wird uns später Fortschritte bei der Interpretation ermöglichen.

Zur Umwandlung machen wir den Ansatz

$$\psi = \phi + \chi \quad \text{und} \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = m_0c^2(\phi - \chi) \quad (\text{I.3.40})$$

was äquivalent ist zu

$$\phi = \psi + \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad \chi = \psi - \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (\text{I.3.41})$$

Mit diesen Definitionen ist nun die freie Klein-Gordon-Gleichung

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left(\Delta - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi \quad (\text{I.3.42})$$

äquivalent zu den gekoppelten Differentialgleichungen

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta(\phi + \chi) + m_0c^2 \phi, \quad (\text{I.3.43})$$

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = +\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta(\phi + \chi) - m_0c^2 \chi, \quad (\text{I.3.44})$$

Dies sieht man folgendermaßen ein: Die Summe der Gleichungen (I.3.43) und (I.3.44) liefert gerade die zweite Gleichung der Definition (I.3.40). Bildet man die Differenz

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\phi - \chi) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta(\phi + \chi) + m_0 c^2(\phi + \chi) \quad (\text{I.3.45})$$

so folgt unter Benutzung von (I.3.40) durch Differentiation nach t

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{i\hbar}{m_0 c^2} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi + m_0 c^2 \psi \quad (\text{I.3.46})$$

und hieraus die Klein-Gordon-Gleichung (I.3.42).

Zu einer kompakteren Darstellung gelangen wir durch Einführung des Vektors

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.47})$$

Die Klein-Gordon-Gleichung in der Form (I.3.43), (I.3.44) läßt sich dann schreiben als

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_f \Psi} \quad (\text{I.3.48})$$

mit dem Hamiltonoperator H_f (für freie Teilchen)

$$H_f = (\tau_3 + i\tau_2) \frac{p^2}{2m_0} + \tau_3 m_0 c^2 \quad (\text{I.3.49})$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \frac{p^2}{2m_0} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} m_0 c^2. \quad (\text{I.3.50})$$

Gleichung (I.3.48) hat die gleiche Struktur wie die Schrödinger-Gleichung. Insbesondere ist sie nur von 1. Ordnung in der Zeit t . Die τ_j sind die Pauli-Matrizen

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.51})$$

Sie haben hier nichts mit dem Spin zu tun¹². Ihr Auftreten liegt im wesentlichen darin begründet, daß sie gemeinsam mit der Einheitsmatrix eine Basis der 2×2 -Matrizen bilden.

Man kann noch explizit zeigen, daß jede Komponente von Ψ einer Klein-Gordon-Gleichung genügt. Dies ist Gegenstand von Aufgabe 4.

Wir wollen nun Ladungs- und Stromdichte durch Ψ ausdrücken. Für die Ladungsdichte ergibt sich:

$$\begin{aligned} \rho' &= \frac{ie\hbar}{2m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \\ &= \frac{ie\hbar}{2m_0 c^2} \left((\phi^* + \chi^*) \frac{m_0 c^2}{i\hbar} (\phi - \chi) + (\phi + \chi) \frac{m_0 c^2}{i\hbar} (\phi^* - \chi^*) \right) \\ &= e (|\phi|^2 - |\chi|^2) \\ &= e \Psi^\dagger \tau_3 \Psi. \end{aligned} \quad (\text{I.3.52})$$

¹²Um dies hervorzuheben, haben wir sie mit τ_j statt σ_j bezeichnet.

Dabei ist $\Psi^+ = (\phi^*, \chi^*)$. Im zweiten Schritt haben wir Gleichung (I.3.40) ausgenutzt, um die Zeitableitung von ψ durch ϕ und χ auszudrücken.

Durch eine analoge Rechnung ergibt sich für die Stromdichte

$$\vec{j} = \frac{e\hbar}{2im_0} \left[\Psi^+ \tau_3 (\tau_3 + i\tau_2) \vec{\nabla} \Psi - \vec{\nabla} \Psi^+ \tau_3 (\tau_3 + i\tau_2) \Psi \right]. \quad (\text{I.3.53})$$

Wir betrachten nun noch einmal die Lösung für freie Teilchen. Dabei geben wir nur die wesentlichen Ergebnisse an. Details der Rechnungen sind Gegenstand von Aufgabe 4. Mit dem Ansatz

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \quad (\text{I.3.54})$$

ergibt sich durch Einsetzen in die Klein-Gordon-Gleichung

$$E = \pm \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} = \pm E_p, \quad (\text{I.3.55})$$

wie erwartet. Wir betrachten nun die beiden Fälle positiver und negativer Energie.

Für $E = +E_p$ erhalten wir die Wellenfunktion

$$\Psi^{(+)} = A_+ \begin{pmatrix} \phi_0^{(+)} \\ \chi_0^{(+)} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - E_p t)} =: \begin{pmatrix} \phi^{(+)}(\vec{p}) \\ \chi^{(+)}(\vec{p}) \end{pmatrix} \quad (\text{I.3.56})$$

mit

$$\begin{pmatrix} \phi_0^{(+)} \\ \chi_0^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 + E_p \\ m_0 c^2 - E_p \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.57})$$

Für die Lösung mit negativer Energie $E = -E_p$ ergibt sich

$$\Psi^{(-)} = A_- \begin{pmatrix} \phi_0^{(-)} \\ \chi_0^{(-)} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} + E_p t)} =: \begin{pmatrix} \phi^{(-)}(\vec{p}) \\ \chi^{(-)}(\vec{p}) \end{pmatrix} \quad (\text{I.3.58})$$

mit

$$\begin{pmatrix} \phi_0^{(-)} \\ \chi_0^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 - E_p \\ m_0 c^2 + E_p \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.59})$$

Für ein Teilchen in einem Kasten der Kantenlänge L ergibt sich für die Normierungskonstanten

$$A_+ = A_- = \frac{1}{\sqrt{4m_0 c^2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L^3 E_p}}. \quad (\text{I.3.60})$$

Besonders interessant ist nun der nichtrelativistische Grenzfall. Hier erhält man (siehe Aufg. 4)

$$A_+ \begin{pmatrix} \phi_0^{(+)} \\ \chi_0^{(+)} \end{pmatrix} \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.3.61})$$

$$A_- \begin{pmatrix} \phi_0^{(-)} \\ \chi_0^{(-)} \end{pmatrix} \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.3.62})$$

Mit Blick auf unsere frühere Diskussion der Lösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung (siehe z.B. Gleichung (I.3.31)) bedeutet dies, daß für Zustände positiver Ladung¹³ im nichtrelativisti-

¹³Relativ zur aus Dimensionsgründen eingeführten Ladung e .

schen Fall die obere Komponente groß wird, für Zustände negativer Ladung aber die untere Komponente.

Dies wollen wir etwas genauer verstehen. Durch Vergleich der entsprechenden Ausdrücke sieht man, daß

$$\Psi^{(-)}(-\vec{p}) = \begin{pmatrix} \phi^{(-)}(-\vec{p}) \\ \chi^{(-)}(-\vec{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi^{(+)}(\vec{p}) \\ \phi^{(+)}(\vec{p}) \end{pmatrix} = \tau_1 (\Psi^{(+)}(\vec{p}))^*. \quad (\text{I.3.63})$$

Dies kann man – z.B. unter Berücksichtigung des Verhaltens im nichtrelativistischen Grenzfall – folgendermaßen interpretieren: Gehört der Zustand $\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$ zu einer positiven Ladung, dann beschreibt

$$C\Psi := \Psi_c := \tau_1 \Psi^* = \begin{pmatrix} \chi^* \\ \phi^* \end{pmatrix} \quad (\text{I.3.64})$$

ein Teilchen mit negativer Ladung (und umgekehrt). Ψ_c heißt *ladungskonjugierter Zustand von Ψ* , die durch den Operator C beschriebene Transformation *Ladungskonjugation*. Offensichtlich gilt

$$(\Psi_c)_c = \tau_1 (\tau_1 \Psi^*)^* = \tau_1^2 (\Psi^*)^* = \Psi, \quad (\text{I.3.65})$$

wobei wir neben den bekannten Rechenregeln ausgenutzt haben, daß für die Pauli-Matrizen $\tau_j^2 = \mathbb{1}$ gilt.

Im einzelnen gilt unter Ladungskonjugation

$$\phi_0^{(+)} \rightarrow \chi_0^{(-)}, \quad (\text{I.3.66})$$

$$\chi_0^{(+)} \rightarrow \phi_0^{(-)}, \quad (\text{I.3.67})$$

$$\vec{p} \rightarrow -\vec{p}, \quad (\text{I.3.68})$$

$$E_p \rightarrow -E_p. \quad (\text{I.3.69})$$

Später werden wir noch zu untersuchen haben, wie sich andere Größen (z.B. Drehimpulse wie der Spin) verhalten.

Bezeichnet man (willkürlich) die durch Ψ beschriebenen Partikel als Teilchen, dann heißen die durch Ψ_c beschriebenen Partikel *Antiteilchen*. Ein Beispiel sind die bereits erwähnten π -Mesonen. Hier bezeichnet man üblicherweise das negativ geladene π^- als Teilchen und das π^+ -Meson als Antiteilchen.

Für neutrale Teilchen muß der ladungskonjugierte Zustand wieder der Zustand selbst sein: Neutrale Teilchen sind ihre eigenen Antiteilchen. Es muß also gelten:

$$\Psi_c = \tau_1 \Psi^* \stackrel{!}{=} \alpha \Psi, \quad (\text{I.3.70})$$

d.h. der ladungskonjugierte Zustand ist proportional zum ursprünglichen Zustand. Die Proportionalitätskonstante α muß dabei reell, da wir bereits früher gesehen haben, daß für neutrale Teilchen $\psi = \phi + \chi$ reell ist. Somit ist $\text{Im}\phi = -\text{Im}\chi$. Da Ψ_c auch ein neutrales Teilchen beschreibt, ist außerdem $\text{Im}(\alpha\phi) = -\text{Im}(\alpha\chi)$ und deshalb α reell. Weiterhin folgt

$$\Psi \stackrel{!}{=} (\Psi_c)_c = \tau_1 (\alpha \Psi)^* = \alpha \tau_1 \Psi^* = \alpha^2 \Psi. \quad (\text{I.3.71})$$

Also folgt $\alpha^2 = 1$ und somit

$$\alpha = \pm 1. \quad (\text{I.3.72})$$

Es gibt also zwei Arten von neutralen Teilchen, nämlich solche mit

- a) positiver Ladungspartität ($\alpha = +1$). Für diese ist $\Psi_c = \Psi$ (und deshalb $\phi^* = \chi$).
- b) negativer Ladungspartität ($\alpha = -1$). Für solche Teilchen¹⁴ ist $\Psi_c = -\Psi$ (und deshalb $\phi^* = -\chi$).

I.4 Dirac-Gleichung

Als nächstes wollen wir versuchen, eine relativistisch zufriedenstellende Theorie für Fermionen, d.h. Teilchen mit halbzahligen Spin, abzuleiten. Wir folgen der historischen Herleitung von Dirac aus dem Jahre 1928. Er ging dabei von folgenden Forderungen aus: Die Gleichung für die Wellenfunktion Ψ soll

- a) eine positiv-definite Wahrscheinlichkeitsdichte liefern,
- b) mehrkomponentig sein, um den Spin beschreiben zu können,
- c) relativistisch zufriedenstellend sein.

Punkt a) und b) waren Schwierigkeiten, die im Rahmen der Klein-Gordon-Gleichung aufgetreten sind. Wir hatten zwar gesehen, daß sich a) durch geeignete Uminterpretation als Ladungsdichte lösen läßt, aber das war 1928 noch nicht unbedingt klar.

Punkt b) dagegen kann im Rahmen der Klein-Gordon-Gleichung nicht gelöst werden. Sie beschreibt nur Spin-0-Teilchen. Auch die zweikomponentige Schrödinger-Form aus Kap. I.3.3 beschreibt nicht den Spin. Dies kann man anhand des Transformationsverhaltens oder des nichtrelativistischen Grenzfalles einsehen. Wir werden später noch einmal darauf zurückkommen.

Im Rahmen einer nichtrelativistischen Spintheorie betrachtet man für den Spin 1/2 zweikomponentige Wellenfunktionen mit den Komponenten

$$\psi(\vec{r}, t; s) = \begin{cases} \psi(\vec{r}, t; +) & \uparrow \text{-Spin} \\ \psi(\vec{r}, t; -) & \downarrow \text{-Spin} \end{cases} \quad (\text{I.4.1})$$

wobei s den Eigenwert des z -Komponente S^z bestimmt, d.h. $s = \pm \frac{1}{2}\hbar$. Im Rahmen einer nichtrelativistischen Theorie läßt sich der Spin z.B. im Rahmen der Pauli-Gleichung berücksichtigen¹⁵, einer zweikomponentigen Erweiterung der Schrödinger-Gleichung, bei der Magnetfelder \vec{B} durch einen Wechselwirkungsterm $\vec{B} \cdot \vec{\sigma}$ berücksichtigt werden, wobei $\vec{\sigma}$ ein Vektor ist, dessen Komponenten durch die Pauli-Matrizen gegeben sind.

¹⁴Ein Beispiel für ein Teilchen mit negativer Ladungspartität ist das Photon.

¹⁵Wir kommen später darauf zurück, wenn wir den nichtrelativistischen Grenzfall der Dirac-Gleichung analysieren.

Allgemein bezeichnen wir einen mehrkomponentigen Vektor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.2})$$

als einen *Spinor*, wenn die Komponenten im Zusammenhang mit dem Spin stehen. Wir erwarten $N \geq 2$, da wir die mindestens die beiden Komponenten (I.4.1) berücksichtigen müssen. Es stellt sich die Frage, ob $N = 2$ auch ausreicht!

Wir machen nun (Dirac folgend) den Ansatz

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H_D \Psi \quad (\text{I.4.3})$$

für die gesuchte Wellengleichung, mit dem noch zu bestimmenden Dirac-Hamilton-Operator H_D . Hierbei haben schon investiert, daß wir zur Vermeidung von Problem a) eine Gleichung 1. Ordnung in den Zeitableitungen haben wollen. Nach unseren Erfahrungen mit der Klein-Gordon-Gleichung ist dies eine Voraussetzung zur Vermeidung von Problemen bei der Wahrscheinlichkeitsinterpretation. Wegen der relativistischen Invarianz bedeutet dies, daß auch nur Ortsableitungen 1. Ordnung auftreten sollten. Aus dem gleichen Grund sollten keine weiteren Orts- oder Zeitabhängigkeiten zu berücksichtigen sein. Dies legt den folgenden Ansatz für den Dirac-Hamilton-Operator nahe:

$$H_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2. \quad (\text{I.4.4})$$

Diese Gleichung ist tatsächlich linear im Impulsoperator $\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$. Die noch zu bestimmenden Parameter α^μ (mit $\vec{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$) und β sind dabei Matrizen, da wir es mit einer mehrkomponentigen Wellenfunktion (I.4.2) zu tun haben. Dies muß aber auch so sein, um die Invarianz des Operators H_D unter Raumdrehungen zu gewährleisten, die wir freie Teilchen erwarten. Für unsere bisher betrachteten Hamilton-Operatoren war das kein Problem, da dort \vec{p} quadratisch einging und somit als Skalarprodukt invariant unter Rotationen war. Wären die Komponenten von $\vec{\alpha}$ keine Matrizen, so wäre wegen $\vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla}' \neq \vec{\nabla}$ die Drehinvarianz verletzt.

Wir wollen nun unsere Forderungen an den Wellengleichung etwas präzisieren. Sie soll

- (1) die richtige Energie-Impuls-Beziehung $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ für freie Teilchen liefern,
- (2) einer Kontinuitätsgleichung mit positiv-definiter Wahrscheinlichkeitsdichte genügen,
- (3) Lorentz-kovariant sein.

Im folgenden werden wir uns zunächst mit Punkt (1) beschäftigen. Die Punkte (2) und (3) werden dann automatisch erfüllt sein.

Zunächst überlegen wir uns, daß jede Komponente einer Lösung der (freien) Dirac-Gleichung der Klein-Gordon-Gleichung (I.3.11) genügt. Dies folgt z.B. daraus, daß die freien Lösungen der Dirac-Gleichung ebene Wellen

$$\Psi = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \quad (\text{I.4.5})$$

sein sollten, die ja auch Lösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung mit der gewünschten Energie-Impuls-Beziehung sind. Das Ganze ist nicht weiter überraschend, denn etwas ähnliches kennen wir bereits aus der Elektrodynamik. Dort genügen (im quellenfreien Fall) die elektromagnetischen Felder nicht nur den Maxwell-Gleichungen, die ja von 1. Ordnung in den Ableitungen sind, sondern auch der Wellengleichung, die von 2. Ordnung ist.

Wir schreiben die Wellengleichung (I.4.3), (I.4.4) unter Berücksichtigung der Einsteinschen Summenkonvention¹⁶ in der Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (c\alpha^\mu p_\mu + \beta m_0 c^2) \Psi \quad (\text{I.4.6})$$

mit dem Impulsoperator $p_\mu = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^\mu}$. Auf diese Gleichung wenden wir nun nochmals den Operator $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ an:

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (c\alpha^\mu p_\mu + \beta m_0 c^2) \Psi \\ &= i\hbar (c\alpha^\mu p_\mu + \beta m_0 c^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= (c\alpha^\mu p_\mu + \beta m_0 c^2) (c\alpha^\mu p_\mu + \beta m_0 c^2) \Psi \\ &= (c^2 \alpha^\mu \alpha^\nu p_\mu p_\nu + m_0 c^2 p_\mu (\alpha^\mu \beta + \beta \alpha^\mu) + m_0^2 c^4 \beta^2) \Psi \\ &= \left(c^2 p_\mu p_\nu \frac{\alpha^\mu \alpha^\nu + \alpha^\nu \alpha^\mu}{2} + m_0 c^2 p_\mu (\alpha^\mu \beta + \beta \alpha^\mu) + m_0^2 c^4 \beta^2 \right) \Psi. \end{aligned} \quad (\text{I.4.7})$$

Dabei haben wir in der zweiten Zeile ausgenutzt, daß der Ausdruck in der Klammer unabhängig von t ist. Im nächsten Schritt haben wir dann die Dirac-Gleichung verwendet, um die Zeitableitung durch den Hamilton-Operator zu ersetzen. Beim Quadrieren ist zu beachten, daß die α^μ und β Matrizen sind, die i.a. nicht kommutieren. Im letzten Schritt schließlich haben wir den Ausdruck $\alpha^\mu \alpha^\nu p_\mu p_\nu$ symmetrisiert, was möglich ist, da wir über alle μ und ν zu summieren haben.

Durch Vergleich von (I.4.7) mit der Klein-Gordon-Gleichung (I.3.11) lesen wir (durch ‘‘Koeffizientenvergleich’’) folgende Beziehungen zwischen den Matrizen ab:

$$\beta^2 = \mathbb{1}, \quad (\text{I.4.8})$$

$$\alpha^\mu \beta + \beta \alpha^\mu = 0, \quad (\text{I.4.9})$$

$$\alpha^\mu \alpha^\nu + \alpha^\nu \alpha^\mu = 2\delta_{\mu\nu} \mathbb{1}. \quad (\text{I.4.10})$$

¹⁶Hier wird nun allerdings nur über $\mu = 1, 2, 3$ summiert!

Gleichung (I.4.9) folgt z.B. aus der Tatsache, daß die Klein-Gordon-Gleichung keinen linearen Term im Impuls enthält. Weiterhin fordern wir, daß α^μ und β hermitesch sind, damit auch unser Hamilton-Operator H_D hermitesch ist. Es stellt sich nun die Frage, ob wir Matrizen finden können, die diesen Bedingungen genügen.

Wir werden zunächst einige Folgerungen aus den Gleichungen ableiten, die es uns erlauben werden, die Matrizen explizit zu bestimmen. Zunächst sehen wir, daß

$$(\alpha^\mu)^2 = \beta^2 = \mathbb{1} \quad (\text{I.4.11})$$

ist. Somit können nur die Eigenwerte ± 1 auftreten. Weiterhin folgt aus

$$\text{Spur } \beta = \text{Spur } (\beta(\alpha^\mu)^2) = \text{Spur}(\alpha^\mu \beta \alpha^\mu) = -\text{Spur}(\alpha^\mu \alpha^\mu \beta) = -\text{Spur } \beta \quad (\text{I.4.12})$$

daß

$$\text{Spur } \beta = 0 \quad (\text{I.4.13})$$

sein muß. Dabei haben wir im ersten Schritt Gleichung (I.4.11) benutzt, im zweiten die Invarianz der Spur unter zyklischen Vertauschungen und im dritten (I.4.10). Durch eine analoge Rechnung läßt sich zeigen, daß auch

$$\text{Spur } \alpha^\mu = 0 \quad (\text{I.4.14})$$

ist. Daraus folgt nun unmittelbar, daß die Eigenwerte $+1$ und -1 gleich oft auftreten müssen und somit, daß α^μ , β und Ψ eine gerade Dimension N besitzen. Wir werden nun die möglichen Fälle für N im einzelnen untersuchen.

Zunächst stellt sich die Frage, ob $N = 2$ nicht schon ausreichend ist. Dieser Fall scheidet aber aus, da wir unter den 2×2 -Matrizen nur drei antikommutierende finden können und nicht vier, wie wir wegen (I.4.9) und (I.4.10) benötigen. Diese drei Matrizen sind z.B. durch die Pauli-Matrizen σ^μ gegeben, zu denen man aber keine vierte Matrix mehr findet, so daß (I.4.9) und (I.4.10) erfüllt sind. Damit ist $N \geq 4$.

Als nächstes untersucht man den Fall $N = 4$. Tatsächlich finden sich in diesem Fall Matrizen, die der Algebra (I.4.8)–(I.4.10) genügen. Dies ist tatsächlich möglich. Wir geben die Matrizen explizit in einer speziellen Darstellung, der sog. Standarddarstellung, an:

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \alpha^k = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \sigma^k \\ \sigma^k & \mathbb{O} \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.15})$$

mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.4.16})$$

$\mathbb{1}$ ist die 2×2 -Einheitsmatrix und \mathbb{O} steht für eine 2×2 -Matrix, deren Elemente alle 0 sind.

Wir werden noch sehen, daß der Fall $N = 4$ Spin-1/2 Teilchen beschreibt. Tatsächlich können mit der Dirac-Gleichung auch Teilchen mit größerem halbzahligen Spin beschrieben werden. Der Spin 3/2 führt z.B. auf eine Gleichung mit $N = 8$ Komponenten. Allgemein gilt, daß die Dirac-Gleichung mit $N = 2n$ Komponenten Teilchen mit dem Spin $\frac{n-1}{2}$ beschreibt.

Bei Anwesenheit von elektromagnetischen Feldern haben wir, wie bei der Schrödinger-Gleichung, noch die Ersetzung von $E \rightarrow E - e\varphi$ und $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ vorzunehmen. Damit erhalten wir die *Dirac-Gleichung*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta m_0 c^2 + e\varphi \right] \Psi \quad (\text{I.4.17})$$

mit dem Spinor Ψ wie in (I.4.2).

Wir wollen im folgenden untersuchen, ob die Dirac-Gleichung (I.4.17) wirklich den am Anfang dieses Kapitels genannten Forderungen genügt. Wir haben diese zwar als Richtlinie bei der Konstruktion der Gleichung benutzt, ihre Gültigkeit ist damit aber noch nicht garantiert.

Zunächst wollen wir zeigen, daß die freie Dirac-Gleichung tatsächlich einer Kontinuitätsgleichung genügt, die eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion (bzw. des Spinors) zuläßt. Wir gehen dabei genauso vor, wie bei der Ableitung der Kontinuitätsgleichung im Falle der Schrödinger- und der Klein-Gordon-Gleichung. Dazu multiplizieren wir die freie Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[\frac{\hbar c}{i} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m_0 c^2 \right] \Psi \quad (\text{I.4.18})$$

von links mit $\Psi^+ = (\psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$ und subtrahieren davon die von rechts mit Ψ multiplizierte adjungierte Gleichung

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ = \left[-\frac{\hbar c}{i} \left(\vec{\nabla} \Psi^+ \right) \cdot \vec{\alpha} + m_0 c^2 \Psi^+ \beta \right]. \quad (\text{I.4.19})$$

Nach kurzer Rechnung ergibt sich

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ \Psi = \frac{\hbar c}{i} \vec{\nabla} \cdot (\Psi^+ \vec{\alpha} \Psi). \quad (\text{I.4.20})$$

Dies legt folgende Definitionen nahe:

$$\rho(x) := \Psi^+(x) \Psi(x), \quad \vec{j}(x) := c \Psi^+ \vec{\alpha} \Psi \quad (\text{I.4.21})$$

womit wir die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (\text{I.4.22})$$

erhalten. Für die Dichte $\rho(x)$ gilt nun

$$\rho = \Psi^+ \Psi = |\psi_1|^2 + \dots + |\psi_N|^2 \geq 0, \quad (\text{I.4.23})$$

d.h. ρ ist positiv-definit und läßt sich deshalb als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren. Damit ist gezeigt, daß die Dirac-Gleichung (I.4.18) tatsächlich eine wesentliche Forderung an eine relativistische Theorie für Elektronen erfüllt.

Als nächstes wollen wir uns mit der Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung beschäftigen.

I.4.1 Kovariante Form der Dirac-Gleichung

Zum Nachweis der Kovarianz der Dirac-Gleichung ist es zweckmäßig, die Gleichung mit Hilfe neuer Matrizen etwas umzuschreiben. Dazu definieren wir die *Diracschen γ -Matrizen*

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^k) \quad \text{mit} \quad \gamma^0 := \beta, \quad \gamma^k := \beta\alpha^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.24})$$

mit den Pauli-Matrizen (I.4.16). Die γ^μ sind also 4×4 -Matrizen. Wir multiplizieren nun die Dirac-Gleichung mit $\gamma^0 = \beta$:

$$\left[\gamma^0 \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e\varphi \right) - c \sum_{k=1}^3 \gamma^k \left(p^k - \frac{e}{c} A^k \right) - m_0 c^2 \right] \Psi = 0 \quad (\text{I.4.25})$$

bzw. nach Division durch c

$$\boxed{\left[i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0 c \right] \Psi = 0} \quad (\text{I.4.26})$$

und speziell im feldfreien Fall

$$[i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - m_0 c] \Psi(x) = 0. \quad (\text{I.4.27})$$

Wir sehen jetzt einen Grund für die Einführung der γ -Matrizen: Damit läßt sich die Dirac-Gleichung in kompakterer Form schreiben, insbesondere treten nun Raum- und Zeitabhängigkeiten in einer symmetrischeren Form auf.

Skalarprodukte der Form $\gamma^\mu a_\mu = \gamma^0 a^0 - \vec{\gamma} \cdot \vec{a}$ treten bei Rechnungen mit der Dirac-Gleichung häufiger auf. Man deshalb eine spezielle Abkürzung dafür eingeführt, den sogenannten *Feynman-Dolch*¹⁷

$$\not{a} := \gamma^\mu a_\mu \quad (\text{I.4.28})$$

wobei die Summationskonvention zu beachten ist. Damit nimmt die feldfreie Dirac-Gleichung die besonders einfache Form

$$\boxed{(i\hbar\not{\partial} - m_0 c) \Psi(x) = 0} \quad (\text{I.4.29})$$

an.

Die (Anti-)Vertauschungsrelationen

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \quad (\text{I.4.30})$$

für die γ -Matrizen folgen aus denen für α^k und β , siehe Gln. (I.4.8)–(I.4.10). $g^{\mu\nu}$ ist dabei der metrische Tensor (I.2.6). Außerdem gilt

$$(\gamma^0)^+ = \beta^+ = \beta = \gamma^0 \quad (\text{I.4.31})$$

¹⁷engl.: Feynman dagger

und (unter Ausnutzung von (I.4.9))

$$(\gamma^k)^+ = (\beta\alpha^k)^+ = (\alpha^k)^+ \beta^+ = \alpha^k \beta = -\beta\alpha^k = -\gamma^k. \quad (\text{I.4.32})$$

Damit ist also γ^0 hermitesch und γ^k ($k = 1, 2, 3$) antihermitesch. Dies läßt sich zusammenfassen zu

$$(\gamma^\mu)^+ = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0. \quad (\text{I.4.33})$$

Außerdem sind die γ^μ unitär (siehe Aufg. 6b).

Wäre γ^μ ein Vierervektor, so wäre die Kovarianz der Dirac-Gleichung in der Form (I.4.27) offensichtlich auf Grund der Invarianz von Skalarprodukten von Vierervektoren. Tatsächlich ist das Problem etwas diffiziler. Man kann nämlich zeigen, daß die Dirac-Matrizen in jedem Bezugssystem die gleiche Form haben¹⁸. Dazu macht man sich zunächst klar, daß die Überlegungen, die uns zu (I.4.27) geführt haben, auch in einem anderen Bezugssystem analog durchgeführt werden können. Es ergibt sich wieder Gleichung (I.4.27), wobei γ^μ durch γ'^μ und ∂_μ durch ∂'_μ zu ersetzen ist. Die Matrizen γ'^μ genügen aber wieder den Vertauschungsrelationen (I.4.30). Man kann nun zeigen, daß zwei vierdimensionale Darstellungen dieser Vertauschungsrelationen unitär äquivalent sind, d.h.

$$\gamma'^\mu = U \gamma^\mu U^{-1}. \quad (\text{I.4.34})$$

Damit können wir o.B.d.A. annehmen, daß die γ -Matrizen in den beiden Bezugssystemen gleich sind¹⁹, also $\gamma'^\mu = \gamma^\mu$.

Somit ist also die Dirac-Gleichung forminvariant (kovariant) unter Lorentz-Transformationen und hat in einem Lorentz-transformierten Bezugssystem die Form

$$[i\hbar\gamma^\mu\partial'_\mu - m_0c] \Psi'(x') = 0. \quad (\text{I.4.35})$$

Wir müssen nun noch bestimmen, wie sich der Spinor Ψ unter Lorentz-Transformationen verhält. Wir erwarten

$$\Psi'(x') = S(\Lambda)\Psi(x) \quad (\text{I.4.36})$$

mit $x' = \Lambda x$ unter einer Lorentz-Matrix Λ . Dabei ist $S(\Lambda)$ eine 4×4 -Matrix, d.h. unter Lorentz-Transformationen kann es zu einer Mischung der Komponenten von Ψ kommen. Wir erwarten eine lineare Transformation $\Psi \rightarrow \Psi'$, da sowohl die Dirac-Gleichung als auch die Lorentz-Transformation $x \rightarrow x'$ linear sind.

Mit $\Psi = S^{-1}\Psi'$ und $\partial_\mu = \Lambda^\nu{}_\mu\partial'_\nu$ haben wir

$$0 = [i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - m_0c] \Psi(x) = [i\hbar\gamma^\mu\Lambda^\nu{}_\mu\partial'_\nu - m_0c] S^{-1}\Psi'. \quad (\text{I.4.37})$$

Wenn wir nun erreichen könnten, daß

$$\Lambda^\nu{}_\mu\gamma^\mu = S^{-1}\gamma^\nu S \quad (\text{I.4.38})$$

¹⁸bzw. präziser: In der gleichen Form gewählt werden können.

¹⁹Dies können wir durch die unitäre Transformation, die ja die Physik nicht beeinflusst, immer erreichen!

gilt, so würde damit aus (I.4.37)

$$0 = S^{-1} [i\hbar\gamma^\nu \partial'_\nu - m_0c] \Psi'(x') \quad (\text{I.4.39})$$

folgen und somit (I.4.35), d.h. das gewünschte Transformationsverhalten wäre damit gewährleistet.

Die Frage nach dem Transformationsverhalten reduziert sich daher auf die Suche nach Lösungen von (I.4.38). Ohne Beweis sei hier angeführt, daß sich für jede Lorentz-Transformation Λ ein solches S konstruieren läßt. Damit kann dann Ψ' aus Ψ bestimmt werden und die Kovarianz der Wellenfunktion ist gewährleistet. Als Nebenprodukt der Konstruktion erhält man die nützliche Identität

$$S^+ \gamma^0 = \gamma^0 S^{-1}, \quad (\text{I.4.40})$$

die wir später noch ausnutzen werden. Der Beweis und die explizite Konstruktion erfordert langwierige algebraische Manipulationen. Wir verweisen z.B. auf das Buch von Bjorken/Drell (Kap. 2.2) oder den zweiten Band des Buches von Messiah. Dort finden sich in Kap. 20.3 die entsprechenden Rechnungen.

Als nächstes wollen wir auch die Kontinuitätsgleichung (I.4.22) in kovarianter Form schreiben. Zunächst definieren wir die *adjungierte Wellenfunktion*

$$\bar{\Psi} := \Psi^+ \gamma^0 = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*). \quad (\text{I.4.41})$$

Hiermit können wir nun die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ und die Stromdichte \vec{j} in einheitlicher Weise ausdrücken:

$$\rho = \Psi^+ \Psi = \Psi^+ (\gamma^0)^2 \Psi = \bar{\Psi} \gamma^0 \Psi, \quad (\text{I.4.42})$$

$$j^k = c \Psi^+ \alpha^k \Psi = c \Psi^+ \beta \gamma^k \Psi = c \bar{\Psi} \gamma^k \Psi. \quad (\text{I.4.43})$$

Somit können wir die Kontinuitätsgleichung schreiben als

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad \text{mit} \quad j^\mu = c \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi. \quad (\text{I.4.44})$$

Zum Nachweis der Kovarianz dieser Gleichung müssen wir noch zeigen, daß j^μ ein Vierervektor ist, damit das richtige Transformationsverhalten unter Lorentz-Transformationen garantiert ist. Dies läßt sich durch eine kurze Rechnung überprüfen:

$$\begin{aligned} j'^\mu &= c \bar{\Psi}' \gamma^\mu \Psi' \\ &= c (\Psi^+ S^+ \gamma^0) \gamma^\mu (S \Psi) = c \Psi^+ (S^+ \gamma^0) \gamma^\mu S \Psi \\ &= c \Psi^+ (\gamma^0 S^{-1}) \gamma^\mu S \Psi = c (\Psi^+ \gamma^0) (S^{-1} \gamma^\mu S) \Psi \\ &= c \bar{\Psi} (\Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu) \Psi \\ &= \Lambda^\mu{}_\nu j^\nu. \end{aligned} \quad (\text{I.4.45})$$

Dabei haben wir beim Übergang zur zweiten Zeile ausgenutzt, daß

$$\bar{\Psi}' = (S \Psi)^+ \gamma^0 = \Psi^+ S^+ \gamma^0 \quad (\text{I.4.46})$$

gilt. Außerdem wurden im 3. und 4. Schritt die Identität (I.4.40) und (I.4.38) verwendet.

I.4.2 Interpretation, freie Teilchen

Wir wollen nun den feldfreien Fall genauer betrachten. Dies wird uns vor allem bei der Interpretation der Lösungen weiterbringen. In der Konstruktion der Dirac-Gleichung hatten wir schon vorausgesetzt, daß die freien Lösungen von (I.4.18) ebene Wellen sind. Dies legt den Ansatz

$$\Psi(x) = w(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \quad (\text{I.4.47})$$

nahe. Dabei ist w ein 4-komponentiger Spinor, der vom Impuls abhängen kann. Wir erwarten daher vier Eigenwerte und dazu vier linear unabhängige Eigenfunktionen bzw. -spinoren w . Durch Einsetzen des Ansatzes (I.4.47) in die freie Dirac-Gleichung folgt

$$Ew(\vec{p}) = [c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2] w(\vec{p}). \quad (\text{I.4.48})$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem für die vier Komponenten von $w(\vec{p})$. Damit nicht-triviale Lösungen existieren, muß die Koeffizientendeterminante verschwinden:

$$\begin{aligned} 0 &= \det(E - c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} - \beta m_0 c^2) \\ &= \det \begin{pmatrix} E - m_0 c^2 & -c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ -c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & E + m_0 c^2 \end{pmatrix} \\ &= \det((E^2 - m_0^2 c^4 - c^2 p^2) \mathbb{1}) \\ &= (E^2 - m_0^2 c^4 - c^2 p^2)^2. \end{aligned} \quad (\text{I.4.49})$$

Dabei wurde beim Übergang zur dritten Zeile, neben bekannten Rechenregeln für Determinanten, die Identität

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \sum_{i,j} \sigma_i p_i \sigma_j p_j = \frac{1}{2} \sum_{i,j} p_i p_j (\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i) = \sum_{i,j} p_i p_j \delta_{ij} \mathbb{1} = p^2 \mathbb{1} \quad (\text{I.4.50})$$

verwendet. Wir finden also die beiden erwarteten Eigenwerte

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} = \pm E_p, \quad (\text{I.4.51})$$

die jeweils zweifach entartet sind. Zu jedem Impuls \vec{p} und zugehöriger Energie E_p oder $-E_p$ gibt es noch zwei Spinoren. Wir vermuten, daß dieser innere Freiheitsgrad mit dem Spin zusammenhängt. Diese Vermutung wollen wir im folgenden genauer untersuchen.

Für freie Teilchen ist der Gesamtdrehimpuls eine Konstante der Bewegung. Zunächst betrachten wir den *Bahndrehimpuls*

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla}. \quad (\text{I.4.52})$$

Für dessen Kommutator mit dem freien Dirac-Operator (I.4.18) ergibt sich

$$\begin{aligned} [H_D, L_z] &= \left[\frac{c\hbar}{i} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m_0 c^2, \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \\ &= -c\hbar^2 \left(\alpha_x \frac{\partial}{\partial y} - \alpha_y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= \frac{c\hbar}{i} (\vec{\alpha} \times \vec{p})_z \neq 0. \end{aligned} \quad (\text{I.4.53})$$

Somit kann der Bahndrehimpuls \vec{L} keine Bewegungskonstante sein. Es muß also einen weiteren Beitrag \vec{S} zum Gesamtdrehimpuls \vec{J} geben. Tatsächlich gilt

$$\vec{S} := \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \quad \text{mit} \quad \vec{\Sigma} := \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (\text{I.4.54})$$

Wir berechnen exemplarisch den Kommutator der z -Komponente mit dem Dirac-Operator H_D :

$$\begin{aligned} [H_D, S^z] &= \left[c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2, \frac{\hbar}{2} \Sigma_z \right] \\ &= \frac{c\hbar}{2} [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \Sigma_z] = \frac{c\hbar}{2} (p_x [\alpha_x, \Sigma_x] + p_y [\alpha_y, \Sigma_y] + p_z [\alpha_z, \Sigma_z]) \\ &= \frac{c\hbar}{i} (p_x \alpha_y - p_y \alpha_x) \\ &= -\frac{c\hbar}{i} (\vec{\alpha} \times \vec{p})_z. \end{aligned} \quad (\text{I.4.55})$$

Dabei haben wir folgende Kommutatorbeziehungen ausgenutzt:

$$[\beta, \Sigma_z] = 0, \quad [\alpha_x, \Sigma_z] = \frac{2}{i} \alpha_y, \quad [\alpha_y, \Sigma_z] = -\frac{2}{i} \alpha_x, \quad [\alpha_z, \Sigma_z] = 0, \quad (\text{I.4.56})$$

die man leicht durch explizite Rechnung nachprüft. Für den Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} := \vec{L} + \vec{S} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \quad (\text{I.4.57})$$

gilt daher

$$[H_D, \vec{J}] = 0, \quad (\text{I.4.58})$$

wobei die Rechnungen für $[H_D, J_x]$ und $[H_D, J_z]$ analog zu der für die z -Komponente verlaufen. An dieser Stelle sei betont, daß das Kommutieren von \vec{J} mit H_D durchaus nicht-trivial ist. Dies sieht man schon an den Rechnungen, die deutlich die unterschiedliche Rolle von \vec{L} und \vec{S} zeigen. Bei der Berechnung von $[H_D, L_z]$ kommt es wesentlich auf die Ableitungsoperatoren an, während die Matrixstruktur eigentlich keine Rolle spielt. Beim Kommutator mit den Spinkomponenten ist es genau umgekehrt. Hier spielen die Ableitungsoperatoren eine triviale Rolle und der Kommutator wird durch die Matrixstruktur bestimmt. Man bezeichnet deshalb manchmal den Spin als inneren Freiheitsgrad.

Wir haben gesehen, daß aus der Dirac-Gleichung zwangsläufig die Existenz eines inneren Drehimpulses folgt, der für das Elektron charakteristisch ist. Natürlich identifizieren wir diesen mit dem Elektronenspin.

Nun können wir auch anschaulich verstehen, warum die Dirac-Theorie auf einen 4-komponentigen Spinor führt. Die ersten beiden Komponenten gehören zu den Spin- \uparrow und Spin- \downarrow Zuständen mit positiver Energie, die 3. und 4. Komponenten zu Spin- \uparrow und Spin- \downarrow Zuständen mit negativer

Energie. Dies spiegelt sich auch in den freien Lösungen wieder. Ein System von vier unabhängigen Spinoren, die dem Gleichungssystem (I.4.48) genügen, ist durch

$$w_1(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p+m_0c^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad w_2(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p+m_0c^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (\text{I.4.59})$$

$$w_3(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p+m_0c^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad w_4(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E_p+m_0c^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.60})$$

gegeben. Dabei treten nur Beiträge in der ersten und dritten bzw. zweiten und vierten Komponente auf, die ja zu den Spin \uparrow bzw. Spin \downarrow Zuständen gehören. Außerdem überprüft man leicht, daß

$$H_D w_{1/2}(\vec{p}) = +E_p w_{1/2}(\vec{p}) \quad \text{und} \quad H_D w_{3/4}(\vec{p}) = -E_p w_{3/4}(\vec{p}) \quad (\text{I.4.61})$$

gilt, d.h. die Lösungen w_1, w_2 gehören zu positiven Energien, die Lösungen w_3, w_4 zu negativen. Es ist aber zu beachten, daß die Zustände keine Eigenzustände zu S^z sind. Da nur der Gesamtdrehimpuls mit H_D kommutiert, ist nur dieser gleichzeitig mit der Energie scharf meßbar.

Zur Veranschaulichung wollen wir uns noch den Spezialfall eines ruhenden Teilchens anschauen. Hier ist $p = 0$ und somit $H_D = \beta m_0 c^2$ mit den Energien $E_0 = \pm m_0 c^2$. Da in diesem Falle der Bahndrehimpuls verschwindet, kann der Spin S^z gleichzeitig mit der Energie scharf gemessen werden. Die Zustände (I.4.60) vereinfachen sich zu

$$w_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.62})$$

$$E = +E_0, \quad +E_0, \quad -E_0, \quad -E_0, \quad (\text{I.4.63})$$

$$S^z = +\frac{\hbar}{2}, \quad -\frac{\hbar}{2}, \quad +\frac{\hbar}{2}, \quad -\frac{\hbar}{2}. \quad (\text{I.4.64})$$

Für ruhende Teilchen, d.h. auch verschwindendem Bahndrehimpuls, klassifiziert also die z -Komponente des Spins die Spinoren, sonst nur J^z .

Zusammenfassend stellen wir nun noch einmal die wesentlichen dynamischen Größen der Dirac-Theorie zusammen:

- Ortsvektor \vec{r}
- Impuls \vec{p}
- Hamilton-Operator $H_D = c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + \beta m_0 c^2 + e\varphi$

- Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{r} \times \vec{p} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$
- Spin $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$
- Strom $\vec{j} = c\bar{\Psi}\vec{\gamma}\Psi = c\Psi^+\vec{\alpha}\Psi$.

Daneben lassen sich noch weitere interessante Größen definieren, die wir im folgenden kurz betrachten wollen.

Im Rahmen der Quantentheorie kann man einen *Geschwindigkeitsoperator* über das Korrespondenzprinzip aus der Hamiltonschen Theorie gemäß

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}. \quad (\text{I.4.65})$$

Speziell für den nichtrelativistischen Schrödinger-Hamiltonoperator ergibt sich hiermit

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m_0}. \quad (\text{I.4.66})$$

Wenden wir nun die Definition (I.4.65) auf den (freien) Dirac-Operator an, so folgt

$$\vec{v} := \frac{d\vec{r}}{dt} = c\vec{\alpha}. \quad (\text{I.4.67})$$

Zunächst fällt auf, daß die Komponenten v_x , v_y , v_z des Geschwindigkeitsoperators auf Grund von Gleichung (I.4.10) nicht miteinander vertauschen. Außerdem folgt aus

$$(c\alpha^j)^2 = c^2(\alpha^j)^2 = c^2\mathbb{1}, \quad (\text{I.4.68})$$

daß jede Komponente nur die Eigenwerte $\pm c$ annehmen kann. Dies scheint zunächst ungewöhnlich, da man daraus schließen könnte, daß sich relativistische Fermionen immer mit Lichtgeschwindigkeit bewegen. Man muß sich jedoch vor Augen halten, daß die Geschwindigkeitskomponenten nicht gleichzeitig mit der Energie scharf meßbar sind, da die entsprechenden Operatoren nicht mit H_D kommutieren. Relevant sind also nur Erwartungswerte $\langle v_j \rangle$.

Zur Illustration betrachten wir ein freies Teilchen mit Impuls p in z -Richtung im Zustand

$$w_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{E+m_0c^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.4.69})$$

wobei wir (I.4.60) und

$$\vec{p} \cdot \sigma \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = p\sigma^z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = p \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.70})$$

benutzt haben. Wir können nun den Erwartungswert von v_z in diesem Zustand ausrechnen (mit der Abkürzung $a = \frac{cp}{E+m_0c^2}$):

$$\begin{aligned}
\langle v_z \rangle &= c \langle \alpha_z \rangle = c \frac{w_1^\dagger \alpha_z w_1}{w_1^\dagger w_1} = c \frac{(1, 0, a, 0) \begin{pmatrix} \sigma^z & 0 \\ 0 & \sigma^z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ a \\ 0 \end{pmatrix}}{(1, 0, a, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ a \\ 0 \end{pmatrix}} = c \frac{(1, 0, a, 0) \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}}{1 + a^2} \\
&= \frac{2ac}{1 + a^2} = \frac{2c^2 p (E + m_0 c^2)}{(E + m_0 c^2)^2 + c^2 p^2} \\
&= \frac{c^2 p}{E} = \frac{p}{m}, \tag{I.4.71}
\end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt die relativistische Masse $m := \frac{E}{c}$ eingeführt haben. Dieses Ergebnis entspricht dem, was wir auf Grund des Korrespondenzprinzips erwartet haben.

Wie passen nun die Ergebnisse (I.4.71) und (I.4.67) zusammen? Hierzu hat Schrödinger 1930 vorgeschlagen, die Bewegung des Elektrons als eine Art *Zitterbewegung* um die klassische Bahn herum zu interpretieren.

Eine weitere interessante Größe ist der *Paritätsoperator* P , definiert durch

$$P := \beta P^{(0)} = \gamma^0 P^{(0)}, \tag{I.4.72}$$

wobei der Operator $P^{(0)}$ in üblicher Weise definiert ist durch

$$P^{(0)} f(\vec{r}) = f(-\vec{r}). \tag{I.4.73}$$

Allerdings vertauscht er nicht mit dem freien Dirac-Hamiltonoperator:

$$P^{(0)} (\vec{p} f(\vec{r})) = P^{(0)} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} f(\vec{r}) \right) = -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} f(-\vec{r}) = -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} (P^{(0)} f(\vec{r})), \tag{I.4.74}$$

d.h.

$$P^{(0)} \vec{p} = -\vec{p} P^{(0)}. \tag{I.4.75}$$

Wir erwarten aber, daß die Bewegung eines freien Teilchens paritätsinvariant ist. Daher muß es, ähnlich wie beim Drehimpuls, einen weiteren (inneren) Beitrag zum Paritätsoperator geben. Tatsächlich kommutiert der in (I.4.72) definierte Operator mit H_D :

$$\begin{aligned}
P H_D &= \beta P^{(0)} [c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2] = c\beta \vec{\alpha} \cdot (-\vec{p}) P^{(0)} + \beta m_0 c^2 \beta P^{(0)} \\
&= [c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2] \beta P^{(0)} = H_D P, \tag{I.4.76}
\end{aligned}$$

also

$$[H_D, P] = 0. \tag{I.4.77}$$

$P^{(0)}$ beschreibt die Bahnparität. Dazu tritt eine innere Parität auf, die durch β gekennzeichnet ist. Als Eigenwerte des Paritätsoperators kommen wegen $P^2 = 1$ nur ± 1 in Frage. Per definitionem schreibt man einem ruhende Elektron positiver Energie die Parität $+1$ zu. Tatsächlich gilt für ruhende freie Teilchen:

$$\beta w_1(0) = \beta \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = w_1(0), \quad \beta w_2(0) = w_2(0), \quad \beta w_3(0) = -w_3(0), \quad \beta w_4(0) = -w_4(0). \quad (\text{I.4.78})$$

Die Zustände positiver Energie haben also eine positive innere Parität, die negativer Energie eine negative.

Es sei noch angemerkt, daß im Rahmen der Quantenfeldtheorie jedem Elementarteilchen eine innere Parität zugeschrieben wird. Die Parität der Nukleonen (Proton und Neutron) ist dabei per definitionem $+1$. Da es bei der starken Wechselwirkung einen Erhaltungssatz für die Parität gibt folgt, daß die π -Mesonen eine negative Parität haben müssen. Für die wichtige Erkenntnis, daß die Erhaltung der Parität bei Prozessen der schwachen Wechselwirkung verletzt sein kann, haben Lee und Yang 1957 den Nobelpreis erhalten.

Abschließend wollen wir noch eine weitere Größe einführen, die zur Klassifikation freier Einteilchenzustände benutzt werden kann, die sogenannte *Helizität*. Der zugehörige Operator ist definiert durch

$$\Lambda_s := \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \cdot \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}. \quad (\text{I.4.79})$$

Dies ist also gerade die Spinkomponente in Richtung des Impulses. Man kann zeigen, daß

$$[H_D, \Lambda_s] = 0, \quad (\text{I.4.80})$$

ist, d.h. der Helizitätsoperator vertauscht mit dem freien Dirac-Hamiltonoperator. Als Eigenwerte können wieder nur ± 1 auftreten. Zustände mit positiver und negativer Helizität sind in Abb. I.4.1 veranschaulicht.

I.4.3 Löchertheorie und Ladungskonjugation

Wie wir gesehen haben, existieren in der Dirac-Theorie Lösungen mit negativer Energie $E = -\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$, wobei das Energiespektrum auch noch nach unten unbeschränkt ist. Diesem Problem waren wir schon im Rahmen der Klein-Gordon-Theorie begegnet, die auf das gleiche Spektrum für freie Teilchen führt (siehe Abb. I.3.1). Wenn alle Zustände negativer Energie wirklich zur Verfügung ständen, so würden alle Elektronen des Weltalls irgendwann durch Strahlungsübergänge "nach unten verschwinden". Insbesondere wäre der Grundzustand des Wasserstoffatoms instabil. Offensichtlich ist das Unsinn.

Dirac hat daher folgenden Ausweg vorgeschlagen. Es wird postuliert, daß alle Zustände negativer Energie schon besetzt sind und daß keine weitere Besetzung möglich ist. Letzteres folgt aus dem Pauli-Prinzip. Hierbei ist es von Bedeutung, daß die Dirac-Theorie Teilchen mit halbzahligen Spin beschreibt und solche Teilchen einer Fermi-Statistik (und damit dem Pauli-Prinzip)

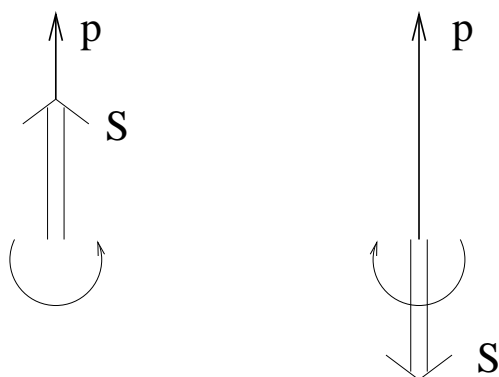


Abbildung I.4.1: Veranschaulichung von Zuständen mit positiver (links) und negativer (rechts) Helizität.

genügen. Wenn alle Negativenergiezustände einfach besetzt sind, bleiben für weitere Elektronen (nämlich diejenigen, die wir beobachten) nur die positiven Energiezustände übrig.

Wir definieren nun den Vakuumzustand durch

$$|\text{Vakuum}\rangle = |0\rangle := |\text{negative Energiezustände besetzt}\rangle. \quad (\text{I.4.81})$$

Man bezeichnet diesen Vakuumzustand auch als *Diracsee*. Das Vakuum ist also nicht leer, wie man naiv annehmen würde, sondern enthält unendlich viele Teilchen. Allgemein versteht unter einem Vakuumzustand den energetisch tiefsten, stabilen Zustand.

Mit Hilfe der 2. Quantisierung, die wir in Kapitel II genauer besprechen werden, lassen sich aus diesem Vakuum mit Hilfe des Operators $c_{p\sigma}^\dagger$, der ein Elektron mit Impuls \vec{p} und Spin σ erzeugt, Einteilchenzustände gemäß

$$|\vec{p}, \sigma\rangle := c_{p\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (\text{I.4.82})$$

generieren. Da wir $|0\rangle$ definiert haben und die Einteilchenzustände auch schon kennen, kann man (I.4.82) auch als Definition des Operators $c_{p\sigma}^\dagger$ auffassen.

Wir wollen uns nun mit den Konsequenzen des Diracschen Postulats beschäftigen. Bisher erscheint es nur als ein Kunstgriff, um die lästigen Zustände negativer Energie wegzudiskutieren. Tatsächlich hat es aber beobachtbare Konsequenzen, die eng mit der nichttrivialen Struktur des Vakuums zusammenhängen. Oben haben wir argumentiert, daß ein Elektron durch Aussendung eines Photons in einen Zustand niedrigerer Energie übergehen kann. Genauso ist auch der umgekehrte Prozeß denkbar: Ein Elektron negativer Energie kann durch Absorption eines Lichtquants in einen Zustand positiver Energie übergehen. Zurück bleibt ein *Loch* im Diracsee (siehe Abb. I.4.2a). Dieses Loch läßt sich zum einen interpretieren als Abwesenheit eines Elektrons mit Energie $-E$ und Ladung $-|e|$. Relativ zum *unbeobachtbaren* Diracsee haben wir auf der anderen Seite ein Teilchen positiver Energie mit positiver Ladung (Abb. I.4.2b)! Dieses Teilchen heißt *Positron*, es ist das Antiteilchen zum Elektron. Man muß sich vor Augen führen, daß das Positron zur Zeit der Entstehung der Diracschen Theorie noch nicht bekannt war²⁰. Die Theo-

²⁰Deshalb gab es auch Versuche, dieses Teilchen mit dem Proton zu identifizieren.

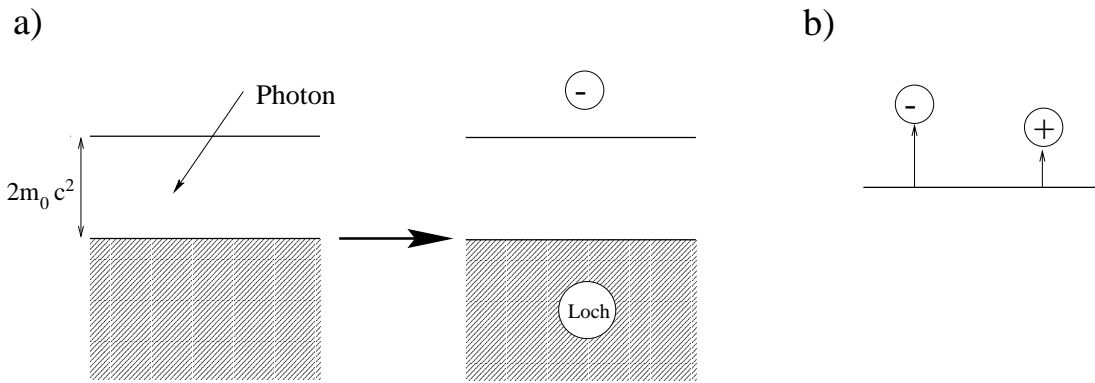


Abbildung I.4.2: Veranschaulichung der Löchertheorie. a) Ein Elektron negativer Energie absorbiert ein Lichtquant und geht in einen Zustand positiver Energie über. Im Diracsee bleibt ein Loch zurück. b) Physikalisches Bild des gleichen Prozesses.

rie hat hier also eine Vorhersage gemacht, die erst einige Jahre später experimentell verifiziert wurde. Physikalisch realisiert wird der oben beschriebene Prozeß im Rahmen der *Paarerzeugung*. Die gerade beschriebene Interpretation hat ihren Preis. Ausgehend von einer Einelektronentheorie (Dirac-Gleichung) sind wir über die Negativenergiezustände zum Begriff der Antiteilchen (oder Löcher) gelangt. Damit haben wir aber auch den Übergang zu einer Mehrelektronentheorie vollzogen. Sobald wir Wechselwirkungen zulassen, gibt es Paarerzeugung und damit Vielteilchenprozesse. Anschaulich gesprochen, ist ein Elektron, das wechselwirkt (z.B. mit dem elektromagnetischen Feld), niemals allein. Eine konsequente Behandlung der Vielteilchenprozesse geschieht im Rahmen der Quantenelektrodynamik (QED).

Wir wollen auch noch einmal eine weitere Besonderheit des Vakuums in der Dirac-Theorie hervorheben. Da es eine innere Struktur hat, läßt es sich im Prinzip manipulieren, z.B. durch äußere Felder. Dies ist tatsächlich nachweisbar. Außerdem hat das Vakuum eine unendliche (negative) Energie. Bei der Berechnung physikalischer Größen ist deshalb eine *Renormierung* notwendig.

Unsere bisherigen Betrachtungen waren unabhängig davon, daß das Elektron eine negative Ladung trägt. Die Dirac-Theorie sollte daher symmetrisch beim Übergang zu positiven Ladungen sein, d.h. unter *Ladungskonjugation* (vgl. die Diskussion im Rahmen der Klein-Gordon-Theorie in Kap. I.3.3).

Die Dirac-Gleichung für ein Elektron bzw. ein Positron lautet

$$\text{Elektron:} \quad \left[i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0 c \right] \Psi = 0 \quad (\text{I.4.83})$$

$$\text{Positron:} \quad \left[i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0 c \right] \Psi_c = 0. \quad (\text{I.4.84})$$

Dabei ist Ψ_c die Wellenfunktion des Positrons bzw. die ladungskonjugierte Wellenfunktion von Ψ .

Wir suchen eine Transformation, die Gleichung (I.4.83) in (I.4.84) überführt. Im folgenden werden wir zeigen, daß diese Transformation aus zwei Schritten besteht.

1. Ersetze alle Größen durch das Komplex-konjugierte:

$$i \rightarrow -i, \quad \Psi \rightarrow \Psi^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \psi_3^* \\ \psi_4^* \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.85})$$

2. Setze

$$\Psi_c = C\Psi^* := i\gamma^2\Psi^*. \quad (\text{I.4.86})$$

Es sei darauf hingewiesen, daß in der Literatur manchmal C durch $C' := C\gamma^0 = i\gamma^2\gamma^0$ ersetzt wird, d.h. $\Psi_c = C'\gamma^0\Psi^* = C'\bar{\Psi}^t$.

Wir zeigen nun, daß diese Transformation tatsächlich die Gleichungen ineinander überführt. Zunächst gehen wir aus der komplex-konjugierten Elektronengleichung:

$$\begin{aligned} 0 &= \left\{ \left[i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0c \right] \Psi \right\}^* \\ &= \left[-i\hbar(\gamma^\mu)^* \left(\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0c \right] \Psi^*. \end{aligned} \quad (\text{I.4.87})$$

Diese multiplizieren wir von links mit $i\gamma^2$:

$$\begin{aligned} 0 &= \gamma^2 \left[-i\hbar(\gamma^\mu)^* \left(\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0c \right] (\gamma^2)^{-1} (i\gamma^2\Psi^*) \\ &= \left[i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m_0c \right] \Psi_c. \end{aligned} \quad (\text{I.4.88})$$

Dabei haben wir im letzten Schritt die Identität

$$\gamma^2(\gamma^\mu)^*(\gamma^2)^{-1} = -\gamma^\mu \quad (\text{I.4.89})$$

ausgenutzt. Diese läßt sich einfach unter Ausnutzung der Kommutatoreigenschaften der γ -Matrizen nachweisen:

$$\gamma^2(\gamma^0)^*(\gamma^2)^{-1} = \gamma^2\gamma^0(\gamma^2)^{-1} = -\gamma^0\gamma^2(\gamma^2)^{-1} = -\gamma^0, \quad (\text{I.4.90})$$

$$\gamma^2(\gamma^1)^*(\gamma^2)^{-1} = \gamma^2\gamma^1(\gamma^2)^{-1} = -\gamma^1\gamma^2(\gamma^2)^{-1} = -\gamma^1, \quad (\text{I.4.91})$$

$$\gamma^2(\gamma^2)^*(\gamma^2)^{-1} = -\gamma^2\gamma^2(\gamma^2)^{-1} = -\gamma^2. \quad (\text{I.4.92})$$

Die Identität für γ^3 beweist man analog zum Fall γ^1 . Für γ^2 hat man zu beachten, daß diese Matrix (im Gegensatz zu den anderen dreien) in der Standarddarstellung komplexe Einträge enthält, wobei $(\gamma^2)^* = -\gamma^2$ ist.

Somit haben wir die Symmetrie der Dirac-Gleichung unter Ladungskonjugation explizit nachgewiesen. Wir wollen sie uns noch einmal am Spezialfall eines ruhenden freien Teilchens negativer Energie veranschaulichen. Genauer betrachten wir ein Teilchen im Zustand (vgl. (I.4.64))

$$w(p=0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.93})$$

mit der Energie $E = -m_0c^2$ und Spin $-\frac{\hbar}{2}$. Für den ladungskonjugierten Zustand ergibt sich dann

$$w_c = i\gamma^2 w^* = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.4.94})$$

Dies ist ein Zustand mit positiver Energie $E = m_0c^2$ und Spin $\frac{\hbar}{2}$.

I.4.4 Nichtrelativistischer Grenzfall

Im folgenden wollen wir der Frage nachgehen, was sich aus der Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left[c\vec{\alpha} \cdot \vec{\Pi} + \beta m_0c^2 + e\varphi \right] \Psi \quad (\text{I.4.95})$$

im nichtrelativistischen Grenzfall ergibt. Dabei haben wir den kinetischen Impuls

$$\vec{\Pi} := \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \quad (\text{I.4.96})$$

eingeführt. Zur Untersuchung dieser Frage ist eine Darstellung in der Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \begin{pmatrix} \tilde{\chi} \\ \tilde{\pi} \end{pmatrix} + e\varphi \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} + m_0c^2 \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ -\tilde{\chi} \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.97})$$

zweckmässig, mit den 2-komponentigen Vektoren $\tilde{\phi}$ und $\tilde{\chi}$, so daß $\Psi = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$. Bei der Ableitung von (I.4.97) haben wir die explizite Form der Matrizen α^k und β in Standarddarstellung ausgenutzt.

Wie schon bei der entsprechenden Untersuchung der Klein-Gordon-Gleichung nehmen wir die Transformation

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{m_0c^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.98})$$

vor. Die neuen Vektoren ϕ und χ sind relativ langsam veränderlich in der Zeit, da m_0c^2 im nichtrelativistischen Grenzfall die größte Energie ist und damit für die schnellen Oszillationen im Zeitentwicklungsoperator verantwortlich. Nach der Transformation erhalten wir

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = c\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \begin{pmatrix} \chi \\ \pi \end{pmatrix} + e\varphi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} - 2m_0c^2 \begin{pmatrix} 0 \\ -\chi \end{pmatrix} \quad (\text{I.4.99})$$

Der nichtrelativistische Grenzfall ist nun dadurch gekennzeichnet, daß die Ruheenergie m_0c^2 die größte Energie ist und somit

$$|E - m_0c^2| \ll m_0c^2, \quad |e\varphi| \ll m_0c^2, \quad \text{etc.} \quad (\text{I.4.100})$$

Damit können wir die Gleichung für die 2. Komponente von (I.4.99) vereinfachen zu

$$\chi \approx \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}}{2m_0c} \phi, \quad (\text{I.4.101})$$

wobei wir auch die Zeitableitung vernachlässigt haben, was auf Grund der Transformation (I.4.98) auf langsam veränderliche Größen zulässig ist. Da $p \propto v$, ist χ um einen Faktor der $\frac{v}{c}$ kleiner als ϕ . Man bezeichnet daher manchmal auch ϕ als *große Komponente* und χ als *kleine Komponente* von Ψ .

Setzen wir nun (I.4.101) in die erste Komponente von (I.4.99) ein, so erhalten wir eine 2-komponentige Spinorgleichung für ϕ :

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})}{2m_0c} + e\varphi \right) \phi. \quad (\text{I.4.102})$$

Zur Vereinfachung bedienen wir uns der Identität

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b})\mathbb{1} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}), \quad (\text{I.4.103})$$

die aus der Quantenmechanik-Vorlesung bekannt sein sollte. Angewandt auf den Fall $\vec{a} = \vec{b} = \vec{\Pi}$ ergibt sich

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2 = \Pi^2 + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{\Pi} \times \vec{\Pi}) = \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma} \cdot \vec{B}. \quad (\text{I.4.104})$$

Dabei ist zu beachten, daß $\vec{\Pi} \times \vec{\Pi}$ nicht verschwindet wie bei klassischen Vektoren, da es sich bei $\vec{\Pi}$ um einen Operator handelt, dessen Komponenten nicht-triviale Vertauschungsrelationen erfüllen, z.B.

$$\begin{aligned} (\vec{\Pi} \times \vec{\Pi})_z &= \Pi_x \Pi_y - \Pi_y \Pi_x = [\Pi_x, \Pi_y] \\ &= \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right] = -\frac{e\hbar}{ic} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \\ &= -\frac{e\hbar}{ic} (\text{rot } \vec{A})_z = -\frac{e\hbar}{ic} B_z. \end{aligned} \quad (\text{I.4.105})$$

Aus den Gleichungen (I.4.102) und (I.4.104) erhalten wir dann die bekannte *Pauli-Gleichung*

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_0} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2m_0c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + e\varphi \right] \phi =: H_P \phi.} \quad (\text{I.4.106})$$

Dies ist eine zweikomponentige Schrödinger-Gleichung, wobei die beiden Komponenten $\psi(\vec{r}, t; +)$ und $\psi(\vec{r}, t; -)$ gerade den beiden Spinfreiheitsgraden eines Spin-1/2-Teilchens entsprechen. Der Term $\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ berücksichtigt die Zeeman-Aufspaltung dieser Freiheitsgrade in einem äußeren Magnetfeld.

Die Tatsache, daß sich die Dirac-Gleichung im nichtrelativistischen Fall auf die bereits früher bekannte Pauli-Gleichung reduziert, die speziell zur Berücksichtigung des Spins entwickelt wurde, zeigt noch einmal, daß die Dirac-Gleichung Spin-1/2-Teilchen beschreibt.

Wir betrachten speziell den Fall eines schwachen homogenen Magnetfeldes

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} \quad \text{mit} \quad \vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}. \quad (\text{I.4.107})$$

Die Pauli-Gleichung liefert dann

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2m_0} - \frac{e}{2m_0 c} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \right] \phi \quad (\text{I.4.108})$$

mit dem Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ und dem Elektronenspin $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$. Die Größe

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0 c} \quad (\text{I.4.109})$$

heißt *Bohrsches Magneton*. Ein wichtiger Erfolg der Dirac-Gleichung ist nun, daß sie den Koeffizienten 2 vor \vec{S} korrekt vorhersagt und somit das richtige magnetische Moment des Elektrons mit dem gyromagnetischen Verhältnis (g-Faktor) $g = 2$.

Eine genauere Analyse des schwach relativistischen Grenzfalls ergibt weitere Korrekturterme:

$$H_D \approx H_P + H_{\text{rel}} + H_{SB} \quad (\text{I.4.110})$$

mit dem Pauli-Hamilton-Operator H_P , der relativistischen Massenzunahme (bzw. relativistischen Korrektur der kinetischen Energie)

$$H_{\text{rel}} = -\frac{\hbar}{2m_0 c} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{I.4.111})$$

und der *Spin-Bahn-Kopplung*

$$H_{SB} = \frac{1}{2m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}. \quad (\text{I.4.112})$$

Dabei haben wir angenommen, daß $V := e\varphi$ ein Zentralpotential ist. Deshalb tritt z.B. in Gl. (I.4.111) nur der Radialimpuls auf. Die Spin-Bahn-Kopplung ist wichtig zum Verständnis der Feinstruktur von Atomspektren. Wir werden darauf im nächsten Abschnitt näher eingehen.

Abschliessend soll noch einmal hervorgehoben werden, daß man das Ergebnis für den g-Faktor ebenso wie die Existenz des Spins nicht als relativistischen Effekt interpretieren sollte, wie das in einigen Lehrbüchern getan wird. Tatsächlich ist es eine Folge der Linearisierung des Hamilton-Operators. Das richtige magnetische Moment mit $g = 2$ findet man z.B. auch durch eine analoge Linearisierung des nichtrelativistischen Hamilton-Operators, die auf

$$H_{\text{lin}} = \left[\hbar \begin{pmatrix} \mathbb{O} & \mathbb{O} \\ \mathbb{1} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} + \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \vec{p} + \begin{pmatrix} 0 & 2m_0 i \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \Psi = 0 \quad (\text{I.4.113})$$

mit einem Viererspinor Ψ .

I.4.5 Relativistisches Wasserstoffproblem

Die Dirac-Gleichung ist nur in speziellen Fällen streng lösbar. Dazu zählen glücklicherweise die physikalisch wichtigen Probleme eines Elektrons im homogenen Magnetfeld oder im Coulombpotential. Wir werden im folgenden einen kurzen Überblick über die Behandlung des Wasserstoffatoms im Rahmen der Dirac-Theorie geben. Der Diracsche Hamiltonoperator für ein Elektron im Coulombpotential eines Protons hat folgende Gestalt:

$$H_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2 + V(r) \quad \text{mit} \quad V(r) = -\frac{e^2}{r}. \quad (\text{I.4.114})$$

Um die Energieeigenwerte zu finden müssen wir die stationäre Dirac-Gleichung $H_D \Psi = E \Psi$ lösen. Dabei ist es zweckmässig, den Viererspinor Ψ in zwei Zweierspinoren ϕ, χ zu zerlegen:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \phi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.4.115})$$

Da H mit dem Gesamtdrehimpuls \vec{J} und dem Paritätsoperator P vertauscht, suchen wir eine gemeinsame Eigenbasis zu H, J^2, J_z und P . Der Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ setzt sich zusammen aus dem Bahndrehimpuls \vec{L} und dem Spin \vec{S} . Die Eigenzustände und -werte kennen wir:

$$J^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle, \quad (\text{I.4.116})$$

$$J_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle, \quad (\text{I.4.117})$$

wobei auf Grund der Regeln für die Drehimpulsaddition $j = l \pm \frac{1}{2}$ ist, d.h. die möglichen Werte sind $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ ²¹.

Der Paritätsoperator P hat nur die Eigenwerte ± 1 , die wir in der Form $(-1)^{j+\frac{1}{2}a}$ mit $a = \pm 1$ schreiben, d.h.

$$P\Psi = \beta P^{(0)}\Psi = (-1)^{j+\frac{1}{2}a}\Psi. \quad (\text{I.4.118})$$

Hieraus ergibt sich für die Bahnparität $P^{(0)}$

$$P^{(0)}\Psi = P^{(0)} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \beta^{-1} P\Psi = \beta (-1)^{j+\frac{1}{2}a}\Psi = (-1)^{j+\frac{1}{2}a} \begin{pmatrix} \phi \\ -\chi \end{pmatrix}. \quad (\text{I.4.119})$$

Wir sehen also, daß die Komponenten ϕ und χ unterschiedliche Bahnparitäten haben. Die von ϕ ist $(-1)^{j+\frac{1}{2}a}$, die von χ aber $(-1)^{j-\frac{1}{2}a}$. Wir setzen im folgenden $l = j + \frac{1}{2}a$ und $l' = j - \frac{1}{2}a$.

Die Strategie im folgenden ist analog zum Vorgehen bei der nichtrelativistischen Behandlung des Problems. Zunächst gehen wir zu Kugelkoordinaten r, θ, φ über, um die Kugelsymmetrie des Problems auszunutzen. Es ist zu erwarten, daß damit die Winkelabhängigkeit im wesentlichen bestimmt ist. Danach wird dann die explizite Form des Potentials benötigt, um die Radialabhängigkeit zu bestimmen.

²¹Beachte, daß l als Bahndrehimpuls immer ganzzahlig ist.

Die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses sind bekanntlich die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Für den Gesamtdrehimpuls müssen diese mit den Zuständen $|\mu\rangle = |\pm\rangle$ des Spins zusammengesetzt werden. Sei daher $\mathcal{Y}_{Ljm}(\theta, \varphi, \mu)$ der zweikomponentige Spinor zum Gesamtdrehimpuls $j = l \pm \frac{1}{2}$, wobei L für l oder l' stehen kann, d.h. $L = j \pm \frac{1}{2}$. Die explizite Form der \mathcal{Y}_{Ljm} kann mittels der Regel für die Drehimpulsaddition angegeben werden. Dabei treten die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} und die Spineigenfunktionen $|\mu\rangle$ zusammen mit den entsprechenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten auf. Wir geben sie hier nicht explizit an, da sie im folgenden nicht benötigt wird. Die zweikomponentigen Größen $\phi = \phi(r, \theta, \varphi, \mu)$ und $\chi = \chi(r, \theta, \varphi, \mu)$ sind daher als Eigenfunktionen von J^2 proportional zu $\mathcal{Y}_{Ljm}(\theta, \varphi, \mu)$. Das dabei in Frage kommende L ergibt sich aus der Bahnparität. Da

$$P^{(0)}\mathcal{Y}_{Ljm}(\theta, \varphi, \mu) = (-1)^L\mathcal{Y}_{Ljm}(\theta, \varphi, \mu) \quad (\text{I.4.120})$$

folgt, unter Beachtung von (I.4.119),

$$\phi(r, \theta, \varphi, \mu) = f(r)\mathcal{Y}_{ljm}(\theta, \varphi, \mu), \quad (\text{I.4.121})$$

$$\chi(r, \theta, \varphi, \mu) = g(r)\mathcal{Y}_{l'jm}(\theta, \varphi, \mu). \quad (\text{I.4.122})$$

Dabei sind $f(r)$ $g(r)$ noch zu bestimmende Radialfunktionen. Außerdem gilt die folgende Identität

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r}\mathcal{Y}_{ljm} = -\mathcal{Y}_{l'jm}, \quad (\text{I.4.123})$$

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r}\mathcal{Y}_{l'jm} = -\mathcal{Y}_{ljm}, \quad (\text{I.4.124})$$

die wir hier nicht beweisen wollen²².

Somit lautet die (stationäre) Dirac-Gleichung

$$\begin{aligned} E \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} &= H_D \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \left[c\vec{p} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} + V(r) + m_0c^2 \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (V + m_0c^2)\phi + c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\chi \\ (V - m_0c^2)\chi + c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\phi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{I.4.125})$$

Explizit haben wir daher unter Berücksichtigung von (I.4.122) folgendes Gleichungssystem

$$(E - m_0c^2 - V)f\mathcal{Y}_{ljm} = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})g\mathcal{Y}_{l'jm}, \quad (\text{I.4.126})$$

$$(E + m_0c^2 - V)g\mathcal{Y}_{l'jm} = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})f\mathcal{Y}_{ljm}. \quad (\text{I.4.127})$$

Unser Ziel ist es nun, hieraus ein Differentialgleichungssystem für die Radialfunktionen f und g abzuleiten. Dabei wollen wir (I.4.124) ausnutzen. Damit dies möglich wird, erinnern wir uns zunächst an die allgemeine Identität (I.4.103) für die Pauli-Matrizen. Speziell für $\vec{a} = \vec{b} = \vec{r}$ folgt hieraus nämlich

$$\frac{1}{r^2}(\vec{\sigma} \cdot \vec{r})(\vec{\sigma} \cdot \vec{r}) = 1. \quad (\text{I.4.128})$$

²²Entscheidend ist hierfür, daß $\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r}$ ein skalarer Operator mit negativer Parität ist.

Dies läßt sich nun gewinnbringend nutzen:

$$\begin{aligned}
(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})g\mathcal{Y}_{ljm} &= \frac{1}{r^2}(\vec{\sigma} \cdot \vec{r})(\vec{\sigma} \cdot \vec{r})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})g\mathcal{Y}_{ljm} \\
&= \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r^2} \left[\vec{r} \cdot \vec{p} + i\vec{\sigma} \cdot \vec{L} \right] g\mathcal{Y}_{ljm} = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r} \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2i}{\hbar r} \vec{S} \cdot \vec{L} \right] g\mathcal{Y}_{ljm} \\
&= \frac{\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{i r} \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{a}{2r}(2j+1) \right] g\mathcal{Y}_{ljm} \\
&= -\hbar \frac{\mathcal{Y}_{ljm}}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{a(2j+1)}{r} \right] \frac{ig}{r}.
\end{aligned} \tag{I.4.129}$$

Dabei haben wir zunächst beim Übergang zur zweiten Zeile erneut die Identität (I.4.103) ausgenutzt, zusammen mit $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. Beim Übergang zur dritten Zeile wurde dann die Wirkung von $\vec{S} \cdot \vec{L}$ auf die verallgemeinerte Kugelflächenfunktion \mathcal{Y}_{ljm} ausgenutzt:

$$\begin{aligned}
2(\vec{S} \cdot \vec{L})\mathcal{Y}_{ljm} &= [J^2 - L^2 - S^2] \mathcal{Y}_{ljm} = \hbar^2 \left[j(j+1) - l'(l'+1) - \frac{3}{4} \right] \mathcal{Y}_{ljm} \\
&= \hbar^2 \left[\frac{a}{2}(2j+1) - 1 \right] \mathcal{Y}_{ljm}.
\end{aligned} \tag{I.4.130}$$

Dabei haben wir den üblichen Trick zur Berechnung von Skalarprodukten von Drehimpulsen angewendet und das Skalarprodukt mit Hilfe der Summe $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ der beteiligten Drehimpulse auf Drehimpulsquadrate zurückgeführt, die in einfacher und bekannter Weise auf die Funktionen \mathcal{Y}_{ljm} wirken.

Beim Übergang zur letzten Zeile in (I.4.129) haben wir dann wieder (I.4.129) verwendet. Vorher muß allerdings $\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r}$ an $\frac{\partial}{\partial r}$ vorbei kommutiert werden. Für die Funktionen F und G , die mit f und g gemäß

$$F(r) = rf(r) \quad \text{und} \quad G(r) = -irg(r) \tag{I.4.131}$$

zusammenhängen, erhalten wir dann folgendes Differentialgleichungssystem:

$$[E - m_0c^2 - V] F = c\hbar \left[-\frac{\partial}{\partial r} + \frac{a(j+1/2)}{r} \right] G, \tag{I.4.132}$$

$$[E + m_0c^2 - V] G = c\hbar \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{a(j+1/2)}{r} \right] F, \tag{I.4.133}$$

mit den Randbedingungen $F(0) = G(0) = 0$. Mit den Abkürzungen

$$V = -\frac{e^2}{r}, \quad \nu = \sqrt{\frac{m_0c^2 - E}{m_0c^2 + E}}, \quad \tau = a \left(j + \frac{1}{2} \right), \tag{I.4.134}$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{m_0^2c^4 - E^2}}{c\hbar}, \quad \rho = \kappa r, \quad \alpha = \frac{e^2}{c\hbar} \tag{I.4.135}$$

folgt dann

$$\left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{\tau}{\rho} \right] G = \left[-\nu + \frac{\alpha}{\rho} \right] F, \quad (\text{I.4.136})$$

$$\left[\frac{d}{d\rho} + \frac{\tau}{\rho} \right] F = \left[\frac{1}{\nu} + \frac{\alpha}{\rho} \right] G. \quad (\text{I.4.137})$$

α heißt auch *Feinstrukturkonstante*. Sie hat numerisch in sehr guter Näherung den Wert $\alpha \approx \frac{1}{137}$. Dabei ist es wichtig, daß $\alpha \ll 1$ ist und somit als Entwicklungsparameter dienen kann. Die einzigen Lösungen des Gleichungssystems (I.4.136), (I.4.137), die am Ursprung regulär und quadratintegrabel sind, haben die Form

$$F_{n'}(\rho) = \rho^s e^{-\rho} \sum_{n=0}^{n'} F_n \rho^n, \quad (\text{I.4.138})$$

$$G_{n'}(\rho) = \rho^s e^{-\rho} \sum_{n=0}^{n'} G_n \rho^n, \quad (\text{I.4.139})$$

mit $s = \sqrt{\tau^2 - \alpha^2}$. Die Entwicklungskoeffizienten F_n und G_n geben wir hier nicht explizit an. Wegen der Normierbarkeit müssen die Reihen abbrechen (d.h. $n' < \infty$). Dies liefert die diskreten Energieeigenwerte

$$E = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n' + s)^2}} \right)^{-1}, \quad (n' = 0, 1, 2, \dots). \quad (\text{I.4.140})$$

Überlicherweise verwendet man die *Hauptquantenzahl* $n = n' + j + \frac{1}{2} = 1, 2, 3, \dots$:

$$E_{nj} = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - j + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2} \right)^2}} \right)^{-1} \quad (\text{I.4.141})$$

$$= m_0 c^2 \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} + \frac{\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + O(\alpha^6) \right]. \quad (\text{I.4.142})$$

Die Terme in der Entwicklung nach α lassen sich leicht interpretieren. Neben der Ruheenergie und der bekannten Rydberg-Energie tritt als Korrektor der Ordnung α^4 die sogenannte *Feinstruktur* auf. In der Tabelle I.4.5 sind die niedrigsten Energiezustände mit ihren Energien und Quantenzahlen zusammengefaßt. Dabei wurde die spektroskopische Notation nl_j benutzt.

	n	l	j	$E_{nj}/m_0 c^2$
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	$\sqrt{1 - \alpha^2}$
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	$\sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - \alpha^2}}{2}}$
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	$\sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - \alpha^2}}{2}}$
$2s_{3/2}$	2	1	3/2	$\frac{1}{2} \sqrt{4 - \alpha^2}$

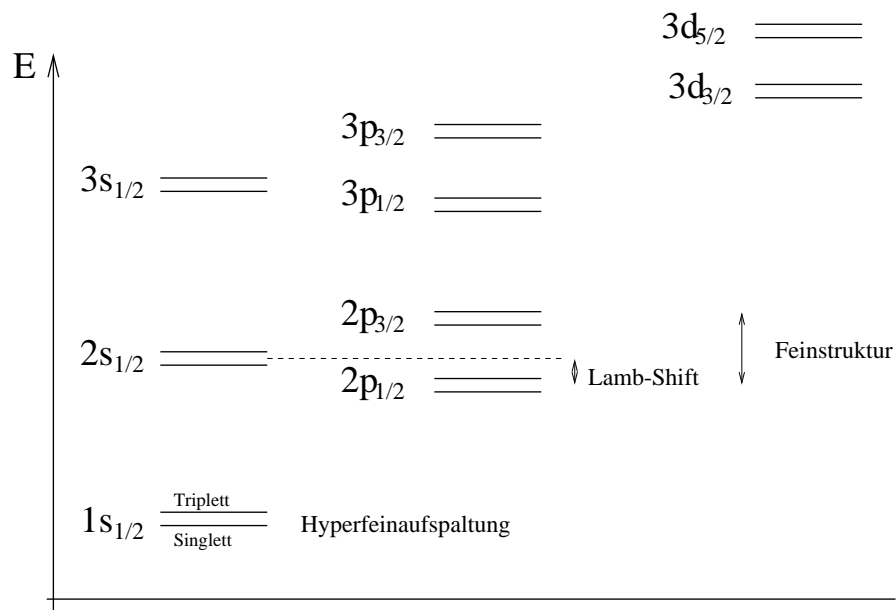


Abbildung I.4.3: Spektrum des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der relativistischen Korrekturen, der Hyperfeinaufspaltung und der Korrekturen durch die QED.

Neben den relativistischen Effekten, die für die Feinstruktur des Spektrums verantwortlich sind, spielen eine Reihe weiterer Effekte eine Rolle. Im einzelnen sind dies:

- Die Kopplung des Protonenspins, den wir total vernachlässigt haben, mit dem Elektronenspin bewirkt die *Hyperfinaufspaltung* in ein Singlett und ein Triplet.
- Die Wechselwirkung des Elektrons mit Fluktuationen des quantisierten Strahlungsfeldes, den *Vakuumfluktuationen*, führt zur sogenannten *Lamb-Shift*. Hierbei wird die Entartung von Niveaus mit gleichem n und j , aber unterschiedlichem l aufgehoben. Dieser Effekt kann im Rahmen der QED sehr genau berechnet werden.
- Die *Spin-Bahnwechselwirkung*, die ja bereits in der Dirac-Gleichung und damit in (I.4.141) enthalten ist, ist für die Feinstruktur des Spektrums verantwortlich, d.h. die Aufhebung der Entartung²³ der Zustände zu gleichem n und l , aber verschiedenem j .

Abb. I.4.3 zeigt das Spektrum des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung all dieser Korrekturen.

²³Diese Entartung ergibt sich bei einer nichtrelativistischen Beschreibung mit der Schrödinger-Gleichung.

Kapitel II

Quantenfeldtheorie

Bisher haben wir Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden betrachtet, z.B. ein Teilchen, das sich in einem Potential V bewegt. Bei der Diskussion der Dirac-Theorie haben wir aber gesehen, daß man es auf Grund von Paarerzeugungs- und -vernichtungsprozessen in natürlicher Weise mit vielen (sogar unendlich vielen) Teilchen zu tun. Dies führt zur (Quanten-)Feldtheorie. Schematisch kann man das so formulieren. Ist N die Zahl der Freiheitsgrade des Systems, so ist

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{Quantenmechanik} = \text{Quantenfeldtheorie.} \quad (\text{II.0.1})$$

Ein weiteres Problem, für das im folgenden eine adäquate Beschreibung gefunden werden soll, betrifft die Beschreibung von Teilchenerzeugung und -vernichtung. Auf Grund der Normierung der Wellenfunktion ist dies bisher nicht möglich. Die Normierung auf 1 besagt ja, daß die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Teilchen irgendwo befindet, gerade 1 ist.

Bevor wir uns mit Quantenfeldtheorien beschäftigen, müssen wir einige technische Grundlagen schaffen. Zunächst sei an den Formalismus für klassische Feldtheorien erinnert.

II.1 Klassische Feldtheorie

In der klassischen Mechanik gibt es zwei äquivalente Vorgehensweisen, basierend auf den Newtonschen Bewegungsgleichungen oder dem Hamiltonschen Variationsprinzip. Der große Vorteil der Hamiltonschen Formulierung ist, daß sie sich relativ einfach quantenmechanisch verallgemeinern läßt. Dies ist bei den Newtonschen Bewegungsgleichungen, die die Vorstellung einer deterministischen Bewegung auf der klassischen Bahn zugrunde liegt, nicht möglich. Wie wir wissen, ist diese Vorstellung in der Quantenmechanik falsch. Im Rahmen des Hamiltonschen Variationsprinzips kann man leicht berücksichtigen, daß das Teilchen keiner wohldefinierten Bahn folgt, da die Wirkung für beliebige Bahnen (nicht nur die klassische) definiert werden kann (s.u.). Eine entscheidende Größe für das Hamiltonsche Variationsprinzip ist die *Lagrange-Funktion*

$$L(\{q_j, \dot{q}_j\}) = T - V, \quad (\text{II.1.1})$$

d.h. die Differenz aus kinetischer Energie T und potentieller Energie V . Sie hängt von den *verallgemeinerten Koordinaten* q_j und den *verallgemeinerten Geschwindigkeiten* \dot{q}_j ab ($j = 1, \dots, f$),

bei denen evtl. bestehende Zwangsbedingungen schon berücksichtigt wurden. Das *Hamiltonschen Variationsprinzip* besagt nun, daß

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(\{q_j, \dot{q}_j\}) dt \stackrel{!}{=} 0, \quad (\text{II.1.2})$$

wobei die Variation so auszuführen ist, daß $\delta q_j(t_1) = \delta q_j(t_2) = 0$ ist. Die Größe $\int L(\{q_j, \dot{q}_j\}) dt$ bezeichnet man auch als *Wirkung*. Das Variationsprinzip besagt also, daß die (klassische) Bewegung von $\{q_1(t_1), \dots, \bar{p}_f(t_1)\}$ nach $\{q_1(t_2), \dots, \bar{p}_f(t_2)\}$ so abläuft, daß die Wirkung extremal wird!

Aus dem Variationsprinzip folgen die *Lagrangeschen Bewegungsgleichungen*

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial L}{\partial q_j}. \quad (\text{II.1.3})$$

Durch den Übergang zu den *kanonisch konjugierten Impulsen*

$$p_j := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \quad (\text{II.1.4})$$

gelangt man durch eine Legendre-Transformation $\dot{q}_j \rightarrow p_j$ zur *Hamiltonfunktion* des betrachteten Systems:

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L = H(\{q_j, p_j\}), \quad (\text{II.1.5})$$

die für die physikalische Beschreibung äquivalent zur Lagrange-Funktion ist.

II.1.1 Klassische kontinuierliche Systeme

Als Beispiel für ein klassische System mit unendlich vielen Freiheitsgraden wollen wir den Kontinuumsliches einer linearen Kette identischer Teilchen der Masse m betrachten, die paarweise durch identische Federn der Federkonstante k gekoppelt sind. Ist a der Gleichgewichtsabstand der Massen und η_j die Auslenkung der Masse j aus ihrer Ruhelage, so ist die Lagrange-Funktion des (endlichen) Systems gegeben durch

$$L = \frac{1}{2} \sum_j [m\dot{\eta}_j^2 - k(\eta_{j+1} - \eta_j)^2], \quad (\text{II.1.6})$$

wobei wir die Randbedingungen vernachlässigen.

Wir wollen nun den Kontinuumsliches durchführen, also zu einer kontinuierlichen Kette übergehen. M.a.W. wir realisieren den Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ (wobei N die Zahl der Freiheitsgrade ist) durch den Limes $a \rightarrow 0$. Wir 'erweitern' daher zunächst mit a , d.h.

$$L = \sum_j a \mathcal{L}_j \quad \text{mit} \quad \mathcal{L}_j = \frac{1}{2} \left[\frac{m}{a} \dot{\eta}_j^2 - ka \left(\frac{\eta_{j+1} - \eta_j}{a} \right)^2 \right]. \quad (\text{II.1.7})$$

In dieser Form können wir nun den Grenzübergang $a = dx \rightarrow 0$ vornehmen, und zwar so, daß die lineare Massendichte $\mu := \frac{m}{a}$ und der Youngsche elastische Modul $Y := ka$ konstant bleiben. Wir gehen dann zu einem kontinuierlichen Auslenkungsfeld $\eta = \eta(x)$ über¹ und können $\frac{\eta_{j+1} - \eta_j}{a}$ durch $\frac{\partial \eta}{\partial x}$ ersetzen. Es ergibt sich die (eindimensionale) Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[\mu \dot{\eta}^2 - Y \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \right] = \mathcal{L}(\eta_t, \eta_x) \quad (\text{II.1.8})$$

mit den Abkürzungen $\eta_x := \eta' = \frac{\partial \eta}{\partial x}$ und $\eta_t := \dot{\eta} = \frac{\partial \eta}{\partial t}$, und die zugehörige Lagrange-Funktion

$$L = \int dx \mathcal{L}. \quad (\text{II.1.9})$$

Das Hamilton-Prinzip lautet im Kontinuumsfall

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \int dx \mathcal{L}(\eta, \eta_t, \eta_x) \stackrel{!}{=} 0. \quad (\text{II.1.10})$$

Dabei kann $\eta(x)$ beliebig variiert werden, lediglich an den Grenzen der t - und x -Integration muß $\delta \eta$ verschwinden.

Wir führen die Variation explizit aus, um so die entsprechenden Lagrange-Gleichungen zu erhalten. Es gilt:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int dt \int dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} \delta \eta + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \delta \eta_x + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \delta \eta_t \right] \\ &= \int dt \int dx \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \right) \right] \delta \eta \stackrel{!}{=} 0, \end{aligned} \quad (\text{II.1.11})$$

wobei wir im zweiten Schritt partiell integriert haben, um die Variationen $\delta \eta_x$ und $\delta \eta_t$ durch $\delta \eta$ auszudrücken. Dabei wurde das Verschwinden der Variation an den Rändern ausgenutzt. Da die Variation $\delta \eta$ beliebig sein kann, muß der Ausdruck in den eckigen Klammern verschwinden. Damit erhält man die *Euler-Lagrange-Gleichung*

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_x} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta_t} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \eta} = 0. \quad (\text{II.1.12})$$

Speziell in unserem Beispiel lautet diese Gleichung

$$Y \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = 0. \quad (\text{II.1.13})$$

Dies ist eine eindimensionale Wellengleichung, die Wellen mit der Geschwindigkeit $v = \sqrt{\frac{Y}{\mu}}$ beschreibt.

Wir können die zu einer Lagrange-Dichte \mathcal{L} gehörige *Hamiltondichte* \mathcal{H} gemäß

¹Aus dem diskreten Massenindex j wird also eine kontinuierliche Koordinate x .

$$\mathcal{H} = \dot{\eta} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}} - \mathcal{L} \quad (\text{II.1.14})$$

einführen, d.h.

$$H = \int dx \mathcal{H}. \quad (\text{II.1.15})$$

In unserem Beispiel ist dann

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left[\mu \dot{\eta}^2 + Y \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \right]. \quad (\text{II.1.16})$$

Das zu $\eta(x)$ *kanonisch konjugierte Feld* wird in der Feldtheorie oft mit

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\eta}} \quad (\text{II.1.17})$$

bezeichnet, wobei in unserem Beispiel $\pi = \mu \dot{\eta}$ ist. Die Hamiltondichte \mathcal{H} ist als natürliche Funktion der Felder η und π zu betrachten.

II.2 Quantenmechanische Vielteilchensysteme

Bevor wir damit beginnen, klassische Feldtheorien zu quantisieren, müssen wir uns noch etwas mit dem Formalismus zur Beschreibung quantenmechanischer Vielteilchensysteme beschäftigen.

II.2.1 Systeme gleicher Teilchen

Wir hatten in Kapitel I.0 ‘Axiome’ angegeben, die die Quantentheorie charakterisieren. Wir müssen diese Axiome durch ein weiteres ergänzen, daß sich auf das Verhalten von Vielteilchensystemen bezieht.

8. Systeme identischer Teilchen besitzen nur Zustände, die entweder *total symmetrisch* oder *total antisymmetrisch* in allen Teilchenvariablen sind.
 - Teilchen, die durch total antisymmetrische Wellenfunktionen beschrieben werden, heißen *Fermionen*. Nach dem *Spin-Statistik-Theorem* (Pauli, 1940) sind dies alle Teilchen mit halbzahligen Spin ($S = 1/2, 3/2, \dots$).
 - Teilchen, die durch total symmetrische Wellenfunktionen beschrieben werden, bezeichnet man als *Bosonen*. Nach dem Spin-Statistik-Theorem sind das gerade die Teilchen mit ganzzahligen Spin ($S = 0, 1, 2, \dots$).

Wir betrachten ein System aus N identischen Teilchen, daß durch einen Hamiltonoperator der Form $H = H(1, 2, \dots, N) = T + V$ beschrieben wird². Die kinetische Energie hat dabei die Form

$$T = T(1) + T(2) + \dots + T(N) \quad (\text{II.2.1})$$

²Im folgenden schreiben oft ‘1’ statt ‘ $\vec{r}_1, \vec{p}_1, \sigma_1, \dots$ ’, d.h. die Zahl steht für alle relevanten Variablen des entsprechenden Teilchens.

und die meisten Potentiale haben die Struktur

$$V = V(1, 2) + V(1, 3) + \dots + V(N - 1, N) = \sum_{i < j} V(i, j) \quad (\text{II.2.2})$$

mit einem Paarpotential $V(i, j)$. Sowohl T als auch V sind daher voll symmetrisch unter der Vertauschung zweier Teilchen!

Aus der linearen Algebra wissen wir, daß sich eine beliebige Permutation P der Teilchen als Produkt von Transpositionen P_{ij} schreiben läßt, bei denen nur die Teilchen i und j vertauscht werden. Diese wirken auf die Gesamtwellenfunktion $\psi(1, 2, \dots, N)$ gemäß

$$P_{ij}\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N). \quad (\text{II.2.3})$$

Die Operatoren P_{ij} sind (auf dem Zustandsraum identischer Teilchen) hermitesch und unitär und wegen $P_{ij}^2 = \mathbb{1}$ haben sie die Eigenwerte ± 1 .

Eine beliebige Observable A eines Systems gleicher Teilchen, die eine Struktur wie in (II.2.1) oder (II.2.2) hat (z.B. der Gesamtimpuls $\vec{p} = \sum_j \vec{p}_j$), vertauscht mit allen Permutationsoperatoren:

$$PA = AP \quad \text{d.h.} \quad [A, P] = 0. \quad (\text{II.2.4})$$

Insbesondere gilt dies, wie oben ausgeführt, für den Hamiltonoperator H . Somit sind die P also Konstanten der Bewegung.

Für eine *symmetrische Wellenfunktion* gilt

$$P_{ij}\psi_S = \psi_S \quad \text{für alle } i, j \quad (\text{II.2.5})$$

und für eine *antisymmetrische Wellenfunktion*

$$P_{ij}\psi_A = -\psi_A \quad \text{für alle } i, j \quad (\text{II.2.6})$$

Für beliebige Permutationen P gilt dann

$P\psi_S = \psi_S,$	(II.2.7)
$P\psi_A = \text{sign}(P)\psi_A,$	(II.2.8)

wobei $\text{sign}(P)$ das Signum der Permutation bezeichnet, daß manchmal auch als $(-1)^P$ geschrieben wird, d.h.

$$\text{sign}(P) = (-1)^P = \begin{cases} +1 & P \text{ zerfällt in gerade Anzahl Transpositionen} \\ -1 & P \text{ zerfällt in ungerade Anzahl Transpositionen.} \end{cases} \quad (\text{II.2.9})$$

Die Symmetrie bzw. Antisymmetrie der Wellenfunktion impliziert, daß es keine Messung gibt, die zwischen ψ und $P\psi$ unterscheiden kann. Dies bezeichnet man auch als *Austauschentartung*.

In der folgenden Tabelle geben wir einen kurzen Überblick über die beiden Klassen von Vielteilchenwellenfunktionen. Aufgelistet sind die Symmetrie der Wellenfunktion unter Permutationen P , die Statistik der Teilchen und der Spin gemäß dem Spin-Statistik-Theorem.

Wellenfunktion	Statistik	Spin
symmetrisch: $P\psi_S = \psi_S$	Bosonen	ganzzahlig ($S = 0, 1, 2, \dots$)
antisymmetrisch: $P\psi_A = \text{sign}(P)\psi_A$	Fermionen	halbzahlig ($S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$)

Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen sind stets orthogonal zueinander, denn

$$\langle \psi_A | \psi_S \rangle = \langle \psi_A | P_{jk} | \psi_S \rangle = \langle \psi_A | P_{jk}^+ | \psi_S \rangle = -\langle \psi_A | \psi_S \rangle, \quad (\text{II.2.10})$$

wobei wir im ersten Schritt die Symmetrie $P_{jk} | \psi_S \rangle = | \psi_S \rangle$ von ψ_S ausgenutzt haben, im zweiten die Hermitizität von P_{jk} und im dritten

$$\langle \psi_A | P_{jk}^+ = (P_{jk} | \psi_A \rangle)^+ = (-| \psi_A \rangle)^+ = -\langle \psi_A |. \quad (\text{II.2.11})$$

$\langle \psi_A | \psi_S \rangle$ muß also verschwinden, d.h. die Wellenfunktionen ψ_A und ψ_S sind orthogonal. Man hat nun das Problem, daß die P_{jk} zwar mit dem Vielteilchen-Hamiltonoperator vertauschen, aber nicht untereinander (i.a. $P_{jk}P_{il} \neq P_{il}P_{jk}$). Es ist also nicht klar, ob es einen nichttrivialen Funktionenraum gibt, in denen alle gleichzeitig diagonal sind. Diesen kann man allerdings explizit mit Hilfe des *Symmetrisierungsoperators*

$$S := \sum_{P \in S_N} P \quad (\text{II.2.12})$$

bzw. des *Antisymmetrisierungsoperators*

$$A := \sum_{P \in S_N} \text{sign}(P)P \quad (\text{II.2.13})$$

definieren. Dabei bezeichnet S_N die Menge aller Permutationen von N Elementen (Permutationsgruppe). Ist nun $\psi(1, \dots, N)$ eine beliebige Funktion, so können wir mit Hilfe dieser Operatoren daraus eine symmetrische bzw. antisymmetrische Funktion definieren:

$$\psi_S(1, \dots, N) := S\psi(1, \dots, N), \quad (\text{II.2.14})$$

$$\psi_A(1, \dots, N) := A\psi(1, \dots, N). \quad (\text{II.2.15})$$

Die Symmetrie bzw. Antisymmetrie folgt dabei formal aus

$$P_{jk}S = S, \quad \text{bzw.} \quad P_{jk}A = -A. \quad (\text{II.2.16})$$

Wir wollen uns nun kurz die beiden einfachsten Beispiele $N = 2$ und $N = 3$ genauer anschauen. Für $N = 2$ gibt es in S_2 nur die beiden Permutationen $\mathbb{1}$ und P_{12} . Wir betrachten einen Hamiltonoperator $H(1, 2)$ für ein System aus zwei identischen Teilchen, d.h. $[H(1, 2), P_{12}] = 0$. Es sei $\psi(1, 2)$ eine beliebige Eigenfunktion von $H(1, 2)$ zum Eigenwert E . Dann gilt:

$$\begin{aligned} P_{12}H(1, 2)\psi(1, 2) &= H(1, 2)P_{12}\psi(1, 2) = H(1, 2)\psi(2, 1) \\ P_{12}H(1, 2)\psi(1, 2) &= P_{12}E\psi(1, 2) = E\psi(2, 1). \end{aligned} \quad (\text{II.2.17})$$

In der ersten Zeile wurde ausgenutzt, daß P_{12} mit dem Hamiltonoperator kommutiert, in der zweiten, daß $\psi(1, 2)$ ein Eigenzustand ist. Insgesamt folgt aus den beiden Gleichungen, daß mit $\psi(1, 2)$ auch immer $\psi(2, 1)$ ein Eigenzustand von $H(1, 2)$ zum gleichen Eigenwert ist.

Wir können nun die simultanen Eigenfunktionen von $H(1, 2)$ und P_{12} angeben:

$$\psi_S(1, 2) = \psi(1, 2) + \psi(2, 1), \quad (\text{II.2.18})$$

$$\psi_S(1, 2) = \psi(1, 2) - \psi(2, 1). \quad (\text{II.2.19})$$

Für den Fall $N = 3$ dreier identische Teilchen hat die Permutationsgruppe S_3 6 Elemente, darunter die drei Transpositionen P_{12} , P_{13} und P_{23} . Diese vertauschen i.a. nicht, z.B. ist $P_{12}P_{13} \neq P_{13}P_{12}$. Mit Hilfe der oben definierten Operatoren können wir jedoch wieder gemeinsame Eigenfunktionen angeben:

$$\begin{aligned} \psi_S(1, 2, 3) &= \psi(1, 2, 3) + \psi(1, 3, 2) + \psi(2, 1, 3) + \psi(2, 3, 1) \\ &\quad + \psi(3, 2, 1) + \psi(3, 1, 2), \end{aligned} \quad (\text{II.2.20})$$

$$\begin{aligned} \psi_A(1, 2, 3) &= \psi(1, 2, 3) - \psi(1, 3, 2) - \psi(2, 1, 3) + \psi(2, 3, 1) \\ &\quad - \psi(3, 2, 1) + \psi(3, 1, 2). \end{aligned} \quad (\text{II.2.21})$$

Die Antisymmetrie von ψ_A kann man explizit überprüfen, z.B. ist

$$P_{12}\psi_A = \psi(2, 1, 3) - \psi(3, 1, 2) - \psi(1, 2, 3) + \psi(3, 2, 1) - \psi(2, 3, 1) + \psi(1, 3, 2) = -\psi_A. \quad (\text{II.2.22})$$

Ähnliches gilt natürlich auch für die symmetrische Funktion ψ_S .

Wir wollen nun den Zusammenhang von Vielteilchenwellenfunktionen mit Einteilchenwellenfunktionen etwas näher beleuchten. Dazu betrachten wir ein Zweiteilchensystem. Dieses wird durch zwei unabhängige Variablenätze '1' und '2' beschrieben, die z.B. die Orts- und Spinvariablen beinhalten. Die (Einteilchen-)Zustände der beiden identischen Teilchen werden durch Quantenzahlen α charakterisiert, z.B. der Hauptquantenzahl für das Elektron eines Wasserstoffatoms. Der Hilbertraum \mathcal{H} für das Zweiteilchensystem ist das Produkt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ der Einteilchen-Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 . Dabei werde \mathcal{H}_1 aufgespannt von den Basisvektoren $\{\varphi_\alpha(1)\}$ und \mathcal{H}_2 von $\{\varphi_\alpha(2)\}$. Somit läßt sich eine beliebige Funktion $\phi(1, 2)$ in \mathcal{H} darstellen als

$$\phi(1, 2) = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha\beta} \varphi_\alpha(1) \varphi_\beta(2). \quad (\text{II.2.23})$$

Damit läßt sich $|c_{\alpha\beta}|^2$ als die Wahrscheinlichkeit dafür interpretieren, daß Teilchen 1 im Zustand α und Teilchen 2 im Zustand β ist. Auf Grund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen bedeutet dies aber $|c_{\alpha\beta}|^2 = |c_{\beta\alpha}|^2$. Für vollständig symmetrische Zustände ist $c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha}$, für vollständig antisymmetrische $c_{\alpha\beta} = -c_{\beta\alpha}$.

Wir betrachten nun den Fall nichtwechselwirkender Teilchen. In diesem Fall hat der Hamiltonoperator für ein System N identischer Teilchen die Form

$$H = \sum_{j=1}^N h_j, \quad (\text{II.2.24})$$

wobei h_j nur von den Koordinaten j abhängt, d.h. ein Einteilchenoperator ist. Haben wir das zugehörige Eigenwertproblem

$$h\varphi_\alpha = \epsilon_\alpha\varphi_\alpha \quad (\text{II.2.25})$$

gelöst, so können wir sofort Eigenzustände von H konstruieren, nämlich

$$\varphi_{\alpha_1}(1)\varphi_{\alpha_2}(2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(N) \quad \text{mit der Energie} \quad E = \epsilon_{\alpha_1}\epsilon_{\alpha_2}\cdots\epsilon_{\alpha_N}. \quad (\text{II.2.26})$$

Auf Grund der Austauschentartung hat dabei jeder Zustand $\varphi_{\alpha_1}(P_1)\varphi_{\alpha_2}(P_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(P_N)$ die gleiche Energie, wobei P eine beliebige Permutation aus S_N ist. Mit Hilfe des Symmetrisierungsoperators können wir diese Funktion symmetrisieren:

$$\psi_S^{(\alpha)}(1, \dots, N) = \sum_P P(\varphi_{\alpha_1}(1)\cdots\varphi_{\alpha_N}(N)) = \sum_P \varphi_{\alpha_1}(P_1)\cdots\varphi_{\alpha_N}(P_N), \quad (\text{II.2.27})$$

wobei α für einen Vektor mit den Komponenten α_j steht. Entsprechend ergibt sich die antisymmetrische Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi_A^{(\alpha)}(1, \dots, N) &= \sum_P (-1)^P P(\varphi_{\alpha_1}(1)\cdots\varphi_{\alpha_N}(N)) \\ &= \det \begin{pmatrix} \varphi_{\alpha_1}(1) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\alpha_N}(1) & \cdots & \varphi_{\alpha_N}(N) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.28})$$

Die Darstellung durch eine Determinante, die man auch als *Slater-Determinante* bezeichnet, folgt dabei aus dem bekannten Entwicklungssatz für Determinanten.

Aus der Darstellung (II.2.28) kann man sofort einige wichtige Schlüsse ziehen. Z.B. ist die Antisymmetrie der Wellenfunktion offensichtlich, da eine Vertauschung von zwei Teilchen der Vertauschung der entsprechenden Spalten entspricht. Außerdem weiß man, daß die Determinante verschwindet, falls sie zwei gleiche Zeilen oder Spalten hat. Ersteres passiert, wenn sich zwei Teilchen im gleichen Zustand befinden, z.B. für $\alpha_1 = \alpha_2$. Letzteres folgt, falls sich zwei Teilchen mit gleichem Spin am gleichen Ort befinden, d.h. z.B. '1=2' (alle Freiheitsgrade nehmen die gleichen Werte an).

Abschließend noch eine wichtige Bemerkung, die wir aber nicht beweisen wollen. Ist nämlich das System $\{\varphi_\alpha\}$ der Einteilchenwellenfunktionen vollständig, so sind auch die Systeme $\{\psi_S^{(\alpha)}\}$ und $\{\psi_A^{(\alpha)}\}$ vollständig in den entsprechenden Hilberträumen der symmetrischen bzw. antisymmetrischen Vielteilchenfunktionen. Bei den antisymmetrischen Wellenfunktionen muß man noch eine Konvention über die Anordnung der α_j in $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ treffen, um das Vorzeichen der Vielteilchenwellenfunktion festzulegen. Wie oben schon erwähnt, sind zwei Zustände, die durch Vertauschung der Spalten in der Slater-Determinante auseinander hervorgehen, äquivalent, unterscheiden sich aber im Vorzeichen.

II.2.2 Einfache Beispiele: 2-Teilchen-Probleme

Wir wollen nun an zwei einfachen Beispielen Konsequenzen der Symmetrie bzw. Antisymmetrie der Vielteilchen-Wellenfunktion untersuchen. Dazu wollen wir zwei physikalisch wichtige Pro-

bleme aus der Atomphysik betrachten, nämlich das Helium-Atom und das Wasserstoffmolekül. Beide Systeme besitzen zwei Elektronen, also ununterscheidbare Fermionen.

Helium-Atom

Zunächst betrachten wir das He-Atom bzw. Helium-artige Ionen wie Li^+ oder Be^{++} . Sie bestehen aus einem einzelnen Kern und zwei Elektronen. Bei unseren Untersuchungen wollen wir subtile Effekte durch die Kernbewegung und die Spin-Bahn- oder Hyperfein-Wechselwirkung vernachlässigen. Der Hamiltonoperator hat daher die Form

$$H = H(1) + H(2) + V(1, 2) \quad (\text{II.2.29})$$

mit

$$H(j) = \frac{p_j^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_j}, \quad V(1, 2) = \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (\text{II.2.30})$$

Der Einteilchenanteil $H(j)$ enthält die kinetische Energie des Elektrons j und seine Wechselwirkung mit der Ladung Ze des Kernes, den wir als unbeweglich ansehen. Der Anteil $V(1, 2)$ beschreibt die Coulombwechselwirkung der Elektronen³. Er soll im folgenden als klein angesehen werden, damit das Gesamtproblem durch eine störungstheoretische Untersuchung behandelbar wird.

In (II.2.30) treten nur die Teilchenkoordinaten explizit auf. Man muß jedoch beachten, daß im Prinzip der Spin der Elektronen zu berücksichtigen ist. Da er nicht im betrachteten Hamiltonoperator auftritt, ist $[H, \vec{S}] = 0$. Die Gesamtwellenfunktion hat dann die Struktur

$$\Psi(1, 2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2), \quad (\text{II.2.31})$$

d.h. sie zerfällt in einen Ortsanteil ψ und einen Spinanteil χ . Es ist nun wichtig, daß diese Gesamtwellenfunktion den im vorigen Abschnitt besprochenen Symmetrieprinzipien genügt, d.h. diese muß total antisymmetrisch sein, da Elektronen Fermionen sind. Auf Grund von (II.2.31) ist dies gewährleistet, wenn eine der Funktionen ψ und χ symmetrisch ist, und die andere antisymmetrisch.

Die Spineigenzustände können wir relativ leicht angeben. Sie sind durch Drehimpulsaddition zweier Spins $1/2$ zu gewinnen. Für den Gesamtspin S gibt es dann die Möglichkeiten $S = 0$ oder $S = 1$. Die zugehörigen Eigenfunktionen sind

$$S = 0 : \quad \chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (\text{Singlett}), \quad (\text{II.2.32})$$

$$S = 1 : \quad \chi_S = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (\text{Triplett}), \quad (\text{II.2.33})$$

wobei

$$|\uparrow\rangle = |j = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle \quad \text{und} \quad |\downarrow\rangle = |j = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle. \quad (\text{II.2.34})$$

³Dabei ist $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ der Abstand der Elektronen.

Der Singlett-Zustand χ_A ist daher antisymmetrisch bei Vertauschung der Spins, während die Triplet-Zustände symmetrisch sind.

Wir wollen nun die Lösungen ψ im Ortsraum mittels Störungstheorie bestimmen. Die Eigenfunktionen von $H(j)$ sind Wasserstoff-Wellenfunktionen φ_n mit den Energien

$$H(j)\varphi_n(\vec{r}_j) = \epsilon_n \varphi_n(\vec{r}_j) \quad \text{mit} \quad \epsilon_n = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0 n^2} \quad (\text{II.2.35})$$

mit dem Bohrschen Radius $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

In 0. Ordnung vernachlässigen wir die Wechselwirkung $V(1, 2)$. Die Ortseigenzustände von $H(1) + H(2)$ sind dann $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{n_1}(\vec{r}_1)\varphi_{n_2}(\vec{r}_2)$ mit der Energie $E_{n_1, n_2} = \epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2}$. Der Grundzustand ist in dieser Näherung durch die Wahl $n_1 = n_2 = 1$ gegeben, d.h.

$$\psi^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) \quad \text{und} \quad E^{(0)} = 2\epsilon_1. \quad (\text{II.2.36})$$

Diese Funktion ist offensichtlich symmetrisch. Sie kann daher nur mit dem Spin-Singlett kombiniert werden.

Wir betrachten nun die 1. Ordnung der Störungstheorie. Die Energiekorrektur in dieser Ordnung ist gerade der Erwartungswert des Störoperators in den Zuständen 0. Ordnung:

$$E^{(1)} = E^{(0)} + \frac{\langle \psi^{(0)} | V | \psi^{(0)} \rangle}{\langle \psi^{(0)} | \psi^{(0)} \rangle} = -\frac{Ze^2}{a_0} \left(Z - \frac{5}{8} \right). \quad (\text{II.2.37})$$

Man sieht, daß die abstoßende Wechselwirkung V eine Reduzierung der Kernanziehung bewirkt, da Z^2 durch $Z(Z - \frac{5}{8})$ ersetzt wird. Dies ist eine Folge der *Abschirmung*: Jedes Elektron sieht nicht mehr die volle Kernladung, sondern nur einen reduzierten Teil, da ein Teil durch das andere Elektron abgeschirmt wird.

Wir wollen uns auch noch den niedrigsten angeregten Zustand näher ansehen. Dieser besteht aus einem Elektron im Zustand $n = 1$ und einem im Zustand $n = 2$. Im Gegensatz zum Grundzustand kann man nun eine symmetrische und eine antisymmetrische Ortswellenfunktion bilden:

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) + \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1)), \quad (\text{II.2.38})$$

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2) - \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1)). \quad (\text{II.2.39})$$

Damit die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch wird, muß man ψ_S mit dem Spin-Singlett kombinieren und ψ_A mit dem Spin-Triplett.

In 0. Ordnung ergibt sich für die Energie der angeregten Zustände

$$E_S^{(0)} = \langle \psi_S | H(1) + H(2) | \psi_S \rangle = \epsilon_1 + \epsilon_2, \quad (\text{II.2.40})$$

$$E_A^{(0)} = \langle \psi_A | H(1) + H(2) | \psi_A \rangle = \epsilon_1 + \epsilon_2, \quad (\text{II.2.41})$$

d.h. der symmetrische und antisymmetrische Zustand haben in niedrigster Ordnung die gleiche Energie $E^{(0)} = E_S^{(0)} = E_A^{(0)}$. In 1. Ordnung folgt allerdings eine Aufhebung dieser Entartung:

$$E_S^{(1)} = \langle \psi_S | H(1) + H(2) + V(1, 2) | \psi_S \rangle = E^{(0)} + Q + A, \quad (\text{II.2.42})$$

$$E_A^{(1)} = \langle \psi_A | H(1) + H(2) + V(1, 2) | \psi_A \rangle = E^{(0)} + Q - A. \quad (\text{II.2.43})$$

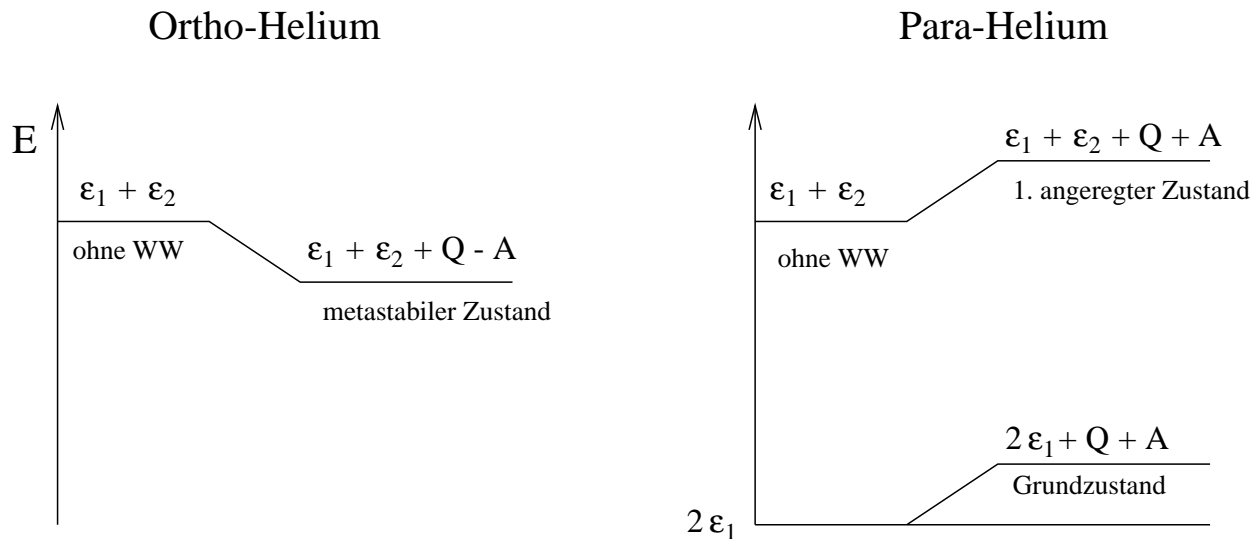


Abbildung II.2.1: Spektrum des Ortho- bzw. Paraheliums in 0. bzw. 1. Ordnung der Störungstheorie.

Dabei ist

$$Q := \langle \varphi_1(1)\varphi_2(2) | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_1(1)\varphi_2(2) \rangle = e^2 \int \frac{|\varphi_1(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_2(\vec{r}_2)|^2}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2, \quad (\text{II.2.44})$$

$$A := \langle \varphi_1(1)\varphi_2(2) | \frac{e^2}{r_{12}} | \varphi_2(1)\varphi_1(2) \rangle = e^2 \int \frac{\varphi_1^*(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_1)\varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2^*(\vec{r}_2)}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (\text{II.2.45})$$

Q bezeichnet man als *direkten oder Coulomb-Anteil*, A als *Austausch-Anteil*. Q hat eine einfache klassische Interpretation, da im Zähler des Integrals das Produkt der Ladungsdichten der beiden Elektronen steht. Im Gegensatz dazu hat der Austauschanteil kein klassisches Analogon. Er kommt von der Symmetrieforderung an die Vielteilchenwellenfunktion. Genauer gesagt rührt er daher, daß sich ein Elektron sowohl im Zustand $n = 1$ als auch im Zustand $n = 2$ befinden kann. A hängt vom Produkt $\varphi_1^* \varphi_2$ ab, also dem Überlappungsgrad der Wellenfunktionen. Dieser ist i.a. sehr klein, wenn man statt $n = 2$ einen viel höher angeregten Zustand betrachtet.

Wir wollen nun die gewonnenen Erkenntnisse zusammenfassen (siehe Abb. II.2.1). Es gibt Heliumatome mit symmetrischen Spinfunktionen (Triplet) und solche mit antisymmetrischen Spinfunktionen (Singlett). Erstere bezeichnet man als *Orthohelium*, letztere als *Parahelium*.

Parahelium entspricht dem energetisch tiefsten Zustand des Heliums. Die Ortsfunktion ist beim Parahelium ja symmetrisch. Deshalb können beide Elektronen gleichzeitig im Einteilchen-Grundzustand sein. Dann muß zwangsläufig die Spinfunktion antisymmetrisch sein.

Beim Orthohelium ist die Spinfunktion symmetrisch. Das Pauli-Prinzip verhindert, daß beide Elektronen gleichzeitig im Grundzustand sind. Wegen der geringen Spinwechselwirkung (bzw. Wechselwirkung der magnetischen Momente) ist die Wahrscheinlichkeit für ein Umklappen der Spins im Orthohelium sehr gering. Es stellt daher einen metastabilen Zustand mit einer langen Lebensdauer (in der Größenordnung von Monaten) dar.

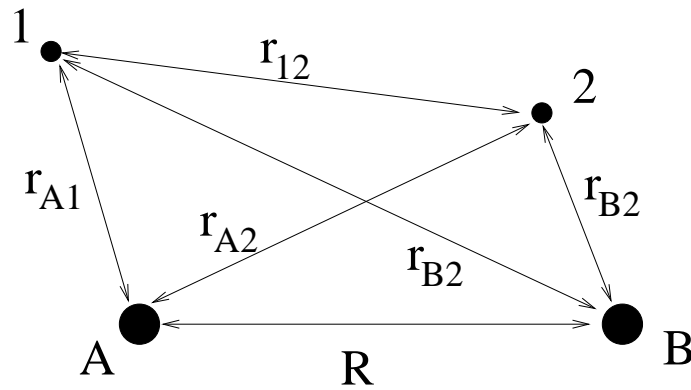


Abbildung II.2.2: Definition der Abstände, die im Hamiltonoperator für das Wasserstoffmolekül auftreten. Die Kerne sind dabei mit A und B bezeichnet, die Elektronen mit 1 und 2.

Eine abschließende Bemerkung: Das Helium-Atom liefert ein Beispiel für die *Hundsche Regel*. Demnach hat — bei vorgegebener Elektronenkonfiguration — der Zustand mit dem größeren Spin die kleinere Energie. Dies ist hier wegen $E_{\text{Triplet}} < E_{\text{Singlett}}$ erfüllt.

Wasserstoff-Molekül

Als zweite Anwendung betrachten wir ein Wasserstoff-Molekül. Auch dieses besitzt zwei Elektronen, die sich jedoch um zwei Kerne herum bewegen. Wir haben es also mit einem Zweizentrenproblem zu tun.

Der Hamilton-Operator hat die Form

$$H(1, 2) = H(1) + H(2) + V(1, 2) \quad (\text{II.2.46})$$

mit

$$\begin{aligned} H(1) &= \frac{p_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{A1}}, & H(2) &= \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{B2}}, \\ V(1, 2) &= -\frac{e^2}{r_{A2}} - \frac{e^2}{r_{B1}} + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{R}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.47})$$

Die auftretenden Abstände sind in Abb. II.2.2 definiert. In dem Hamiltonoperator wurden die kinetische Energien H_A und H_B der Kerne vernachlässigt. Die Kernorte werden im folgenden als fest angesehen. Dies bezeichnet man als *Born-Oppenheimer-Näherung* oder auch als *adiabatische Näherung*. Wir haben die Coulombwechselwirkung $\frac{e^2}{R}$ mitgenommen, obwohl sie in dieser Näherung konstant ist. Der Grund ist, daß man dann alle Energien als Funktion von R erhält und so durch Minimieren noch den Kernabstand bestimmen kann.

Der Aufteilung des Hamiltonoperators in (II.2.47) liegt die Vorstellung zu Grunde, daß sich Elektron 1 bei Kern A und Elektron 2 bei Kern B befindet. In diesem Fall kann man $V(1, 2)$ als kleine Störung auffassen. Dieses Vorgehen bezeichnet man als *Heitler-London-Näherung*. Sie ist gerechtfertigt, wenn die Kerne relativ weit voneinander entfernt sind.

Wir wollen den Ortsanteil der Wellenfunktion wieder durch die Wellenfunktionen φ des Wasserstoffatoms ausdrücken. In 0. Näherung haben wir die beiden Möglichkeiten

$$\varphi_I(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2), \quad (\text{II.2.48})$$

$$\varphi_{II}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_B(\vec{r}_1)\varphi_A(\vec{r}_2), \quad (\text{II.2.49})$$

woraus sich die symmetrische und antisymmetrische Kombination

$$\psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_I(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \pm \varphi_{II}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) \pm \varphi_B(\vec{r}_1)\varphi_A(\vec{r}_2) \quad (\text{II.2.50})$$

bilden läßt. Die zugehörigen Energien sind

$$E_{\pm} = \frac{\langle \psi_{\pm} | H | \psi_{\pm} \rangle}{\langle \psi_{\pm} | \psi_{\pm} \rangle}. \quad (\text{II.2.51})$$

Wir skizzieren hier die Berechnung der Norm im Nenner:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\pm} | \psi_{\pm} \rangle &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 |\varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) \pm \varphi_B(\vec{r}_1)\varphi_A(\vec{r}_2)|^2 \\ &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \left[|\varphi_A(\vec{r}_1)|^2 |\varphi_B(\vec{r}_2)|^2 \pm \left(\varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2)\varphi_A^*(\vec{r}_2)\varphi_B^*(\vec{r}_1) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \varphi_A^*(\vec{r}_1)\varphi_B^*(\vec{r}_2)\varphi_A(\vec{r}_2)\varphi_B(\vec{r}_1) \right) + |\varphi_A(\vec{r}_2)|^2 |\varphi_B(\vec{r}_1)|^2 \right] \\ &= \int d^3 r_1 |\varphi_A(\vec{r}_1)|^2 \int d^3 r_2 |\varphi_B(\vec{r}_2)|^2 \pm \int d^3 r_1 \varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B^*(\vec{r}_1) \int d^3 r_2 \varphi_B(\vec{r}_2)\varphi_A^*(\vec{r}_2) \\ &\quad \pm \int d^3 r_1 \varphi_A^*(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_1) \int d^3 r_2 \varphi_B^*(\vec{r}_2)\varphi_A(\vec{r}_2) + \int d^3 r_1 |\varphi_B(\vec{r}_1)|^2 \int d^3 r_2 |\varphi_A(\vec{r}_2)|^2 \\ &= 2 \pm \langle \varphi_B | \varphi_A \rangle \langle \varphi_A | \varphi_B \rangle \pm \langle \varphi_A | \varphi_B \rangle \langle \varphi_A | \varphi_B \rangle = 2 \pm 2 |\langle \varphi_B | \varphi_A \rangle|^2 \\ &=: 2(1 \pm S^2) \end{aligned} \quad (\text{II.2.52})$$

wobei wir den Überlapp

$$S := \langle \varphi_B | \varphi_A \rangle \quad (\text{II.2.53})$$

der Wellenfunktionen eingeführt haben. Dabei ist zu beachten, daß die Wellenfunktionen nur für $R \rightarrow \infty$ orthogonal sind.

In 1. Ordnung der Störungstheorie können wir nun die Energie bestimmen. Die Rechnung für den Zähler läuft dabei analog. Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned} E_{\pm}^{(1)} &= \frac{1}{2(1 \pm S^2)} \langle \psi_{\pm} | H_0 + V | \psi_{\pm} \rangle \\ &= 2\epsilon_0 + \frac{C \pm A}{1 \pm S^2}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.54})$$

Dabei haben wir die Abkürzungen

$$C := \langle \varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) | V | \varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) \rangle, \quad (\text{II.2.55})$$

$$A := \langle \varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) | V | \varphi_B(\vec{r}_1)\varphi_A(\vec{r}_2) \rangle \quad (\text{II.2.56})$$

eingeführt. C bezeichnet man wieder als *direkten Term* oder *Coulomb-Term* und A als *Austauschterm*. Explizit folgt

$$A < 0 \quad \text{und} \quad |A| > |C|, \quad (\text{II.2.57})$$

wobei die zweite Ungleichung für sehr kleine Abstände verletzt sein kann. Hieraus kann man nun folgern, daß der symmetrische Zustand stärker gebunden ist und das im antisymmetrischen Zustand die Abstoßung der Elektronen eine größere Rolle spielt. Insgesamt ist also die Austauschenergie (und ihr Vorzeichen) für die Bindung im H_2 verantwortlich. Berücksichtigt man noch den Spinanteil der Wellenfunktion explizit, so spricht man wieder von *Para-Wasserstoff* im Singlettfall und von *Ortho-Wasserstoff* im Triplettfall.

Die beiden oben angeführten Beispiele zeigen die Bedeutung der Symmetrie der Wellenfunktion. Sie ist der Grund für einen Beitrag zur Energie, der kein klassisches Analogon hat, nämlich den Austauschterm. Dieser spielt bei zahlreichen Effekte eine wichtige Rolle, z.B. dem Magnetismus oder bei der chemischen Bindung.

II.2.3 Zweite Quantisierung (Besetzungszahldarstellung)

Im folgenden werden wir zwei Ziele verfolgen: (i) Die Beschreibung von Prozessen ohne Teilchenzahlerhaltung und (ii) die Berücksichtigung der Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen von Vielteilchenwellenfunktionen. Die Methode, die beide Probleme auf einmal löst, heißt *2. Quantisierung* oder *Besetzungszahldarstellung*. Die Bezeichnung *2. Quantisierung* ist dabei historisch bedingt. Hintergrund ist die Vorstellung, daß in der *1. Quantisierung* Ort und Impuls quantisiert, d.h. durch Operatoren dargestellt werden. In der *2. Quantisierung* wird dann auch die Wellenfunktion durch Operatoren ausgedrückt. Allerdings ist dies kein qualitativ neuer Schritt, im Gegensatz zur *1. Quantisierung*. Es handelt sich lediglich um einen neuen flexiblen Formalismus, der aber keine neue Physik mit sich bringt.

Wir betrachten im folgenden Einteilchenzustände $|\lambda\rangle$, wobei λ wieder für die Menge der relevanten Quantenzahlen stehen soll⁴. Wenn wir die Basis hervorheben wollen, schreiben wir auch etwas präziser $|\varphi_\lambda\rangle$ statt $|\lambda\rangle$. Wir stellen uns nun die Quantenzahlen irgendwie angeordnet vor, d.h. es gelte

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots \quad (\text{II.2.58})$$

Der Gesamthilbertraum für ein System aus N identischen Teilchen ist das Produkt der Einteilchenräume \mathcal{H}_j :

$$\mathcal{H}(n) = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N. \quad (\text{II.2.59})$$

Da in der Natur nur symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen verwirklicht sind, haben wir folgende Aufspaltung:

$$\mathcal{H}(N) = \mathcal{H}_S(N) \oplus \mathcal{H}_A(N) \oplus \mathcal{H}_{\text{Rest}}, \quad (\text{II.2.60})$$

⁴Bei Atomen ist z.B. $\lambda = (n, l, m, s)$, bei freien Teilchen $\lambda = (\vec{k}, s)$.

wobei $\mathcal{H}_{S/A}(N)$ die Räume der symmetrischen bzw. antisymmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen sind. $\mathcal{H}_{\text{Rest}}$ enthält alle Wellenfunktionen ohne totale (Anti-)Symmetrie. Dies sind die unrealistischen Wellenfunktionen, die eigentlich nur stören. Ein Ziel des zu entwickelnden Formalismus wird es daher sein, nur realistische Zustände, d.h. solche aus $\mathcal{H}_{S/A}(N)$, zu generieren.

Die entscheidende Idee ist nun, daß es auf Grund der (Anti-)Symmetrie der Wellenfunktion genügt anzugeben, wie oft ein bestimmter Einteilchenzustand besetzt. Dies bestimmt die Wellenfunktion dann zusammen mit der Symmetrieforderung eindeutig, da man nicht mehr angeben muß, wie man die Teilchen auf die einzelnen Zustände verteilt. Formal realisiert wird diese Idee durch die sogenannte *Besetzungszahldarstellung*. Ein beliebiger (anti-)symmetrisierter N -Teilchenzustand läßt sich schreiben als

$$|\lambda_{\alpha_1}, \lambda_{\alpha_2}, \dots, \lambda_{\alpha_N}\rangle_{S,A} =: |N_1, N_2, \dots\rangle. \quad (\text{II.2.61})$$

Dabei gibt N_1 an, wie oft λ_1 im Zustand auf der linken Seite auftaucht⁵ etc., d.h. N_j ist die Zahl der Teilchen im Zustand λ_j . Für $N = 3$ ist z.B. $|\lambda_1, \lambda_3, \lambda_1\rangle_{S,A} = |2, 0, 1, 0, \dots\rangle$. Offensichtlich ist $N = \sum_j N_j$. Im symmetrischen Fall (Bosonen) kann $N_j = 0, 1, 2, \dots$ sein, im antisymmetrischen (Fermionen) auf Grund des Pauli-Prinzip aber nur $N_j = 0, 1$.

Wir definieren nun einen Raum, der alle physikalisch realisierbaren Vielteilchenzustände enthält, den sog. *Fock-Raum*:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \dots \quad \text{mit} \quad \mathcal{F}_N := \begin{cases} \mathcal{H}_S(N) & \text{für Bosonen} \\ \mathcal{H}_A(N) & \text{für Fermionen.} \end{cases} \quad (\text{II.2.62})$$

Der Fock-Raum enthält also als direkte Summe aller $\mathcal{H}(N)$ Zustände mit beliebiger Teilchenzahl. Insbesondere können wir darin Zustände ohne feste Teilchenzahl oder Prozesse, die die Teilchenzahl ändern, beschreiben. Dazu führen wir für $N = 0, 1, \dots$ die Operatoren

$$\text{Vernichter:} \quad a_j : \mathcal{F}_{N+1} \rightarrow \mathcal{F}_N, \quad (\text{II.2.63})$$

$$\text{Erzeuger:} \quad a_j^+ : \mathcal{F}_N \rightarrow \mathcal{F}_{N+1}, \quad (\text{II.2.64})$$

ein, d.h. diese Operatoren ändern die Teilchenzahl eines Zustandes um ± 1 . Für die präzise Definition dieser Operatoren müssen wir im folgenden den symmetrischen und antisymmetrischen Fall unterscheiden.

Für Bosonen, d.h. symmetrische Vielteilchenfunktionen lautet die Definition des *Vernichtungsoperators*

$$a_j |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle := \sqrt{N_j} |N_1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle. \quad (\text{II.2.65})$$

a_j vernichtet also ein Teilchen im Zustand j . Der Faktor $\sqrt{N_j}$ auf der rechten Seite führt dazu, daß $a_j |\dots, N_j = 0, \dots\rangle = 0$ ist. Dies muß natürlich so sein, denn ein Teilchen kann nur dann vernichtet werden, wenn es auch vorhanden ist. Das einzige, nichtverschwindende Matrixelement von a_j im Fock-Raum ist $\langle N_1, \dots, N_j - 1, \dots | a_j | N_1, \dots, N_j, \dots \rangle = \sqrt{N_j}$.

⁵d.h. wie viele $\alpha_j = 1$ sind

Den *Erzeugungsoperator* a_j^+ definieren wir als den zu a_j adjungierten Operator. Sein einziges, nichtverschwindende Matrixelement ist dann $\langle N_1, \dots, N_j, \dots | a_j | N_1, \dots, N_j - 1, \dots \rangle = \sqrt{N_j}$ und somit gilt

$$a_j^+ | N_1, \dots, N_j, \dots \rangle := \sqrt{N_j + 1} | N_1, \dots, N_j + 1, \dots \rangle. \quad (\text{II.2.66})$$

Wir wollen uns nun überlegen, welcher Algebra die Operatoren genügen. Man sieht sofort, daß $[a_j, a_l] = [a_j^+, a_l^+] = 0$ ist. Es spielt keine Rolle, in welcher Reihenfolge ich Teilchen erzeuge oder vernichte! Ähnlich schnell macht man sich klar, daß $[a_j, a_l^+] = 0$ ist, falls $j \neq l$: Erzeuge ich ein Teilchen im Zustand l und vernichte eines in einem anderen Zustand j , so ist ergibt sich das Gleiche wie bei der umgekehrten Reihenfolge. Es bleibt damit zu prüfen, welche Beziehung zwischen $a_j a_j^+$ und $a_j^+ a_j$ besteht:

$$a_j^+ a_j | \dots, N_j, \dots \rangle = a_j^+ \sqrt{N_j} | \dots, N_j - 1, \dots \rangle = N_j | \dots, N_j, \dots \rangle, \quad (\text{II.2.67})$$

$$a_j a_j^+ | \dots, N_j, \dots \rangle = a_j \sqrt{N_j + 1} | \dots, N_j + 1, \dots \rangle = (N_j + 1) | \dots, N_j, \dots \rangle. \quad (\text{II.2.68})$$

Somit erhalten wir die Operatoridentität $a_j a_j^+ - a_j^+ a_j = [a_j, a_j^+] = 1$. Insgesamt folgt für die *Kommutatoralgebra der Vernichter und Erzeuger von Bosonen*:

$$\begin{aligned} [a_j, a_l] &= [a_j^+, a_l^+] = 0, \\ [a_j, a_l^+] &= \delta_{jl}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.69})$$

Operatoren, die einer solchen Algebra genügen, bezeichnet man als *Bose-Operatoren*, die Algebra selbst als *Bose-Algebra*.

Aus Gleichung (II.2.67) folgt, daß der Operator $a_j^+ a_j$ die Zahl der Teilchen im Zustand λ_j mißt. Wir definieren daher den *Teilchenzahloperator*

$$n_j := a_j^+ a_j \quad (\text{II.2.70})$$

für den Zustand j . Außerdem führt man den *Operator der Gesamtteilchenzahl* ein⁶:

$$\hat{N} := \sum_j n_j = \sum_j a_j^+ a_j. \quad (\text{II.2.71})$$

Hiermit gilt dann

$$\hat{N} | N_1, N_2, \dots \rangle = \sum_j n_j | N_1, N_2, \dots \rangle = (N_1 + N_2 + \dots) | N_1, N_2, \dots \rangle = N | N_1, N_2, \dots \rangle. \quad (\text{II.2.72})$$

Wir definieren nun das *Vakuum* als den Zustand ohne Teilchen:

$$|0\rangle := |N_1 = 0, N_2 = 0, \dots\rangle. \quad (\text{II.2.73})$$

Man beachte, daß dieser Zustand wegen $\langle 0|0\rangle = 1$ vom Nullvektor 0 in \mathcal{F} verschieden ist und den Unterraum \mathcal{F}_0 aufspannt. Er läßt sich auch durch die Bedingungen

$$a_j |0\rangle = 0 \quad \text{für alle } j \quad (\text{II.2.74})$$

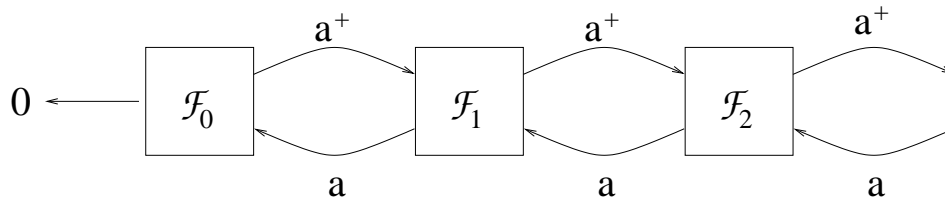


Abbildung II.2.3: Aufbau des Fock-Raumes mit Hilfe der Erzeuger und Vernichter.

charakterisieren.

Ausgehend vom Vakuuzustand $|0\rangle$ können wir nun systematisch alle Zustände des Fockraumes \mathcal{F} aufbauen (siehe auch Abb. II.2.3):

$$a_j^+ |0\rangle = |0, 0, \dots, N_j = 1, \dots\rangle, \quad (\text{II.2.75})$$

$$a_j^+ a_l^+ |0\rangle = |0, \dots, N_j = 1, \dots, N_l = 1, \dots\rangle = a_l^+ a_j^+ |0\rangle, \quad (j \neq l) \quad (\text{II.2.76})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (a_j^+)^2 |0\rangle = |0, \dots, N_j = 2, \dots\rangle. \quad (\text{II.2.77})$$

In Aufgabe 13 wird die Normierung des letzten Zustandes aus der Kommutatoralgebra (II.2.69) abgeleitet. Allgemein gilt:

$$|N_1, N_2, \dots\rangle = \frac{(a_1^+)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}} \frac{(a_2^+)^{N_2}}{\sqrt{N_2!}} \cdots |0\rangle. \quad (\text{II.2.78})$$

Dieser Zustand ist automatisch total symmetrisch! Bei Vertauschung der Teilchen $j \leftrightarrow l$ wechseln nur a_j^+ und a_l^+ ihre Plätze. Dies ändert aber nichts, da die Erzeuger kommutieren. Die Normierung des Zustandes ist Gegenstand von Aufgabe 9.

Wir kommen nun zum antisymmetrischen Fall, d.h. Systemen von Fermionen. Hier definieren wir den *Vernichtungsoperator* durch

$$c_j |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle := (-1)^{s_j} N_j |N_1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle, \quad (\text{II.2.79})$$

wobei

$$s_j := \sum_{k=1}^{j-1} N_k \quad (\text{II.2.80})$$

die Zahl der besetzten Zustände “links” von j zählt. Diesen Faktor führt man hier zweckmäßigerweise ein, damit später einige Vereinfachung eintreten. Wie bei den Bosonen folgt aus der Definition, daß $c_j |\dots, N_j, \dots\rangle = 0$, falls $N_j = 0$.

Den zugehörigen Erzeuger definieren wir durch

⁶Wenn wir den Unterschied zwischen dem Operator und dem zugehörigen Eigenwert betonen wollen, schreiben wir \hat{N} bzw. N . Meist werden wir jedoch auch für den Operator nur N schreiben.

$$c_j^\dagger |N_1, \dots, N_j, \dots\rangle := (-1)^{s_j} (1 - N_j) |N_1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle. \quad (\text{II.2.81})$$

Man beachte den Faktor $(1 - N_j)$ auf der rechten Seite. Dieser führt dazu, daß $c_j | \dots, N_j = 1, \dots \rangle = 0$ wird, d.h. jeder Zustand kann höchstens durch ein Teilchen besetzt werden. Auf diese Art und Weise haben wir das Pauli-Prinzip automatisch berücksichtigt. Man rechnet leicht nach, daß c_j und c_j^\dagger tatsächlich zueinander adjungiert sind⁷.

In Aufgabe 11 wird gezeigt, daß die oben angegebenen Definitionen zu folgender *Antikommutatoralgebra der Vernichter und Erzeuger von Fermionen* führen:

$$\begin{aligned} \{c_j, c_l\} &= \{c_j^\dagger, c_l^\dagger\} = 0, \\ \{c_j, c_l^\dagger\} &= \delta_{jl}. \end{aligned} \quad (\text{II.2.82})$$

Operatoren, die einer solchen Algebra genügen, bezeichnet man als *Fermi-Operatoren*, die Algebra selbst als *Fermi-Algebra*. Dabei bezeichnet $\{A, B\} := [A, B]_+ := AB + BA$ den *Antikommutator* der Operatoren A und B .

Insbesondere folgt aus (II.2.82)

$$0 = \{c_j^\dagger, c_j^\dagger\} = 2 (c_j^\dagger)^2, \quad \text{d.h.} \quad (c_j^\dagger)^2 = 0. \quad (\text{II.2.83})$$

Dies drückt noch einmal explizit die Tatsache aus, daß jeder Zustand höchstens einfach besetzt sein kann.

Analog zum bosonischen Fall können wir wieder die Teilchenzahloperatoren

$$n_j := c_j^\dagger c_j \quad (\text{II.2.84})$$

für die Zahl der Teilchen im Zustand λ_j bzw.

$$\hat{N} := \sum_j n_j = \sum_j c_j^\dagger c_j \quad (\text{II.2.85})$$

für die Gesamtteilchenzahl einführen.

Das Vakuum $|0\rangle$ ist wieder durch $N = 0$ und $c_j |0\rangle = 0$ für alle j charakterisiert. Wir können jetzt ähnlich wie bei den Bosonen sukzessive alle Zustände des Fock-Raumes generieren:

$$c_j^\dagger |0\rangle = |0, \dots, 1_j, \dots\rangle, \quad (\text{II.2.86})$$

$$c_j^\dagger c_l^\dagger |0\rangle = |0, \dots, 1_j, \dots, 1_l, \dots\rangle, \quad (\text{II.2.87})$$

$$c_j^\dagger c_k^\dagger c_l^\dagger |0\rangle = |0, \dots, 1_j, \dots, 1_k, \dots, 1_l, \dots\rangle. \quad (\text{II.2.88})$$

1_j soll dabei andeuten, daß der Zustand λ_j einfach besetzt ist. Es ist zu beachten, daß es nun auf die Reihenfolge der Operatoren ankommt, da ansonsten ein zusätzliches Minuszeichen auftauchen könnte. Allgemein gilt

$$|N_1, N_2, \dots\rangle = (c_1^\dagger)^{N_1} (c_2^\dagger)^{N_2} \dots |0\rangle, \quad (\text{II.2.89})$$

⁷Dabei beachte man die Bedingung $N_j = 0, 1$.

mit $N_j = 0, 1$, da sonst $|N_1, N_2, \dots\rangle = 0$.

Bisher haben wir nur die Zustände in der Besetzungszahldarstellung angegeben. Wir wollen nun auch die Operatoren in dieser Sprache formulieren, d.h. durch Erzeuger und Vernichter ausdrücken. Dies bezeichnet man als 2. *Quantisierung*.

Zunächst betrachten wir eine Einteilchenobservable $A^{(1)}$, d.h.

$$A = \sum_{j=1}^N A^{(1)}(j). \quad (\text{II.2.90})$$

Beispiele sind die kinetische Energie oder der Impuls. Es sei nun A_{jl} eine Darstellung von A , d.h.

$$A_{jl} = \langle \lambda_j | A^{(1)} | \lambda_j \rangle = \int d^3 r \varphi_{\lambda_j}^*(\vec{r}) A^{(1)} \varphi_{\lambda_l}(\vec{r}). \quad (\text{II.2.91})$$

Eine Einteilchenobservable verknüpft zwei Zustände gleicher Teilchenzahl miteinander, indem sie den Zustand eines Teilchens verändert. Somit können wir schreiben

$$A = \sum_{j,l} A_{jl} c_j^\dagger c_l \quad (\text{Fermionen}), \quad (\text{II.2.92})$$

$$A = \sum_{j,l} A_{jl} a_j^\dagger a_l \quad (\text{Bosonen}), \quad (\text{II.2.93})$$

wobei A_{jl} durch (II.2.91) gegeben ist. Die Darstellungen für Bosonen und Fermionen sind also formal identisch und unterscheiden sich nur durch die Algebra der Erzeuger und Vernichter. Man kann explizit nachrechnen — worauf wir hier aber verzichten wollen — daß die Wirkung der Operatoren auf der linken und rechten Seite von (II.2.92) bzw. (II.2.93) im Fock-Raum übereinstimmt. Damit ist dann gezeigt, daß es sich bei den Identitäten tatsächlich um die gesuchte Darstellung der Operatoren A durch Erzeuger und Vernichter handelt.

Wir betrachten nun Zweiteilchenobservable $V^{(2)}$, also Operatoren der Form

$$V = \sum_{j<l} V^{(2)}(j,l) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq l} V^{(2)}(j,l), \quad (\text{II.2.94})$$

d.h. die typischen Wechselwirkungsterme. In diesem Fall haben wir die Matrixelemente

$$V_{ijkl} = \langle \lambda_i \lambda_j | V^{(2)} | \lambda_k \lambda_l \rangle = \int d^3 r \int d^3 r' \varphi_{\lambda_i}^*(\vec{r}) \varphi_{\lambda_j}^*(\vec{r}') V^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\lambda_k}(\vec{r}) \varphi_{\lambda_l}(\vec{r}'). \quad (\text{II.2.95})$$

Damit ergibt sich in 2. Quantisierung für Zweiteilchenoperatoren

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \quad (\text{Fermionen}), \quad (\text{II.2.96})$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l \quad (\text{Bosonen}), \quad (\text{II.2.97})$$

Man beachte die Reihenfolge der Operatoren im Falle der Fermionen! Da die bosonische Operatoren kommutieren, kann man (II.2.97) in der gleichen Form schreiben. Manchmal wird in der Literatur die Reihenfolge $c_i^+ c_j^+ c_k c_l$ der Operatoren angegeben. In diesem Falle sind dann aber die Koeffizienten V_{ijkl} nicht als Matrixelemente wie in (II.2.95) definiert, sondern durch $V_{ijkl} = \int d^3r \int d^3r' \varphi_{\lambda_i}^*(\vec{r}) \varphi_{\lambda_j}^*(\vec{r}') V^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\lambda_k}(\vec{r}') \varphi_{\lambda_l}(\vec{r})$.

An dieser Stelle wollen wir kurz an die algebraische Lösung des harmonischen Oszillators

$$h = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (\text{II.2.98})$$

erinnern. Hier wurde im Prinzip bereits die 2. Quantisierung benutzt. Die hermitesch adjungierten Erzeuger bzw. Vernichter sind definiert durch

$$a := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega}p \right), \quad a^+ := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega}p \right) \quad (\text{II.2.99})$$

und erfüllen die bosonischen Vertauschungsrelationen $[a, a^+] = 1$. Der Hamiltonoperator hat die Darstellung

$$h = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.2.100})$$

mit den zugehörigen Eigenzuständen und -energien

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle, \quad \epsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.2.101})$$

Im Gegensatz zur allgemeinen Form (II.2.93), (II.2.97) ist der Hamiltonoperator durch diese Wahl schon diagonal, d.h. $H_{jl} \propto \delta_{jl}$. Wichtig ist hier vor allem die neue Interpretation der Eigenzustände. Sie werden charakterisiert durch die Zahl n der 'Schwingungsquanten' oder 'Teilchen'. Im Rahmen der Festkörperphysik bezeichnet man diese Schwingungsquanten als *Phononen*.

Unitäre Transformationen und Feldoperatoren

Wir wollen nun untersuchen, wie sich die oben eingeführten Operatoren unter einem Basiswechsel $\{\varphi_\lambda\} \rightarrow \{\chi_\lambda\}$ verhalten. Wir betrachten im folgenden den Fall einer diskreten Quantenzahl $\lambda \rightarrow n$. Alle Ergebnisse lassen sich aber direkt auf den allgemeinen Fall verallgemeinern. Im diskreten Fall können wir den Basiswechsel durch eine unitäre Matrix D beschreiben:

$$|\varphi_j\rangle = \sum_l D_{jl} |\chi_l\rangle \quad \text{mit} \quad DD^+ = \mathbb{1} = D^+D. \quad (\text{II.2.102})$$

Die Umkehrung lautet dann

$$|\chi_j\rangle = \sum_l (D^+)_{jl} |\varphi_l\rangle = \sum_l D_{lj}^* |\varphi_l\rangle. \quad (\text{II.2.103})$$

Es seien nun a_j^+ , a_j die zur Basis $|\varphi_l\rangle$ gehörenden Erzeuger und Vernichter, d.h. insbesondere gilt

$$|\varphi_l\rangle = a_l^+ |0\rangle, \quad (\text{II.2.104})$$

womit die Darstellungen in 1. (linke Seite) und 2. Quantisierung (rechte Seite) miteinander in Verbindung gebracht werden. Hieraus ergibt sich nun

$$|\chi_j\rangle = \sum_l D_{lj}^* |\varphi_l\rangle = \sum_l D_{lj}^* a_l^+ |0\rangle. \quad (\text{II.2.105})$$

Damit sind die zur Basis $|\chi_l\rangle$ gehörenden Erzeuger b_l^+ gegeben durch

$$b_j^+ = \sum_l D_{lj}^* a_l^+, \quad (\text{II.2.106})$$

mit der Umkehrung

$$a_j^+ = \sum_l D_{jl} b_l^+. \quad (\text{II.2.107})$$

Die zugehörigen Vernichter sind die adjungierten Operatoren, also

$$b_j = (b_j^+)^+ = \sum_l D_{jl} a_l, \quad a_j = \sum_l D_{jl}^* b_l. \quad (\text{II.2.108})$$

Wichtig ist nun, daß die transformierten Operatoren b_j , b_j^+ die gleichen (Anti-)Vertauschungsrelationen erfüllen wie die ursprünglichen a_j , a_j^+ , was man leicht durch explizites Nachrechnen überprüft. Als Beispiel betrachten wir Bosonen, für die ja $[a_l, a_j^+] = \delta_{jl}$ gilt. Für die transformierten Operatoren haben wir dann

$$\begin{aligned} [b_l, b_j^+] &= \sum_{i,k} D_{il} D_{kj}^* [a_i, a_k^+] = \sum_{i,k} D_{il} D_{kj}^* \delta_{ik} \\ &= \sum_i D_{il} D_{ij}^* = \delta_{jl}, \end{aligned} \quad (\text{II.2.109})$$

da die Matrix D unitär ist.

Weiterhin folgt, daß auch die Darstellungen der Ein- und Zweiteilchenoperatoren formal nicht verändert werden, z.B.

$$\begin{aligned} h &= \sum_{j,l} \langle \varphi_j | h | \varphi_l \rangle a_j^+ a_l \\ &= \sum_{j,l} \langle \varphi_j | h | \varphi_l \rangle \sum_{i,k} D_{ji} b_i^+ D_{lk}^* b_k \\ &= \sum_{i,k} \sum_{j,l} \langle \varphi_j | D_{ji} h D_{lk}^* | \varphi_l \rangle b_i^+ b_k \\ &= \sum_{i,k} \langle \chi_i | h | \chi_k \rangle b_i^+ b_k, \end{aligned} \quad (\text{II.2.110})$$

wobei wir z.B. $\sum_j \langle \varphi_j | D_{ji} = (\sum_j D_{ji}^* |\varphi_j\rangle)^+ = (|\chi_i\rangle)^+ = \langle \chi_i |$ benutzt haben. Diese Unabhängigkeit ist auch ein Grund, warum wir bei unserer Darstellung der zweiten Quantisierung i.a. nicht auf die spezielle Wahl der Basis Bezug genommen haben.

Wir betrachten nun eine spezielle Basis, nämlich die Eigenfunktionen $|\vec{r}\rangle$ des Ortsoperators. Die Ortsdarstellung dieser Vektoren lautet im eindimensionalen Fall⁸ bekanntlich $\chi_{x'}(x) = \delta(x - x')$. Allgemein folgt für die Basistransformation $|\varphi_i\rangle = \sum_j D_{ij} |\chi_j\rangle$ in Ortsdarstellung

$$\varphi_i(x) = \sum_j D_{ij} \chi_j(x). \quad (\text{II.2.111})$$

Für $\chi_{x'}(x) = \delta(x - x')$ wird der Index j kontinuierlich:

$$\varphi_i(x) = \int dx' D_i(x') \chi_{x'}(x) = \int dx' D_i(x') \delta(x - x'). \quad (\text{II.2.112})$$

Hieraus folgt offensichtlich

$$D_i(x') = \varphi_i(x'). \quad (\text{II.2.113})$$

Die entsprechende Transformation $b_j^+ = \sum_i D_{ij}^* a_i^+$ der Erzeuger wird zu⁹

$$\psi^+(x) = \sum_j \varphi_j^*(x) a_j^+ \quad (\text{II.2.114})$$

und deshalb

$$\psi(x) = \sum_j \varphi_j(x) a_j. \quad (\text{II.2.115})$$

Die Operatoren $\psi(x)$ und $\psi^+(x)$ bezeichnet man als *Feldoperatoren*. Sie erfüllen dieselben (Anti-)Vertauschungsrelationen wie die ursprünglichen Operatoren:

$$\begin{aligned} [\psi(x), \psi(x')]_{\pm} &= [\psi^+(x), \psi^+(x')]_{\pm} = 0, \\ [\psi(x), \psi^+(x')]_{\pm} &= \delta(x - x') \end{aligned} \quad (\text{II.2.116})$$

für Fermionen (+) und Bosonen (-). Die Darstellung der Ein- und Zweiteilchenoperatoren durch Feldoperatoren lautet

$$h = \int dx \psi^+(x) h(x) \psi(x), \quad (\text{II.2.117})$$

$$V = \frac{1}{2} \int dx \int dx' \psi^+(x) \psi^+(x') V(x, x') \psi(x') \psi(x) \quad (\text{II.2.118})$$

⁸Wir beschränken uns im folgenden aus Gründen der Übersichtlichkeit auf den eindimensionalen Fall. Die Verallgemeinerung ist dabei immer offensichtlich.

⁹Konventionell bezeichnet man in diesem Fall die transformierten Operatoren mit $\psi^+(x)$, nicht $b^+(x)$.

Die Feldoperatoren haben eine einfache anschauliche Interpretation. Wie wir gesehen haben, erzeugt a_j^\dagger ein Teilchen im Zustand $|\varphi_j\rangle$, der durch einen Satz von Quantenzahlen mit der Nummer j charakterisiert ist. Analog erzeugt $\psi^+(x)$ ein Teilchen, daß am Punkt x lokalisiert ist. Damit diese Interpretation konsistent ist, muß die Ortsdarstellung von $\psi^+(x)|0\rangle$ eine auf x zentrierte Deltafunktion ergeben. Dies ist tatsächlich der Fall:

$$\begin{aligned}\langle x'|\psi^+(x)|0\rangle &= \sum_j \langle x'|\varphi_j^*(x)a_j^\dagger|0\rangle = \sum_j \varphi_j^*(x)\langle x'|a_j^\dagger|0\rangle \\ &= \sum_j \varphi_j^*(x)\langle x'|\varphi_j\rangle = \sum_j \varphi_j^*(x)\varphi_j(x') = \delta(x-x').\end{aligned}\quad (\text{II.2.119})$$

Im letzten Schritt haben wir die Vollständigkeit der φ_j ausgenutzt.

Wir betrachten nun noch eine andere spezielle Basis, die insbesondere für homogene, translationsinvariante und isotrope Systeme geeignet ist, nämlich die Impulsdarstellung¹⁰:

$$|\varphi_j\rangle \rightarrow |\vec{k}\rangle = a_{\vec{k}}^\dagger|0\rangle. \quad (\text{II.2.120})$$

Bei periodischen Randbedingungen gilt

$$\langle \vec{k}|\vec{k}'\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} = \frac{1}{V} \int d^3r e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \quad \text{bzw.} \quad \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \delta(\vec{r}), \quad (\text{II.2.121})$$

wobei die Wellenvektoren \vec{k} in einem endlichen Volumen¹¹ V diskret sind. Im Kontinuums- bzw. thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$ (so, daß $N \rightarrow \infty$ und $\rho = \frac{N}{V}$ konstant) haben wir zu ersetzen

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \quad \text{und} \quad \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \rightarrow \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\vec{k}-\vec{k}'). \quad (\text{II.2.122})$$

Wir betrachten wieder einen typischen translationsinvarianten Hamiltonoperator

$$H = \sum_{j=1}^N T(j) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(i,j), \quad (\text{II.2.123})$$

wobei zusätzlich die Wechselwirkung isotrop sein soll, d.h. $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$. $T(j) = \frac{p_j^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2$ ist die kinetische Energie des j -ten Teilchens, für deren Matrixelemente gilt:

$$\langle \vec{k}'|T|\vec{k}\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{k}'|\nabla^2|\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle \vec{k}'|\vec{k}\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{\vec{k}',\vec{k}} =: \epsilon_0(k) \delta_{\vec{k}',\vec{k}}. \quad (\text{II.2.124})$$

¹⁰Der Übergang geschieht also durch eine Fouriertransformation.

¹¹Es ist i.a. aus dem Zusammenhang klar, ob mit V das Volumen oder das Potential gemeint ist!

Um die Darstellung des Operators in zweiter Quantisierung angeben zu können, benötigen wir noch die Matrixelemente des Wechselwirkungsterms $V(\vec{r}, \vec{r}') = V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$, die wir unter Benutzung der Ortsdarstellung berechnen können:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{k}_1, \vec{k}_2 | V(1, 2) | \vec{k}'_1, \vec{k}'_2 \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \right)^4 \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 - i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}'_1 \cdot \vec{r}_1 + i\vec{k}'_2 \cdot \vec{r}_2} \\
&= \frac{1}{V^2} \int d^3 R \int d^3 r V(r) e^{i(\vec{k}'_1 - \vec{k}_1) \cdot \vec{R}} e^{\frac{i}{2}(\vec{k}'_1 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{k}'_2 - \vec{k}_2) \cdot \vec{R}} e^{-\frac{i}{2}(\vec{k}'_2 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} \\
&= \frac{1}{V} \int d^3 r V(r) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2} \\
&= \frac{1}{V} \tilde{V}(\vec{k}) \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2}, \tag{II.2.125}
\end{aligned}$$

mit $\vec{k} := \frac{1}{2}(\vec{k}'_1 - \vec{k}_1 - \vec{k}'_2 + \vec{k}_2)$ und der Fourier-Transformierten

$$\tilde{V}(\vec{k}) := \int d^3 r V(r) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \tag{II.2.126}$$

des Zweiteilchensterms V . Beim Übergang zur zweiten Zeile haben wir dabei die Relativkoordinate \vec{r} und den Schwerpunkt \vec{R} eingeführt, d.h.

$$\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{1}{2}\vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{1}{2}\vec{r}, \tag{II.2.127}$$

um so die Isotropie von V ausnutzen zu können. Der Term $\delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2}$ spiegelt die Impulserhaltung wieder: Der Impuls $\vec{k}_1 + \vec{k}_2$ der erzeugten Teilchen ist gleich dem Impuls $\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2$ der vernichteten Teilchen.

Nun können wir explizit angeben, wie der Wechselwirkungsterm in in Impulsdarstellung in 2. Quantisierung aussieht:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} V_{ijkl} a_i^+ a_j^+ a_l a_k &\xrightarrow{\text{Impulsdarstellung}} \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2} \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | V | \vec{k}'_1 \vec{k}'_2 \rangle a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ a_{\vec{k}'_2} a_{\vec{k}'_1} \\
&= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2} \tilde{V}(\vec{k}) \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2} a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ a_{\vec{k}'_2} a_{\vec{k}'_1} \\
&= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}, \vec{q}, \vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) a_{\vec{q} + \vec{k}}^+ a_{\vec{p} - \vec{k}}^+ a_{\vec{p}} a_{\vec{q}}. \tag{II.2.128}
\end{aligned}$$

In Abb. II.2.4 wird eine anschauliche Interpretation der Wirkung dieses Operators in Form eines *Feynman-Diagrammes* gegeben. Ursprünglich hat man zwei Teilchen mit den Impuls \vec{p} und \vec{q} . Bei deren Wechselwirkung wird der Impuls \vec{k} übertragen und nachher haben die Teilchen die Impulse $\vec{p} - \vec{k}$ und $\vec{q} + \vec{k}$.

Somit können wir die Impulsdarstellung des Hamiltonoperators in 2. Quantisierung angeben:

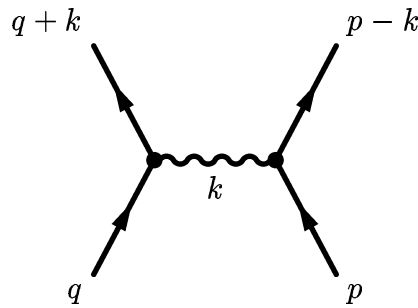


Abbildung II.2.4: Feynman-Diagramm zur Veranschaulichung der Wechselwirkung in Impulsdarstellung.

$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon_0(k) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}, \vec{q}, \vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) a_{\vec{q}+\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{p}-\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{p}} a_{\vec{q}}. \quad (\text{II.2.129})$$

Diese Darstellung hat zwei wesentliche Vorteile:

1. Die kinetische Energie ist diagonal.
2. Das Potential erfordert nur noch Dreifachsummen. Dies ist eine Folge der Translationsinvarianz.

Abschließend wollen wir noch den Zusammenhang der Impulsoperatoren mit den Feldoperatoren angeben. Es gilt

$$a_{\vec{k}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi^{\dagger}(\vec{r}), \quad \psi^{\dagger}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}}^{\dagger}. \quad (\text{II.2.130})$$

Diese Beziehung kann leicht gezeigt werden (siehe Aufgabe 15) und wird später noch öfter benutzt.

II.2.4 Hartree-Fock-Näherung und homogenes Elektronengas

Vielteilchenprobleme sind, bis auf wenige Ausnahmen, nicht exakt lösbar. Man ist daher auf Näherungsverfahren angewiesen. Eine besonders wichtige Methode ist das sogenannte *Hartree-Fock-Verfahren*. Hierbei versucht man, ein System *wechselwirkender Fermionen* näherungsweise durch ein effektives Einteilchenproblem zu beschreiben. Der Methode liegt die Vorstellung zugrunde, daß sich jedes Teilchen in einem mittleren Einteilchenpotential¹² bewegt, das durch die anderen Teilchen (und ggfs. ein äußeres Potential) erzeugt wird. Das ein solches Bild nützlich sein kann, haben wir z.B. bei der störungstheoretischen Behandlung des Helium-Atoms gesehen. Dort ergab sich als wesentlicher Effekt, daß ein Teil der Kernladung Z durch das zweite Elektron abgeschirmt wurde und das deshalb jedes Elektron auf Grund der Anwesenheit des anderen nur eine effektive Kernladung Z_{eff} sieht.

¹²Dies bezeichnet man allgemein als *Mean-Field-Näherung*.

Ausgangspunkt ist der Hamilton-Operator für ein N -Teilchensystem

$$\begin{aligned} H &= \sum_{j=1}^N (T(j) + U(j)) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(i, j) \\ &= \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j + U(\vec{r}_j) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i, \vec{r}_j). \end{aligned} \quad (\text{II.2.131})$$

Dabei ist $U(j)$ ein Einteilchenpotential. Im folgenden werden wir den Einteilchenanteil $T(j) + U(j)$ mit $h(j)$ abkürzen.

Unser Ziel ist es nun, diesen exakten Hamilton-Operator durch einen effektiven Einteilchenoperator

$$H_{HF} = \sum_{j=1}^N h_{HF}(j) = \sum_{j=1}^N (T(j) + V_{HF}(j)) \quad (\text{II.2.132})$$

zu approximieren. Dabei ist das *Hartree-Fock-Potential* V_{HF} geeignet zu bestimmen. Haben wir einen Operator der Form (II.2.132) gefunden, so können wir seine Eigenfunktionen und die zugehörigen Energien leicht angeben:

$$H_{HF}\psi = E\psi \quad \text{mit} \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\varphi_j(\vec{r}_i)), \quad (\text{II.2.133})$$

wobei die Wellenfunktionen φ_j Lösungen des Einteilchenproblems

$$h_{HF}\varphi_j = \tilde{\epsilon}_j\varphi_j \quad (\text{II.2.134})$$

sind.

Es bleibt das Problem, ein geeignetes Potential V_{HF} zu finden. Erst wenn dieses bekannt ist, können wir die Einteilchenfunktionen φ_j und damit die approximative Vielteilchenfunktion ψ bestimmen. Die grundlegende Idee besteht nun in der Erkenntnis, daß wir es am Ende mit einer Slater-Determinante zu tun haben werden. Es liegt daher nahe, mit Hilfe des Variationsprinzips die Slater-Determinante zu suchen, die die Gesamtenergie des Systems minimiert. Dazu variieren wir den Erwartungswert des *exakten* Hamiltonoperators H bzgl. einer Slater-Determinante

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\varphi_j(\vec{r}_i)) \quad (\text{II.2.135})$$

nach den Einteilchenwellenfunktionen:

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_\alpha^*(\vec{r})} \left[\langle \Phi | H | \Phi \rangle - \sum_{j=1}^N \epsilon_j \int d^3r' \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}') \right] \stackrel{!}{=} 0. \quad (\text{II.2.136})$$

Die Einteilchenfunktionen φ_j sind dabei noch absolut beliebig. Wir haben außerdem Lagrange-Parameter ϵ_j eingeführt, um die Normierung $\langle \varphi_j | \varphi_j \rangle = 1$ der Einteilchenfunktionen als Nebenbedingung zu berücksichtigen. Bei der Variation ist zu beachten, daß der Real- und Imaginärteil

als unabhängige Variablen zu betrachten sind. Statt nach diesen kann aber auch nach φ_α und φ_α^* variieren. Wir betrachten hier nur die Variation nach φ_α^* , da die nach φ_α auf eine äquivalente Gleichung führt. Dies liegt darin begründet, daß wir ein reellwertiges Funktional betrachten. Erwartungswerte von Slater-Determinanten haben wir früher schon berechnet (siehe Aufg. 14). Es gilt:

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{j=1}^N \langle \varphi_j | h | \varphi_j \rangle + \frac{1}{2} \left[\sum_{i,j=1}^N \langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_i \varphi_j \rangle - \sum_{i,j=1}^N \langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_j \varphi_i \rangle \right]. \quad (\text{II.2.137})$$

Die beiden letzten Ausdrücke sind wieder der direkte Term und der Austauschterm. Wir können nun die Variation explizit durchführen, wobei

$$\frac{\delta \varphi_j^*(\vec{r}')}{\delta \varphi_\alpha^*(\vec{r})} = \delta_{j\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{II.2.138})$$

zu beachten ist:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta}{\delta \varphi_\alpha^*(\vec{r})} \left[\sum_{j=1}^N \int d^3 r' \varphi_j^*(\vec{r}') \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta' + U(\vec{r}') \right) \varphi_j(\vec{r}') \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_j^*(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_j^*(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \varphi_j(\vec{r}_1) \varphi_i(\vec{r}_2) \\ &\quad \left. - \sum_j \epsilon_j \int d^3 r' \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}') \right] \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right) \varphi_\alpha(\vec{r}) + \frac{1}{2} \sum_j \int d^3 r' \varphi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_\alpha(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}') \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_i \int d^3 r' \varphi_i^*(\vec{r}') V(\vec{r}', \vec{r}) \varphi_i(\vec{r}') \varphi_\alpha(\vec{r}) - \frac{1}{2} \sum_j \int d^3 r' \varphi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_j(\vec{r}') \varphi_\alpha(\vec{r}') \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_i \int d^3 r' \varphi_i^*(\vec{r}') V(\vec{r}', \vec{r}) \varphi_\alpha(\vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') - \epsilon_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{II.2.139})$$

Wegen $V(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r}', \vec{r})$ sind die erste und zweite und die dritte und vierte Summe jeweils gleich. Weiterhin ist es zweckmässig, die Dichte $\rho(\vec{r})$ bzw. die Dichtematrix $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ einzuführen:

$$\rho(\vec{r}) := \sum_{j=1}^N \varphi_j^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}), \quad (\text{II.2.140})$$

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') := \sum_{j=1}^N \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}). \quad (\text{II.2.141})$$

Offensichtlich ist $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r})$ und $\rho^*(\vec{r}, \vec{r}') = \rho(\vec{r}', \vec{r})$. Mit diesen Größen können wir nun die *Hartree-Fock-Gleichungen* angeben:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) + \int d^3r' \rho(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \right] \varphi_\alpha(\vec{r}) - \int \rho(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_\alpha(\vec{r}') d^3r' = \epsilon_\alpha \varphi_\alpha(\vec{r}). \quad (\text{II.2.142})$$

Hieraus können wir das gesuchte Hartree-Fock-Potential ablesen:

$$V_{HF} = U(\vec{r}) + \int d^3r' \rho(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') - \int \rho(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \dots d^3r'. \quad (\text{II.2.143})$$

Hierbei ist die Wellenfunktion $\varphi(\vec{r})$, auf die V_{HF} angewendet wird, auch unter dem zweiten Integral bei \dots einzusetzen. Diesen Integralterm bezeichnet man als *Austauschoperator*. Das Hartree-Fock-Potential ist *nichtlokal*, d.h. es gehen nicht nur die Werte von φ an der Stelle \vec{r} ein, sondern durch die Integration über φ alle \vec{r}' . Diese Nichtlokalität des Potentials ist der Preis, den wir für die Reduktion auf ein Einteilchenproblem zu zahlen haben! Man rechnet im Übrigen leicht nach, daß das Hartree-Fock-Potential hermitesch ist. Daraus folgt, daß die Lösungen von (II.2.132) zu reellen ϵ_α führt und die zugehörigen Eigenfunktionen φ_α paarweise orthogonal sind. Wir sehen also, daß wir diese Orthogonalität nicht durch weitere Lagrange-Parameter in (II.2.136) erzwingen müssen.

Wir stehen nun vor dem Problem, daß wir es nicht mit einem gewöhnlichen Eigenwertproblem zu tun haben. Man darf nämlich nicht vergessen, daß die Dichteoperatoren $\rho(\vec{r})$ und $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ in (II.2.132) selbst von den noch zu bestimmenden Eigenfunktionen φ_j abhängen! Zur Lösung dieses Problems benutzt man ein sogenanntes *selbstkonsistentes Verfahren*:

- (0) Beginne mit einer Anfangsnäherung $\tilde{\varphi}_j(\vec{r})$ (mit $j = 1, \dots, N$).
- (1) Berechne das Hartree-Fock-Potential V_{HF} zu der Dichtematrix $\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_j \tilde{\varphi}_j^*(\vec{r}') \tilde{\varphi}_j(\vec{r})$.
- (2) Löse die Eigenwertgleichung $(T + V_{HF})\varphi_\alpha = \epsilon_\alpha \varphi_\alpha$. Diese besitzt i.a. unendlich viele Lösungen.
- (3) Wähle die Funktionen zu den N niedrigsten Eigenwerten aus. Setze diese gleich $\tilde{\varphi}_j(\vec{r})$ und gehe zu Schritt (1).

Dieses Verfahren iteriert man so lange, bis Selbstkonsistenz erreicht ist, d.h. die Konvergenz des Verfahrens. Man beachte, daß man so nicht nur die besetzten Einteilchenpotentiale erhält, sondern auch die unbesetzten, d.h. eine Orthonormalbasis.

Die Energie des Hartree-Fock-Zustandes können wir auch angeben:

$$\begin{aligned}
E_{HF} &= \sum_j \langle \varphi_j | h | \varphi_j \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j} [\langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_j \varphi_i \rangle] \\
&= \sum_i \int d^3 r \varphi_i^*(\vec{r}) \left[\left(h + \sum_j \int d^3 r' \varphi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_j(\vec{r}') \right) \varphi_i(\vec{r}) \right. \\
&\quad \left. - \sum_j \int d^3 r' \varphi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}) \right] - \frac{1}{2} \sum_{i,j} [\langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_j \varphi_i \rangle] \\
&= \sum_i \int d^3 r \varphi_i^*(\vec{r}) \epsilon_i \varphi_i(\vec{r}) - \frac{1}{2} \sum_{i,j} [\langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_j \varphi_i \rangle]. \quad (\text{II.2.144})
\end{aligned}$$

Bei der ersten Umformung haben wir die Doppelsummen einmal addiert und wieder subtrahiert, bei der zweiten Umformung wurden die Hartree-Fock-Gleichungen ausgenutzt. Somit folgt für die *Hartree-Fock-Energie*:

$$\begin{aligned}
E_{HF} &= \sum_{j=1}^N \epsilon_j - \frac{1}{2} \sum_{i,j} [\langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | V | \varphi_j \varphi_i \rangle] \quad (\text{II.2.145}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (\epsilon_j + \langle \varphi_j | h | \varphi_j \rangle). \quad (\text{II.2.146})
\end{aligned}$$

Der Beweis der zweiten Identität geschieht dabei analog, aber statt der Doppelsumme wird die Einfachsumme in zwei gleiche Teile aufgespalten, unter Verwendung von

$$\epsilon_\alpha = \langle \varphi_\alpha | h | \varphi_\alpha \rangle + \sum_j (\langle \varphi_\alpha \varphi_j | V | \varphi_\alpha \varphi_j \rangle - \langle \varphi_\alpha \varphi_j | V | \varphi_j \varphi_\alpha \rangle), \quad (\text{II.2.147})$$

was aus den Hartree-Fock-Gleichungen durch Multiplikation mit $\varphi_\alpha^*(\vec{r})$ und anschließender Integration über \vec{r} folgt.

Man beachte, daß die ϵ_j streng genommen keine Einteilchenenergien sind. Wir haben sie in (II.2.136) als Lagrange-Parameter unserer Energiefunktion eingeführt, um die Nebenbedingung der Normierung der Einteilchenfunktionen zu gewährleisten. Es stellt sich die Frage, warum eigentlich die Hartree-Fock-Energie E_{HF} nicht gleich der Summe von Einteilchenenergien $\sum_j \tilde{\epsilon}_j$ ist. Der Grund hierfür ist, daß wir nicht bei unserer ursprünglichen Idee der Approximation des exakten Hamiltonoperators H durch einen effektiven Einteilchenoperator stehengeblieben sind. Diese Idee wurde nur Begründung des Slater-Determinanten-Ansatzes im Variationsprinzip verwendet. Im Endeffekt haben wir dann einen Einteilchenoperator erhalten, der aber selbst noch von den zu bestimmenden Wellenfunktionen abhängt. Die Energie E_{HF} aus (II.2.146) sollte daher besser sein als die Summe $\sum_j \tilde{\epsilon}_j$ der Einteilchenenergien ϵ_j . Das dies tatsächlich so ist, wird in Aufgabe 14 gezeigt.

Als Anwendung betrachten wir translationsinvariante, isotrope Systeme, d.h. mit einer Wechselwirkung $V(\vec{r}, \vec{r}') = V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$. In diesem Fall überzeugt man sich, daß ebene Wellen

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{II.2.148})$$

Lösungen der Hartree-Fock-Gleichungen (II.2.142) sind. Für die Dichte und die Dichtematrix ergibt sich

$$\rho(\vec{r}) = \frac{N}{V} \quad \text{und} \quad \rho(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{V} \sum'_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}. \quad (\text{II.2.149})$$

Dabei ist die Summe $\sum'_{\vec{k}}$ nur über die besetzten Zustände zu erstrecken. Mit der Fourierentwicklung

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (\text{II.2.150})$$

des Potentials kann man dann zeigen, daß die Einteilchenenergien durch

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U + \frac{N}{V} V_{\vec{q}=0} - \frac{1}{V} \sum'_{\vec{k}} V_{\vec{k}-\vec{k}} \quad (\text{II.2.151})$$

gegeben sind. Damit ergibt sich für die Hartree-Fock-Energie

$$E_{HF} = \sum'_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + NU + \frac{N^2}{2V} V_{\vec{q}=0} - \frac{1}{2V} \sum'_{\vec{k}} \sum'_{\vec{k}} V_{\vec{k}-\vec{k}}. \quad (\text{II.2.152})$$

Als konkretes Beispiel wollen wir ein homogenes Elektronengas betrachten. Dieses ist ein einfaches Modell für ein Metall. Die Elektronen sind frei beweglichen in einem positiven Ladungshintergrund. Man stellt sich vor, daß die positive Ladung gleichmäßig ausgeschmiert ist, mit einer Ladungsdichte $e\rho_0 = eN/V$. Die Hintergrundladung liefert also einen Beitrag zum (externen) Potential U . Das Modell wird aus naheliegenden Gründen¹³ als *Jellium-Modell* bezeichnet.

Die Coulomb-Wechselwirkung $V(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$ der Elektronen liefert nach Fouriertransformation

$$V_{\vec{q}=0} = \int_V d^3r \frac{e^2}{r} \quad \text{und} \quad V_{\vec{q} \neq 0} = \frac{4\pi e^2}{q^2}. \quad (\text{II.2.153})$$

Es zeigt sich, daß der Beitrag von $V_{\vec{q}=0}$ gerade durch die Hintergrundladung (also U) kompensiert wird. Der Hartree-Fock-Grundzustand ergibt sich, wenn man alle Impulse \vec{k} mit $k < k_F$ besetzt. Dies bezeichnet man auch als *Fermi-Kugel* (siehe Abb. II.2.5). Der Fermi-Impuls k_F ist dann durch die Bedingung $N = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$ bestimmt. Sie folgt aus der Bedingung, daß innerhalb der Fermi-Kugel genau N Zustände liegen. Fügt man nun alle diese Ergebnisse zusammen, so ergibt

¹³„jelly“ = Gelee

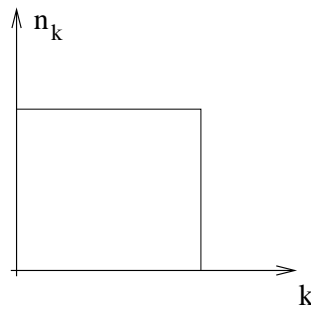


Abbildung II.2.5: Schematische Darstellung der Fermi-Kugel: Alle Zustände mit $k < k_F$ sind besetzt ($n_{\vec{k}} = 1$).

sich für die Hartree-Fock-Energie

$$E_{HF} = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{2\pi} \sum_{k < k_F} \left[2 + \frac{k_F^2 - k^2}{kk_F} \ln \left| \frac{k + k_F}{k - k_F} \right| \right] \quad (\text{II.2.154})$$

$$= \frac{N\hbar^2}{2ma_0^2} \left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right) \quad (\text{II.2.155})$$

$$= E_{\text{kin}} + E_{\text{aus}}. \quad (\text{II.2.156})$$

Der Faktor 2 rührt davon her, daß üblicherweise der Spin der Elektronen mit berücksichtigt wird. Neben dem Bohrschen Radius a_0 haben wir auch den dimensionslosen Parameter r_s mit $\frac{4\pi}{3} r_s^3 a_0^3 = \frac{V}{N}$ eingeführt, der ein Maß für den mittleren Abstand zweier Elektronen ist. Die Hartree-Fock-Energie besteht also aus zwei Anteilen E_{kin} und E_{aus} , die von der kinetischen Energie bzw. der Austauschwechselwirkung herrühren.

Die bisher dargestellten Betrachtungen sind nur ein Teil der Erkenntnisse, die man durch die Untersuchung der homogenen Elektronengases in Hartree-Fock-Näherung gewinnen kann. Zunächst kann man die Ergebnisse für den Grundzustand noch weiter analysieren. Hierbei stößt man auf interessante Probleme, wie die Möglichkeit der Bildung eines *Wigner-Kristalls*, d.h. eines Übergangs des Elektronengases in eine kristalline Struktur bei hinreichend niedrigen Dichten und tiefen Temperaturen. Die Untersuchungen lassen sich auch ausdehnen auf möglichen Anregungen. All dies ist Gegenstand der Vorlesungen zur Festkörperphysik.

II.3 Kanonische Quantisierung eines Skalarfeldes

Im Rest der Vorlesung wollen wir uns nun mit Quantenfeldtheorien beschäftigen. Zunächst stellt sich die Frage, wie wir den Übergang von einer klassischen Feldtheorie zu einer Quantenfeldtheorie bewerkstelligen. Da wir Felder bzw. Wellenfunktionen quantisieren müssen, werden die Methoden der 2. Quantisierung eine wesentliche Rolle spielen.

Grundsätzlich gibt es viele verschiedene Quantisierungsverfahren. Die wichtigsten sind:

1. *Kanonische Quantisierung*: Die kanonische Quantisierung orientiert sich stark an der Entwicklung der Quantenmechanik. Es werden geeignete kanonisch-konjugierte Variablen

(der Felder) gesucht, die dann durch Operatoren ersetzt werden, wobei die Poisson-Klammer der klassischen Physik in den Kommutator übergeht. Ein Problem dieses Verfahren ist, daß die Zeit als eine ausgezeichnete Koordinate behandelt wird und das so i.a. die Lorentz-Invarianz der quantisierten Theorie nicht gewährleistet ist. Allerdings hat es den großen Vorteil, daß nur physikalische Moden quantisiert werden und so keine unphysikalischen Zustände entstehen. Außerdem ist das Prinzip des Verfahrens relativ einfach, die Anwendung kann aber z.B. bei nichtabelschen Eichtheorien sehr kompliziert werden.

2. *Pfadintegral-Quantisierung*: Diese Verfahren ist sehr elegant und ziemlich allgemein. Es handelt sich um eine sehr intuitive Formulierung, die dazu noch mit vielen anderen Quantisierungsverfahren zusammenhängt. Die Pfadintegral-Quantisierung hat allerdings den Nachteil, daß die auftretenden Funktionalintegrale mathematisch manchmal etwas heikel sind.
3. *Gupta-Bleuler-Quantisierung*: Dieses Verfahren ist auch als *kovariante Quantisierung* bekannt. Im Gegensatz zur kanonischen Quantisierung erhält es die Lorentz-Invarianz der klassischen Theorie. Allerdings werden häufig unphysikalische Zustände mit negativer Norm erzeugt. Diese bezeichnet man auch als "Geister" oder "Ghosts".
4. *BRST-Quantisierung*: Diese Methode ist benannt nach den Physikern Becchi, Rouet, Stora und Tyupin. Es ist das wichtigste Quantisierungsverfahren für Eichtheorien, erzeugt aber auch Ghost-Zustände. Es besteht ein enger Zusammenhang mit der Pfadintegral-Quantisierung.

Das physikalisch relevanteste Beispiel für ein quantisiertes Feld ist sicherlich das elektromagnetische Feld. Bevor wir dieses im nächsten Abschnitt untersuchen werden, wollen wir u.a. als eine Art Vorüberlegung das einfachere Klein-Gordon-Feld quantisieren. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse kommen uns später zu Gute. Das EM-Feld ist ja ein Vektorfeld, das der Klein-Gordon-Gleichung genügt.

Wir betrachten daher ein reelles Skalarfeld ϕ , das der freien Klein-Gordon-Gleichung

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi(x) = 0 \quad (\text{II.3.1})$$

genügt, wobei bekanntlich $\square = \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$ und x die Vierer-Koordinate ist. Die Gleichung (II.3.1) beschreibt für reelles ϕ ein neutrales Teilchen mit Spin 0. Den Fall einer komplexen Wellenfunktion, die geladene Teilchen beschreibt (siehe Kap. I.3.3), birgt zusätzliche Schwierigkeiten. Wir werden ihn später behandeln. Es so außerdem an die Lorentz-Invarianz der Gleichung erinnert: Unter Lorentz-Transformationen $x' = \Lambda x$ transformiert sich die Wellenfunktion gemäß $\phi'(x') = \phi(x)$.

Wir treffen nun die in der Feldtheorie übliche Konvention und setzen $\hbar = c = 1$. Damit ist z.B. $x^0 = ct \rightarrow t$, $mc^2 \rightarrow m$ etc. Die freie Klein-Gordon-Gleichung lautet dann

$$\boxed{(\square + m^2) \phi(x) = 0} \quad (\text{II.3.2})$$

Ist speziell $\nabla^2\phi = 0$, so vereinfacht sich dies zu

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = -m^2\phi. \quad (\text{II.3.3})$$

In diesem Fall reduziert sich die Klein-Gordon-Gleichung auf die Gleichung eines harmonischen Oszillators.

Im folgenden wollen wir nun von einem reellen Feld $\phi(x)$ ausgehen. In diesem Fall können wir $\phi(x) = \phi(\vec{r}, t)$ als Auslenkung einer schwingenden Saite am Ort \vec{r} zur Zeit t interpretieren. In Kap. II.1 haben wir diese schon als Kontinuumslimit eines Systems gekoppelter Massenpunkte betrachtet. Aus der Mechanik wissen wir, daß sich gekoppelte Pendel durch den Übergang zu Normalkoordinaten entkoppeln lassen. Dies wollen wir im folgenden tun. Dazu betrachten wir zunächst das Feld in einem endlichen Volumen $V = L^3$ mit periodischen Randbedingungen, d.h. $\phi(x_j + L) = \phi(x_j)$ für $j = 1, 2, 3$. Dann können wir eine (räumliche) Fourier-Entwicklung vornehmen:

$$\phi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} q_{\vec{k}}(t). \quad (\text{II.3.4})$$

Da das Feld ϕ reell ist, folgt für die Fourierkoeffizienten

$$q_{\vec{k}}^* = q_{-\vec{k}}. \quad (\text{II.3.5})$$

Die Fourierkoeffizienten sind also i.a. komplex, allerdings sind die Koeffizienten zu \vec{k} und $-\vec{k}$ nicht unabhängig voneinander.

Aus der Periodizität der Wellenfunktion folgt, daß $e^{ik_x(x+L)} = e^{ik_x x}$ und somit $e^{ikL} = 1$ ist (und analog für die anderen Komponenten). Deshalb haben die erlaubten Wellenzahlen die Form

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \quad \text{mit } n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{II.3.6})$$

Für große Systeme wird der Abstand $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L}$ aufeinanderfolgender Punkte immer kleiner. Deshalb können Impulssummen in Integrale umgewandelt werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \dots &= \frac{1}{V} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \dots = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}} \Delta^3 k \dots \\ &\rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k \dots \end{aligned} \quad (\text{II.3.7})$$

Mit Hilfe der Fourier-Transformierten folgt zunächst

$$\nabla^2\phi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} (-k^2) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} q_{\vec{k}}(t) \quad (\text{II.3.8})$$

und daraus die Bewegungsgleichung

$$\ddot{q}_{\vec{k}} + (k^2 + m^2)q_{\vec{k}} = 0 \quad (\text{II.3.9})$$

für die Fourier-Koeffizienten. Mit der Definition¹⁴ $\omega_{\vec{k}} = \sqrt{k^2 + m^2}$ folgt, daß jeder Fourier-Koeffizient der Gleichung eines harmonischen Oszillators genügt:

$$\ddot{q}_k + \omega_k^2 q_k = 0. \quad (\text{II.3.10})$$

Wir gehen jetzt zur Hamiltonschen Formulierung über. Dazu setzen wir

$$\dot{q}_k = p_{-k} \quad \text{und} \quad \dot{p}_{-k} = -\omega_k^2 q_k, \quad (\text{II.3.11})$$

womit automatisch (II.3.10) erfüllt ist. Nach den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen ist

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \quad \text{und} \quad \dot{p}_{-k} = -\frac{\partial H}{\partial q_{-k}}. \quad (\text{II.3.12})$$

Hieraus ergibt sich für die Energie des Skalarfeldes

$$H = \sum_k \frac{1}{2} (p_k p_{-k} + \omega_k^2 q_k q_{-k}). \quad (\text{II.3.13})$$

Wir führen nun die Größen

$$b_k := \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} [\omega_k q_k + i p_{-k}], \quad b_k^* := \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} [\omega_k q_{-k} - i p_k] \quad (\text{II.3.14})$$

ein, mit denen sich die kanonischen Koordinaten und Impulse gemäß

$$q_k = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} (b_k + b_{-k}^*), \quad p_{-k} = -i\sqrt{\frac{\omega_k}{2}} (b_k - b_{-k}^*) \quad (\text{II.3.15})$$

ausdrücken lassen. Setzt man dies in die Energiefunktion ein, so erhält man

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \frac{1}{2} \left[-\frac{\omega_k}{2} (b_k - b_{-k}^*)(b_{-k} - b_k^*) + \frac{\omega_k}{2} (b_k + b_{-k}^*)(b_{-k} + b_k^*) \right] \\ &= \sum_k \frac{\omega_k}{2} [b_k b_k^* + b_{-k}^* b_{-k}] \\ &= \sum_k \omega_k b_k^* b_k. \end{aligned} \quad (\text{II.3.16})$$

In den neuen Koordinaten ist die Hamiltonfunktion besonders einfach, insbesondere sind die Zahlen $b_k^* b_k$ dimensionslos.

Wir wollen nun die Theorie in Analogie zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator quantisieren. Dabei gehen wir vor, wie in Axiom 4 in Kap. I.0 beschrieben: Die kanonisch-konjugierten Größen q_k und p_k werden zu Operatoren, wobei die Poisson-Klammer durch den Kommutator zu ersetzen ist¹⁵:

$$[q_k, p_{k'}] = i\delta_{k,k'}, \quad [q_k, q_{k'}] = [p_k, p_{k'}] = 0. \quad (\text{II.3.17})$$

¹⁴Da $\omega_{\vec{k}}$ nur von $|\vec{k}|$ abhängt, schreiben wir im folgenden immer k statt \vec{k} .

¹⁵Zur Erinnerung: $\hbar = 1$.

Als Konsequenz haben wir in den neuen Koordinaten b_k^* durch den hermitesch Adjungierten b_k^+ zu ersetzen, womit sich dann die Kommutatorbeziehungen

$$[b_k, b_{k'}^+] = \delta_{k,k'}, \quad [b_k, b_{k'}] = [b_k^+, b_{k'}^+] = 0 \quad (\text{II.3.18})$$

ergeben. Die zu den Koordinaten b_k gehörenden Operatoren genügen also einer Bose-Algebra. Wir können deshalb die Ergebnisse aus dem vorigen Kapitel übernehmen und die Zustände in Besetzungszahldarstellung konstruieren. Dabei entsprechen die Bose-Teilchen den Schwingungsquanten. Das Vakuum $|0\rangle$ ist wieder durch $b_k|0\rangle = 0$ für alle k charakterisiert und einen allgemeinen Zustand erhalten wir aus

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_k \frac{(b_k^+)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} |0\rangle. \quad (\text{II.3.19})$$

Diese sind Eigenzustände des quantisierten Hamilton-Operators

$$H = \sum_k \omega_k b_k^+ b_k, \quad (\text{II.3.20})$$

da $b_k^+ b_k$ gerade der Teilchenzahloperator \hat{n}_k für die Zahl der Teilchen mit Impuls k ist. Die zugehörige Energie ist somit $E = \sum_k \omega_k n_k$. Wir haben hier die Energie so normiert, daß $H|0\rangle = 0$ ist, d.h. die Grundzustandsenergie von H ist $E_0 = 0$, die Vakuumenergie.

Wenn wir unseren bisherigen Ergebnisse (z.B. (II.3.15)) in die Ausgangsgleichungen für die Feldamplitude $\phi(\vec{r}, t)$ einsetzen (siehe (II.3.4)), erhalten wir den Feldoperator

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} [b_k(t) + b_{-\vec{k}}^+(t)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_k(t) + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_k^+(t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.3.21})$$

Hiermit haben wir also nun explizit unsere klassische skalare Feldtheorie quantisiert, d.h. aus der Feldamplitude ist nun ein Feldoperator geworden.

Wir wollen nun noch die Zeitabhängigkeit der Operatoren $b_k(t)$ und $b_k^+(t)$ explizit bestimmen. Im Heisenberg-Bild haben wir

$$b_k(t) = e^{iHt} b_k(0) e^{-iHt}, \quad (\text{II.3.22})$$

woraus folgt:

$$i \frac{\partial b_k}{\partial t} = \dot{b}_k = [b_k, H] = \omega_k [b_k, b_k^+ b_k] = \omega_k b_k. \quad (\text{II.3.23})$$

Diese einfache Differentialgleichung hat die Lösung

$$b_k(t) = b_k e^{-i\omega_k t} \quad \text{mit } b_k := b_k(0). \quad (\text{II.3.24})$$

Analog folgt

$$b_k^+(t) = b_k^+ e^{i\omega_k t}. \quad (\text{II.3.25})$$

Somit erhalten wir für das quantisierte Feld die Darstellung

$$\phi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left[b_k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_k t)} + h.c. \right], \quad (\text{II.3.26})$$

wobei “h.c.” einer üblichen Konvention folgend für das hermitesch konjugierte steht. Man kann explizit nachprüfen, daß dieses Feld eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung darstellt.

Wir wollen uns nun die Struktur des Vakuums näher ansehen. Im klassischen Fall verschwindet das im tiefsten Energiezustand (Vakuum), so daß wir symbolisch schreiben können¹⁶

$$\langle 0 | \phi^n | 0 \rangle_{\text{klass.}} = 0 \quad \text{für alle } n. \quad (\text{II.3.27})$$

Im quantenmechanischen Fall gilt offensichtlich

$$\langle 0 | \phi | 0 \rangle = 0, \quad (\text{II.3.28})$$

d.h. der Vakuumerwartungswert des Feldoperators verschwindet. Dies folgt sofort aus $\langle 0 | b_k | 0 \rangle = \langle 0 | b_k^\dagger | 0 \rangle = 0$. Es gibt jedoch Nullpunktsschwankungen, denn:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \phi^2 | 0 \rangle &= \frac{1}{V} \sum_{k, k'} \frac{1}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \langle 0 | \left[b_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + b_k^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right] \left[b_{k'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} + b_{k'}^\dagger e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \right] | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{\omega_k} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k}{2\sqrt{k^2 + m^2}}, \end{aligned} \quad (\text{II.3.29})$$

wobei das Integral divergiert! Wir sehen also, daß das Vakuum Struktur hat, denn es gibt Nullpunktsschwankungen. Außerdem treten Divergenzen auf, die typisch für (relativistische) Quantenfeldtheorien sind. Solche divergenten Ausdrücke haben die Physik z.B. bei der Quantenelektrodynamik lange beschäftigt (Stichwort “Renormierungsprobleme”).

Wir wollen an dieser Stelle noch diskutieren, warum im Gegensatz zum gewöhnlichen quantenmechanischen Oszillator bei uns keine Nullpunktenergie $\frac{1}{2}\omega$ bzw. $\sum_k \frac{1}{2}\omega_k$ aufgetreten ist. Der Grund liegt darin, daß wir beim Übergang von den klassischen Größen zu den Operatoren b_k, b_k^\dagger diese in *Normalordnung* gebracht haben, d.h. die Erzeuger stehen links von den Vernichtern. Wir definieren daher den *Normalordnungsoperator* $::$ durch

$$: b_k b_{k'}^\dagger : = b_{k'}^\dagger b_k, \quad : b_{k'}^\dagger b_k : = b_{k'}^\dagger b_k \quad \text{etc.} \quad (\text{II.3.30})$$

Man sieht, daß bei der Anwendung normalgeordneter Operatoren auf das Vakuum viele Beiträge verschwinden.

Explizit hatten wir die klassische Hamiltonfunktion $H = \sum_k \omega_k b_k^* b_k$ (vgl. (II.3.16)) abgeleitet und dann die Ersetzung durch Operatoren vorgenommen. Diese waren also schon in Normalordnung. Wären wir stattdessen von der äquivalenten Darstellung

$$H = \sum_k \frac{\omega_k}{2} (b_k^* b_k + b_k b_k^*) \quad (\text{II.3.31})$$

¹⁶Wir benutzen hier die quantenmechanische Notation, um einen Sachverhalt der klassischen Physik darzustellen!

ausgegangen und hätten hier die b_k durch Operatoren ersetzt, so hätten wir als Hamiltonoperator

$$H = \sum_k \frac{\omega_k}{2} (b_k^+ b_k + b_k b_k^+) = \sum_k \omega_k \left(b_k^+ b_k + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.3.32})$$

erhalten, also einschließlich der Nullpunktsenergie $\sum_k \frac{\omega_k}{2}$. Dieses Beispiel zeigt explizit, wie sich durch Normalordnung gewisse Divergenzen vermeiden lassen.

Wir wollen nun den Impuls \vec{P} des quantisierten Feldes bestimmen. Dazu müssen wir sein Verhalten unter Translationen

$$T(\vec{a})\phi(\vec{r})T^{-1}(\vec{a}) = \phi(\vec{r} + \vec{a}) \quad \text{mit} \quad T(\vec{a}) = e^{-i\vec{P}\cdot\vec{a}} \quad (\text{II.3.33})$$

genauer untersuchen. Ist \vec{a} infinitesimal, so können wir $T(\vec{a}) = 1 - i\vec{P}\cdot\vec{a}$ schreiben. Entwickeln wir auch $\phi(\vec{r} + \vec{a})$ nach Taylor bis 1. Ordnung, so folgt

$$(1 - i\vec{P}\cdot\vec{a})\phi(\vec{r})(1 + i\vec{P}\cdot\vec{a}) = \phi(\vec{r}) + \vec{\nabla}\phi(\vec{r})\cdot\vec{a} + O(a^2) \quad (\text{II.3.34})$$

und hieraus

$$-i[\vec{P}, \phi(\vec{r})] = \vec{\nabla}\phi(\vec{r}). \quad (\text{II.3.35})$$

Setzen wir das quantisierte Feld ein, so erhalten wir

$$-[\vec{P}, b_{\vec{k}}] = \vec{k}b_{\vec{k}}. \quad (\text{II.3.36})$$

Dies legt die Form des Impulsoperators bis auf eine additive Konstante fest:

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k}} \vec{k}b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}. \quad (\text{II.3.37})$$

Die unbestimmte additive Konstante wurde hier zu Null gewählt, damit $\vec{P}|0\rangle = 0$ gilt. Die Eigenzustände und -werte des Impulsoperators sind offensichtlich durch

$$\vec{P}|\dots, n_{\vec{k}}, \dots\rangle = \sum_{\vec{k}} \vec{k}|\dots, n_{\vec{k}}, \dots\rangle \quad (\text{II.3.38})$$

gegeben. Jedem durch $b_{\vec{k}}^+$ erzeugten Quant läßt sich also der Impuls \vec{k} zuordnen. Da die Energie des Quants durch $\omega_k = \sqrt{k^2 + m^2}$ gegeben ist, kann man m als seine Ruhemasse interpretieren (vgl. (I.2.40)).

Bisher ist überhaupt nicht klar, warum wir bei der Quantisierung für die Operatoren b_k bosonische Vertauschungsrelationen gefordert haben. A priori könnten die Quanten auch Fermionen sein. Im folgenden wollen wir zeigen, daß dem nicht so ist. Dies ist natürlich eine Folge des Spin-Statistik-Theorems: Da die Klein-Gordon-Gleichung Spin-0-Teilchen beschreibt, müssen diese Bosonen sein. Im folgenden wollen wir dies plausibel machen. Dazu berechnen wir zunächst den

Kommutator zweier Feldoperatoren. Dies wird uns wichtige Einblicke in die zugrundeliegende Physik erlauben. Explizit betrachten wir daher

$$\begin{aligned}
[\phi(\vec{r}, t), \phi(\vec{r}', t')] &= \frac{1}{V} \sum_{k, k'} \frac{1}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} [b_k e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)} + b_k^+ e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega_k t)}, b_{k'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r}' - \omega_{k'} t')} + \\
&\quad b_{k'}^+ e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r}' - \omega_{k'} t')}] \\
&= \frac{1}{V} \sum_{k'} \frac{1}{2\omega_k} \left(e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') - i\omega_k(t-t')} - c.c. \right) \\
&= \frac{2i}{(2\pi)^3} \operatorname{Im} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{2\omega_k} \int d\Omega e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') - i\omega_k(t-t')} \\
&= -\frac{i}{2\pi^2 R} \int_0^\infty \frac{k dk}{\sqrt{k^2 + m^2}} \sin \sqrt{k^2 + m^2} T \cdot \sin kR \\
&= -\frac{1}{8\pi^2 R} \int_{-\infty}^\infty k \frac{\sin \sqrt{k^2 + m^2} T}{\sqrt{k^2 + m^2}} (e^{ikR} - e^{-ikR}) dk. \tag{II.3.39}
\end{aligned}$$

Beim Übergang zur zweiten Zeilen haben wir die Kommutatoren ausgewertet. “c.c.” steht dabei für das komplex-konjugierte des ersten Ausdrucks in der Klammer. Im nächsten Schritt haben wir $z - z^* = 2i \operatorname{Im} z$ benutzt, um den Ausdruck in Klammern durch seinen Imaginärteil auszudrücken. Außerdem wurde die Summation in ein Integral umgewandelt haben, wobei dieses direkt in Kugelkoordinaten angegeben wurde. Im vierten Schritt wurde das Integral über den Raumwinkel berechnet:

$$\int d\Omega e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') - i\omega_k(t-t')} = 2\pi \int_0^\pi \sin \vartheta e^{ikR \cos \vartheta} d\vartheta = \frac{4\pi}{kR} \sin kR. \tag{II.3.40}$$

Im letzten Schritt schließlich haben wir den Sinus durch die komplexe Exponentialfunktion ersetzt.

Wir werden nun die Integrale in (II.3.39) mit Hilfe der Funktionentheorie auswerten. Dazu wollen wir den Integrationsweg schliessen. Zunächst sehen wir, daß sich $\sin \sqrt{k^2 + m^2} T$ für $|\vec{k}| \rightarrow \infty$ verhält wie e^{ikT} . Daraus folgt, daß für $R > |T|$ e^{ikR} in der oberen komplexen Halbebene stärker gegen Null geht, als $\sin \sqrt{k^2 + m^2} T$ divergieren kann. Entsprechendes gilt für e^{-ikR} in der unteren komplexen Halbebene. Wir können daher das erste Integral in (II.3.39), d.h. das Integral mit dem Faktor e^{ikR} , durch einen Halbkreisbogen in der oberen Halbebene schliessen, das zweite mit dem Faktor e^{-ikR} in der unteren Halbebene (siehe Abb. II.3.1). Geht der Radius dieser Bögen gegen Unendlich, so verschwindet der entsprechende Beitrag des Integrals und es bleibt nur der Beitrag von der Integration längs der reellen Achse übrig. Wir können nun z.B. den Residuensatz benutzen, um das Integral längs des geschlossenen Weges auszurechnen. Da die Integranden in (II.3.1) analytische Funktionen sind, verschwindet dieses Integral und damit auch das Integral längs der reellen Achse. Für den Fall $R \leq |T|$ funktioniert die obige Argumentation nicht und wir können so keine Aussage über den Wert des Integrals machen. Insgesamt erhalten wir daher

$$[\phi(\vec{r}, t), \phi(\vec{r}', t')] = \begin{cases} = 0 & \text{für } |\vec{r} - \vec{r}'| > |t - t'| \\ \neq 0 & \text{für } |\vec{r} - \vec{r}'| \leq |t - t'|. \end{cases} \tag{II.3.41}$$

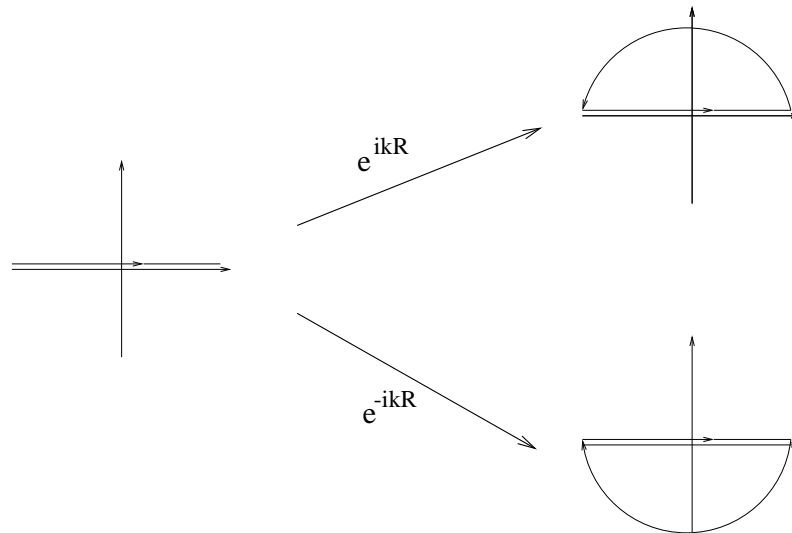


Abbildung II.3.1: Integrationskonturen zur Auswertung von (II.3.39).

Dieses Ergebnis kann nun folgendermaßen interpretiert werden. $\phi(\vec{r}, t)$ ist als Feldamplitude eine physikalische Größe. Wenn der Kommutator in (II.3.41) verschwindet, sind die beiden Größen kompatibel miteinander: Wenn $\phi(\vec{r}, t)$ exakt meßbar ist, so auch $\phi(\vec{r}', t')$. Dies gilt genau dann, wenn $|\vec{r} - \vec{r}'| > |t - t'|$, also für Abstände $|\vec{r} - \vec{r}'|$, die in der Zeit $|t - t'|$ nicht durch ein Signal miteinander verknüpft werden können. Die Tatsache, daß der Kommutator für raumartige Abstände der Ereignisse (\vec{r}, t) und (\vec{r}', t') verschwindet, hängt also eng mit der *Kausalität* zusammen.

Hier können wir nun klären, warum wir bei der Quantisierung bosonische Erzeuger und Vernichter eingeführt haben. Verwendet man nämlich Fermionen, d.h. $\{b_k, b_{k'}^+\} = 1$ etc., anstelle von $[b_k, b_{k'}^+] = 1$, so wäre $[\phi(\vec{r}, t), \phi(\vec{r}', t')] \neq 0$ für alle (\vec{r}, t) und (\vec{r}', t') und die Kausalität wäre nicht gewährleistet.

Wir sehen also, daß Fermi-Statistik im Falle der Klein-Gordon-Gleichung unverträglich mit der Kausalitätsforderung ist. Diese ist ein wesentlicher Baustein für das Spin-Statistik-Theorem. Generell kann man sagen, daß für Klein-Gordon-artige Gleichungen für Teilchen mit Spin $0, 1, 2, \dots$ auf Grund der Kausalität die Bosestatistik erzwungen wird. Teilchen mit halbzahligen Spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ genügen einer Dirac-Gleichung. Hier wird die Fermistatistik dieser Teilchen durch die Stabilitätsforderung (Stichwort: Dirac-See) erzwungen.

II.3.1 Das geladene Skalarfeld

Wir betrachten nun den Fall eines komplexen Klein-Gordon-Feldes ϕ . Aus Kapitel I.3.3 wissen wir, daß durch komplexe Felder geladene Spin-0-Teilchen beschrieben werden. Im Gegensatz zu den neutralen Teilchen sind diese von ihren Antiteilchen verschieden. Zu letzteren gehört der ladungskonjugierte Zustand (I.3.64).

Wir zerlegen zunächst das komplexe Feld in zwei reelle Felder ϕ_1 und ϕ_2 :

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2). \quad (\text{II.3.42})$$

Da diese auch der Klein-Gordon-Gleichung genügen, können wir unsere Ergebnisse für den reellen Fall direkt übertragen:

$$\phi_j(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \left[b_k^{(j)} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + b_k^{(j)+} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right] \quad (\text{II.3.43})$$

wobei die Operatoren¹⁷ den bosonischen Vertauschungsrelationen

$$\left[b_{\vec{k}}^{(j)}, b_{\vec{k}'}^{(l)+} \right] = \delta_{jl} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \quad (\text{II.3.44})$$

genügen. Alle anderen Kommutatoren verschwinden. Es ist zweckmäßig, neue Operatoren einzuführen:

$$\begin{aligned} \alpha_k &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(b_k^{(1)} + i b_k^{(2)} \right), & \alpha_k^+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(b_k^{(1)+} - i b_k^{(2)+} \right), \\ \beta_k &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(b_k^{(1)} - i b_k^{(2)} \right), & \beta_k^+ &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(b_k^{(1)+} + i b_k^{(2)+} \right). \end{aligned} \quad (\text{II.3.45})$$

Diese genügen dann den Vertauschungsrelationen

$$[\alpha_k, \alpha_{k'}^+] = [\beta_k, \beta_{k'}^+] = \delta_{k, k'}, \quad (\text{II.3.46})$$

wobei wieder alle anderen Kommutatoren verschwinden.

Mit diesen Operatoren definieren wir nun das Vakuum $|0\rangle$ durch die Bedingungen

$$\alpha_k |0\rangle = \beta_k |0\rangle = 0. \quad (\text{II.3.47})$$

Mit Hilfe der entsprechenden Erzeuger können wir dann wie üblich unseren Hilbertraum aufbauen.

Energie und Impuls lassen sich nun durch die neuen Operatoren ausdrücken:

$$H = \sum_{\vec{k}} \omega_k \left(\alpha_{\vec{k}}^+ \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^+ \beta_{\vec{k}} \right), \quad \vec{P} = \sum_{\vec{k}} \vec{k} \left(\alpha_{\vec{k}}^+ \alpha_{\vec{k}} + \beta_{\vec{k}}^+ \beta_{\vec{k}} \right). \quad (\text{II.3.48})$$

Durch Quantisierung der Ladungsdichte ρ (vgl. (I.3.23)) gelangen wir zu dem Operator

$$Q = e \sum_{\vec{k}} \left(\alpha_{\vec{k}}^+ \alpha_{\vec{k}} - \beta_{\vec{k}}^+ \beta_{\vec{k}} \right) = e(N_\alpha - N_\beta). \quad (\text{II.3.49})$$

¹⁷Die noch zeitabhängig sind!

Man prüft leicht nach, daß es sich hierbei um eine Erhaltungsgröße handelt, da $[H, Q] = 0$ ist. Es drängt sich die Interpretation als Gesamtladung auf, wobei die α -Teilchen die Ladung $+e$ tragen und die β -Teilchen die Ladung $-e$. Genauer hat man wegen

$$[\vec{P}, \alpha_{\vec{k}}^+] = \vec{k} \alpha_{\vec{k}}^+, \quad [Q, \alpha_{\vec{k}}^+] = \alpha_{\vec{k}}^+, \quad [\vec{P}, Q] = 0, \quad (\text{II.3.50})$$

daß $\alpha_{\vec{k}}^+$ den Impuls um \vec{k} und die Ladung um $+e$ erhöht. Entsprechende Relationen gelten für $\beta_{\vec{k}}^+$, das ebenfalls den Impuls erhöht, aber die Ladung vermindert.

All diese Eigenschaften sind konsistent mit der Interpretation von $\alpha_{\vec{k}}^+$ als Teilchenerzeuger und $\beta_{\vec{k}}^+$ als Antiteilchenerzeuger. Diese Festlegung ist willkürlich, denn die Theorie ist — bis auf das Vorzeichen bei der Ladung Q — symmetrisch in α - und β -Teilchen. Außerdem sehen wir, daß natürlicherweise im Rahmen einer quantenfeldtheoretischen Beschreibung die Einteilcheninterpretation der Feldamplitude ϕ aufgegeben werden muß. Diese enthält sowohl Teilchen- als auch Antiteilchenfelder.

II.4 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Das elektromagnetische Feld bei Anwesenheit geladener Teilchen wird bekanntlich durch die *Maxwell-Gleichungen*

$$\text{div } \vec{E} = 4\pi\rho, \quad \text{div } \vec{B} = 0, \quad (\text{II.4.1})$$

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \text{rot } \vec{B} = 4\pi\vec{j} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (\text{II.4.2})$$

beschrieben, wobei wir wieder $c = 1$ gesetzt haben.

Ladungs- und Stromdichte bilden einen Vierervektor j^μ , der der Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j^\mu = \dot{\rho} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad \text{mit } j^\mu = (\rho, \vec{j}) \quad (\text{II.4.3})$$

genügt, was bekanntlich direkt aus den Maxwell-Gleichungen folgt. Umgekehrt wird die Wirkung der Felder auf Teilchen der Ruhemasse m_0 , Geschwindigkeit \vec{v} und Ladung e durch die *Lorentz-Kraft*

$$\frac{d}{dt}(m\vec{v}) = e \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \quad \text{mit } m = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2}} \quad (\text{II.4.4})$$

beschrieben.

Bevor wir nun das elektromagnetische Feld quantisieren, wollen wir zunächst die relevanten dynamischen Freiheitsgrade sichtbar machen. Dazu sind einige Vorüberlegungen nötig.

Die Felder \vec{E} und \vec{B} lassen sich als Komponenten eines antisymmetrischen Vierertensors 2. Stufe auffassen:

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} = -F^{\nu\mu}, \quad (\text{II.4.5})$$

d.h. $F^{0j} = -E_j$ und $F^{ij} = -\epsilon^{ijk}B_k$ mit $i, j, k = 1, 2, 3$ und dem total-antisymmetrischen Tensor¹⁸ ϵ^{ijk} .

Wir führen das Viererpotential $A^\mu = (\varphi, \vec{A})$ ein, mit

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A} \quad (\text{II.4.6})$$

bzw.

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (\text{II.4.7})$$

Durch die Einführung der Potentiale sind die beiden homogenen Maxwell-Gleichungen automatisch erfüllt und es verbleiben nur noch die inhomogenen Gleichungen mit den Quelltermen. Diese lassen sich nun schreiben als

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi j^\nu, \quad (\text{II.4.8})$$

woraus im Übrigen die Lorentz-Invarianz sofort ersichtlich ist. Ausgedrückt durch das Vektorpotential lautet die Gleichung

$$4\pi j^\nu = \partial_\mu F^{\mu\nu} = \partial_\mu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu \partial^\nu A^\mu = \square A^\nu - \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu). \quad (\text{II.4.9})$$

Das Vektorpotential ist nicht eindeutig festgelegt, es besteht immer noch die Möglichkeit von *Eichtransformationen*

$$A^\mu \longrightarrow A'^\mu = A^\mu + \partial^\mu \chi \quad (\text{II.4.10})$$

mit $\chi = \chi(\vec{r}, t)$ beliebig. Da χ nicht konstant ist, sondern vom Ort abhängen kann, handelt es sich um eine *lokale Eichtransformation*. Wir können uns explizit davon überzeugen, daß das neue Viererpotential nach einer solchen lokalen Eichtransformation die Maxwell-Gleichungen (II.4.9) erfüllt:

$$\begin{aligned} \square A'^\nu - \partial^\nu (\partial_\mu A'^\mu) &= \square A^\nu + \square \partial^\nu \chi - \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu + \partial_\mu \partial^\mu \chi) \\ &= \square A^\nu - \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu) + \partial^\nu \square \chi - \partial^\nu \square \chi = 4\pi j^\nu. \end{aligned} \quad (\text{II.4.11})$$

Die Freiheit zu Eichtransformation erlaubt es, die Potentiale möglichst geschickt zu wählen. Zwei Eichungen sind besonders wichtig.

Die erste Möglichkeit ist die sogenannte *Lorentz-Eichung*

$$\partial_\nu A^\nu = 0. \quad (\text{II.4.12})$$

Diese Bedingung ist offensichtlich lorentzinvariant. Die inhomogenen Maxwell-Gleichungen (II.4.9) vereinfachen sich in dieser Eichung zu

$$\square A^\nu = 4\pi j^\nu. \quad (\text{II.4.13})$$

Allerdings ist mit der Lorentz-Eichung das Potential A^μ immer noch nicht eindeutig festgelegt, denn wir können noch weitere spezielle Eichtransformationen

$$A^\mu \longrightarrow A^\mu + \partial^\mu \chi \quad \text{mit} \quad \partial_\mu \partial^\mu \chi = 0 \quad (\text{II.4.14})$$

¹⁸d.h. $\epsilon^{ijk} = 1$ falls (i, j, k) eine gerade Permutation von $(1, 2, 3)$, $\epsilon^{ijk} = -1$ falls (i, j, k) eine ungerade Permutation von $(1, 2, 3)$ und $\epsilon^{ijk} = 0$ sonst.

durchführen. Diese Wahl der Eichung macht es daher schwer, die wesentlichen dynamischen Freiheitsgrade zu identifizieren.

Eine zweite Möglichkeit ist die *Strahlungseichung*

$$\operatorname{div} \vec{A} = 0, \quad (\text{II.4.15})$$

die manchmal auch als *Coulomb-Eichung* bezeichnet wird. Diese Eichung legt die Potentiale (bis auf triviale Konstanten) eindeutig fest, ist aber offensichtlich nicht lorentzinvariant. Betrachten wir eine Lorentz-Transformation $A^\mu \rightarrow A'^\mu$, so ist i.a. $\vec{\nabla}' \cdot \vec{A}' \neq 0$, d.h. das transformierte Potential genügt nicht der Strahlungseichung. Dieses Problem ist allerdings für unsere folgenden Betrachtungen nicht schwerwiegend, denn wir können nach der Lorentz-Transformation wieder umeichen,

$$A'^\mu(x') \rightarrow A'^\mu(x') + \partial'^\mu \chi(x') \quad \text{mit} \quad \vec{\nabla}' \cdot \vec{A}'(x') - (\vec{\nabla}')^2 \chi(x') = 0, \quad (\text{II.4.16})$$

so daß die Strahlungseichung wieder gilt. Dies bedeutet, daß zwei Beobachter in verschiedenen Lorentz-Systemen beide die Physik des elektromagnetischen Feldes in der Strahlungseichung beschreiben können.

Im folgenden werden wir uns auf ein Lorentz-System beschränken und dort die Strahlungseichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ voraussetzen. Explizit gilt dann

$$\square \vec{A} - \vec{\nabla} \dot{\varphi} = 4\pi \vec{j}, \quad -\Delta \varphi = 4\pi \rho. \quad (\text{II.4.17})$$

Wir nehmen nun an, daß die Felder quadratintegabel sind. Bei vorgegebenen Ladungen können wir die Poisson-Gleichung lösen und erhalten das aus der Elektrodynamik bekannte Resultat

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int \frac{\rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r', \quad (\text{II.4.18})$$

wobei $\varphi(\vec{r}, t) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$. Das Skalarpotential ist also durch die vorgegebene Ladungsverteilung vollständig festgelegt und somit keine unabhängige dynamische Variable.

Wir wollen nun an ein wichtiges Resultat aus der Theorie der Vektorfelder erinnern¹⁹, das wir im folgenden gewinnbringend anwenden wollen.

Satz: (Zerlegung von Vektorfeldern)

Jedes quadratintegable Vektorfeld $\vec{K}(\vec{r})$ zerfällt eindeutig in einen longitudinalen und einen transversalen Anteil, d.h.

$$\vec{K} = \vec{K}_\parallel + \vec{K}_\perp \quad \text{mit} \quad \operatorname{rot} \vec{K}_\parallel = 0 \quad \text{und} \quad \operatorname{div} \vec{K}_\perp = 0. \quad (\text{II.4.19})$$

\vec{K}_\parallel heißt *longitudinaler Anteil*, \vec{K}_\perp *transversaler Anteil* von \vec{K} .

Speziell in unserem Fall haben wir wegen $\operatorname{div} \vec{A} = 0$ und $\operatorname{div} \vec{B} = 0$

$$\vec{A} = \vec{A}_\perp \quad \text{und} \quad \vec{B} = \vec{B}_\perp \quad (\text{II.4.20})$$

¹⁹Siehe z.B. das Buch *Mathematischer Einführungskurs für die Physik* von S. Großmann.

und

$$\vec{E} = \vec{E}_{\parallel} + \vec{E}_{\perp} \quad \text{mit} \quad \vec{E}_{\parallel} = -\vec{\nabla}\varphi, \quad \vec{E}_{\perp} = -\dot{\vec{A}}. \quad (\text{II.4.21})$$

Somit verbleibt

$$\square \vec{A} = 4\pi \vec{j}_{\perp} \quad \text{mit} \quad \text{div} \vec{A} = 0 \quad (\text{II.4.22})$$

als einzige dynamische Gleichung. In Strahlungseichung werden der longitudinale Anteil des Vektorpotentials und des Skalarpotentials vollständig aus der Beschreibung eliminiert!

Wir spalten nun das Vektorpotential in zwei Anteile auf

$$\vec{A} = \vec{A}_{\text{frei}} + \vec{A}_{\text{ext}} \quad \text{mit} \quad \vec{A}_{\text{ext}} = \int \frac{d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \vec{j}_{\perp}(\vec{r}', t - |\vec{r} - \vec{r}'|). \quad (\text{II.4.23})$$

Dabei ist \vec{A}_{ext} eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung (II.4.22). Es ist das durch die Ströme induzierte — und in diesem Sinne gestlegte — Vektorpotential. Von dynamischen Interesse ist daher nur der Anteil

$$\vec{A} = \vec{A}_{\text{frei}} \quad \text{mit} \quad \square \vec{A} = 0, \quad \text{div} \vec{A} = 0. \quad (\text{II.4.24})$$

Dies ist das *freie transversale elektromagnetische Feld*. Alle von Ladungen und Strömen induzierten Anteile sind eliminiert. Nur dieses freie transversale elektromagnetische Feld stellt eine *dynamische Variable* dar, die wir quantisieren können²⁰.

II.4.1 Energie, Impuls, Drehimpuls von Teilchen und elektromagnetischen Feld

Wir haben schon hervorgehoben, daß die Maxwellgleichungen zusammen mit der Lorentzkraft die Wechselwirkung eines elektromagnetischen Feldes mit Ladungen beschreiben. Wir wollen im folgenden Energie, Impuls und Drehimpuls in Teilchen- und Strahlungsanteile zerlegen.

Wir betrachten nun speziell eine Ansammlung von Punktladungen. Diese werden beschrieben durch die Ladungsdichte

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_n e_n \delta(\vec{r} - \vec{R}_n), \quad (\text{II.4.25})$$

wobei e_n die Ladung des n -ten Teilchens ist und \vec{R}_n seine Ortskoordinate.

Die Gesamtenergie ist gegeben durch

$$H = H_{\text{Teilchen}}(\{\vec{\pi}_n\}) + H_{\text{EM}}, \quad (\text{II.4.26})$$

mit dem Teilchenanteil

$$H_{\text{Teilchen}}(\{\vec{\pi}_n\}) = \begin{cases} \sum_n \frac{\pi_n^2}{2m_n} & \text{nicht-relativistisch} \\ \sum_n \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi}_n & \text{relativistisch,} \end{cases} \quad (\text{II.4.27})$$

²⁰Die anderen Anteile folgen z.B. aus einer quantenfeldtheoretischen Beschreibung der geladenen Teilchen.

wobei $\vec{\pi}_n$ der kinetische Impuls des n -ten Teilchens ist. Der elektromagnetische Anteil ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
H_{\text{EM}} &= \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E^2 + B^2) = \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + E_{\parallel}^2 + 2\vec{E}_{\perp} \cdot \vec{E}_{\parallel} + B^2) \\
&= \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + B^2) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r (\vec{\nabla}\varphi) \cdot \vec{E}_{\perp} + \frac{1}{8\pi} \int d^3r (\vec{\nabla}\varphi)(\vec{\nabla}\varphi) \\
&= \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + B^2) + \frac{1}{4\pi} \int d^3r \varphi (\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_{\perp}) - \frac{1}{8\pi} \int d^3r \varphi \Delta\varphi \\
&= \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + B^2) + \frac{1}{2} \int d^3r \varphi \rho \\
&= \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + B^2) + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}, t)\rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\
&= \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + B^2) + \frac{1}{2} \sum_{n,m} \frac{e_n e_m}{|\vec{R}_n - \vec{R}_m|}. \tag{II.4.28}
\end{aligned}$$

Dabei haben wir zunächst das elektrische Feld in seinen longitudinalen und transversalen Anteil aufgespalten. Dann haben wir $\vec{E}_{\parallel} = -\vec{\nabla}\varphi$ ausgenutzt und beim Übergang zur dritten Zeile in den letzten beiden Integralen partiell integriert. Im nächsten Schritt wurde $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_{\perp} = 0$ und $\Delta\varphi = -4\pi\rho$ verwendet. Schließlich wurden noch (II.4.18) und (II.4.25) berücksichtigt.

Der letzte Anteil in (II.4.28) entspricht offensichtlich der Coulombenergie unseres Teilchensystems:

$$H_{\text{Coul}} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \frac{e_n e_m}{|\vec{R}_n - \vec{R}_m|}. \tag{II.4.29}$$

Wir können deshalb auch eine andere Aufteilung der Gesamtenergie vornehmen:

$$H = H_T + H_{\text{Str}} \tag{II.4.30}$$

mit

$$H_T = H_{\text{Teilchen}}(\{\vec{\pi}_n\}) + H_{\text{Coul}} \quad \text{und} \quad H_{\text{Str}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + B^2). \tag{II.4.31}$$

H_T ist der Teilchenanteil, der entweder direkt aus der kinetischen Energie der Teilchen oder ihrer Coulombenergie stammt. H_{Str} hat nichts mit der Anwesenheit geladener Teilchen zu tun und stellt daher den Strahlungsanteil der Energie dar.

Wir wollen nun eine analoge Zerlegung des Impulses in einen Teilchen- und einen Strahlungsanteil vornehmen. Der Gesamtimpuls ist gegeben durch

$$\vec{P}_{\text{tot}} = \sum_n \vec{\pi}_n + \frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{E} \times \vec{B}. \tag{II.4.32}$$

Wir zerlegen wieder \vec{E} in \vec{E}_{\parallel} und \vec{E}_{\perp} . Für den Beitrag des longitudinalen Anteils gilt

$$\begin{aligned}
\frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{E}_{\parallel} \times \vec{B} &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{\nabla} \varphi \times \vec{B} \\
&= \frac{1}{4\pi} \int d^3r \varphi (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r \varphi \Delta \vec{A} \\
&= -\frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{A} \Delta \varphi = \frac{1}{4\pi} \int d^3r \rho(\vec{r}, t) \vec{A}(\vec{r}, t) \\
&= \sum_n e_n \vec{A}(\vec{R}_n, t). \tag{II.4.33}
\end{aligned}$$

Die Rechnung verläuft analog zu der für die Energie. Der Beitrag des longitudinalen Anteils läßt sich daher auch auf die Anwesenheit geladener Teilchen zurückführen. Führen wir nun den kanonischen Teilchenimpuls

$$\vec{p}_n = \vec{\pi}_n + e_n \vec{A}(\vec{R}_n, t) \tag{II.4.34}$$

ein, so erhalten wir für den Gesamtimpuls

$$\vec{P}_{\text{tot}} = \sum_n \vec{p}_n + P_{\text{Str}} \tag{II.4.35}$$

mit dem Strahlungsanteil

$$\vec{P}_{\text{Str}} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{E}_{\perp} \times \vec{B}. \tag{II.4.36}$$

Wir führen den kanonischen Teilchenimpuls auch in der Hamiltonfunktion ein und erhalten $H_{\text{Teilchen}}(\{\vec{p}_n - e_n \vec{A}(\vec{R}_n)\})$.

Für den Gesamtdrehimpuls können wir wieder eine analoge Betrachtung durchführen. Wir erhalten schließlich

$$\vec{J}_{\text{tot}} = \sum_n (\vec{L}_n + \vec{S}_n) + \vec{J}_{\text{Str}} \tag{II.4.37}$$

mit $\vec{L}_n = \vec{R}_n \times \vec{p}_n$, dem Spin \vec{S}_n der geladenen Teilchen und dem Strahlungsbeitrag

$$\vec{J}_{\text{Str}} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{r} \times (\vec{E}_{\perp} \times \vec{B}). \tag{II.4.38}$$

Wir stellen uns nun vor, daß die Wechselwirkungen ausgeschaltet wird, indem wir formal $e_n = 0$ setzen. Dann sind Teilchenanteil und Strahlungsanteil entkoppelt und wir gelangen so zum freien Strahlungsfeld mit

$$H_{\text{Str}} = \frac{1}{8\pi} \int d^3r (E_{\perp}^2 + B^2), \tag{II.4.39}$$

$$\vec{P}_{\text{Str}} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r (\vec{E}_{\perp} \times \vec{B}), \tag{II.4.40}$$

$$\vec{J}_{\text{Str}} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{r} \times (\vec{E}_{\perp} \times \vec{B}) \tag{II.4.41}$$

und

$$\boxed{\begin{aligned} \square \vec{A} &= 0, & \vec{\nabla} \cdot \vec{A} &= 0, & \text{(II.4.42)} \\ \vec{E}_\perp &= -\dot{\vec{A}}, & \vec{B} &= \text{rot } \vec{A}. & \text{(II.4.43)} \end{aligned}}$$

Wir haben nun alle Vorbereitungen getroffen haben, und (1) die relevanten dynamischen Freiheitsgrade des elektromagnetischen Feldes bestimmt und (2) Größen wie Energie, Impuls und Drehimpuls in Teilchen- und Strahlungsanteile zerlegt haben, können wir nun die Theorie quantisieren. Wie schon erwähnt, müssen wir nur den Strahlungsanteil quantisieren. Eine Quantisierung des Teilchenanteils folgt z.B. aus einer quantenfeldtheoretischen Beschreibung der geladenen Teilchen.

II.4.2 Quantisierung des Strahlungsfeldes

Ausgangspunkt sind die dynamischen Gleichungen (II.4.42). Wenn wir diese mit der des Skalarfeldes aus Kapitel II.3 vergleichen, also der Klein-Gordon-Gleichung (II.3.2), so sehen wir zunächst, daß wir dort nur mit einer dynamischen Variablen ϕ zu tun hatten. Hier treten nun zwei dynamische Variablen auf, denn wegen $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ist $\vec{A} = \vec{A}_{\text{transv}}$ und es sind nur zwei Komponenten des Vektorpotentials frei verfügbar. Weiterhin fehlt im Vergleich zur Klein-Gordon-Gleichung der Massenterm m^2 , d.h. im Falle des elektromagnetischen Feldes ist die Masse $m = 0$. Dies war zu erwarten, denn wir werden später sehen, daß die Schwingungsquanten des elektromagnetischen Feldes Teilchen ohne Ruhemasse sind, die wir als *Photonen* interpretieren. Das weitere Vorgehen ähnelt stark der Behandlung des Skalarfeldes. Zunächst entwickeln wir die Feldamplitude \vec{A} nach ebenen Wellen:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{4\pi}{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{A}_{\vec{k}}(t). \quad \text{(II.4.44)}$$

Dabei haben wir schon eine spezielle Normierung $\sqrt{4\pi}$ eingeführt, die später begründet wird. Da \vec{A} reell ist, folgt $\vec{A}_{\vec{k}}^* = \vec{A}_{-\vec{k}}$.

Da wir in Strahlungseichung arbeiten, ist $\text{div } \vec{A} = 0$ und somit $\vec{k} \cdot \vec{A}_{\vec{k}} = 0$. Wir können daher schreiben

$$\vec{A}_{\vec{k}} = \sum_{\lambda=1,2} q_{\vec{k},\lambda}(t) \vec{e}_{\vec{k},\lambda} \quad \text{(II.4.45)}$$

mit $q_{\vec{k},\lambda}^* = q_{-\vec{k},\lambda}$ und den reellen Einheitsvektoren $\vec{e}_{\vec{k},1}, \vec{e}_{\vec{k},2}$ in der zu \vec{k} senkrechten Ebene, d.h.

$$\vec{k} \cdot \vec{e}_{\vec{k},\lambda} = 0. \quad \text{(II.4.46)}$$

Wir treffen außerdem die Konventionen

$$\vec{e}_{-\vec{k},\lambda} = \vec{e}_{\vec{k},\lambda} \quad \text{und} \quad \vec{e}_{\vec{k},1} \perp \vec{e}_{\vec{k},2} \quad \text{(II.4.47)}$$

und zwar so, daß $\vec{e}_{\vec{k},1}$, $\vec{e}_{\vec{k},2}$ und \vec{k} ein Rechtsdreiein bilden. λ bezeichnet man auch als *Polarisation*. Insgesamt haben wir dann

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{4\pi}{V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} q_{\vec{k}, \lambda}(t) \vec{e}_{\vec{k}, \lambda}. \quad (\text{II.4.48})$$

Aus der dynamischen Gleichung $\square \vec{A} = 0$ folgt dann

$$\ddot{q}_{\vec{k}, \lambda} + k^2 q_{\vec{k}, \lambda} = 0, \quad (\text{II.4.49})$$

also wieder die Gleichung eines harmonischen Oszillators mit der Frequenz

$$\omega_k = |\vec{k}| = k. \quad (\text{II.4.50})$$

Wir haben also zu jedem Wellenvektor \vec{k} und Polarisation λ einen harmonischen Oszillator, den wir gleich quantisieren werden. Zunächst definieren wir wieder

$$p_{-\vec{k}, \lambda} = \dot{q}_{\vec{k}, \lambda} \quad \text{und} \quad \dot{p}_{-\vec{k}, \lambda} = -\omega_k^2 q_{\vec{k}, \lambda}, \quad (\text{II.4.51})$$

womit wir für die Hamiltonfunktion

$$H_{\text{Str}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \lambda} \left(p_{\vec{k}, \lambda} p_{-\vec{k}, \lambda} + \omega_k^2 q_{\vec{k}, \lambda} q_{-\vec{k}, \lambda} \right) \quad (\text{II.4.52})$$

erhalten. Wir müssen nun zeigen, daß dies konsistent ist, d.h. daß wir durch Einsetzen von (II.4.48) in (II.4.39) ebenfalls den Ausdruck (II.4.52) erhalten. Dazu berechnen wir zunächst \vec{E}_\perp und \vec{B} :

$$\vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = -\dot{\vec{A}} = -\sqrt{\frac{4\pi}{V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{e}_{\vec{k}, \lambda} \dot{p}_{-\vec{k}, \lambda}, \quad (\text{II.4.53})$$

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} = \sqrt{\frac{4\pi}{V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} i(\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k}, \lambda}) q_{\vec{k}, \lambda}. \quad (\text{II.4.54})$$

Hiermit können wir nun (II.4.39) bestimmen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi} \int d^3r E_\perp^2 &= \frac{1}{2V} \int d^3r \sum_{k, \lambda, k', \lambda'} e^{i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{r}} \left(\vec{e}_{\vec{k}, \lambda} \cdot \vec{e}_{\vec{k}', \lambda'} \right) p_{-\vec{k}, \lambda} p_{-\vec{k}', \lambda'} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k, \lambda, k', \lambda'} \left(\vec{e}_{\vec{k}, \lambda} \cdot \vec{e}_{\vec{k}', \lambda'} \right) p_{-\vec{k}, \lambda} p_{-\vec{k}', \lambda'} \delta_{\vec{k} + \vec{k}', 0} = \frac{1}{2} \sum_{k, \lambda, \lambda'} \left(\vec{e}_{\vec{k}, \lambda} \cdot \vec{e}_{-\vec{k}, \lambda'} \right) p_{-\vec{k}, \lambda} p_{-\vec{k}, \lambda'} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k, \lambda} p_{-\vec{k}, \lambda} p_{-\vec{k}, \lambda} \end{aligned} \quad (\text{II.4.55})$$

wobei wir im zweiten Schritt $\frac{1}{V} \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{k},0}$ verwendet haben²¹, und analog

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi} \int d^3r B^2 &= \frac{1}{2} \sum_{k,\lambda,k',\lambda'} (\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k},\lambda}) \cdot (\vec{k}' \times \vec{e}_{\vec{k}',\lambda'}) q_{\vec{k},\lambda} q_{\vec{k}',\lambda'} \delta_{\vec{k}+\vec{k}',0} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,\lambda} k^2 q_{\vec{k},\lambda} q_{-\vec{k},\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{II.4.56})$$

Wir definieren nun die Normalkoordinaten

$$b_{\vec{k},\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2k}} (k q_{\vec{k},\lambda} + i p_{-\vec{k},\lambda}), \quad (\text{II.4.57})$$

$$b_{\vec{k},\lambda}^* = \frac{1}{\sqrt{2k}} (k q_{-\vec{k},\lambda} - i p_{\vec{k},\lambda}), \quad (\text{II.4.58})$$

woraus folgt

$$q_{\vec{k},\lambda} = \sqrt{\frac{1}{2k}} (b_{\vec{k},\lambda} + b_{\vec{k},\lambda}^*), \quad (\text{II.4.59})$$

$$p_{\vec{k},\lambda} = i \sqrt{\frac{k}{2}} (b_{\vec{k},\lambda}^* - b_{-\vec{k},\lambda}). \quad (\text{II.4.60})$$

In Normalkoordinaten nimmt die Hamiltonfunktion die einfache Form

$$H_{\text{Str}} = \sum_{\vec{k},\lambda} \omega_k b_{\vec{k},\lambda}^* b_{\vec{k},\lambda} \quad (\text{II.4.61})$$

an, wobei wir bereits die Normalordnung der Operatoren vorweggenommen haben. Wir können nun wie üblich quantisieren, wobei wegen

$$[q_{\vec{k},\lambda}, p_{\vec{k}',\lambda'}] = i \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\lambda,\lambda'} \quad (\text{II.4.62})$$

die einzigen nicht-verschwindenden Kommutatoren der Bose-Operatoren durch

$$[b_{\vec{k},\lambda}, b_{\vec{k}',\lambda'}^+] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\lambda,\lambda'} \quad (\text{II.4.63})$$

gegeben sind. Aus dem Hamiltonoperator wird dann

$$H_{\text{Str}} = \sum_{\vec{k},\lambda} \omega_k b_{\vec{k},\lambda}^+ b_{\vec{k},\lambda}. \quad (\text{II.4.64})$$

Dies legt folgende Deutung nahe: Das freie Strahlungsfeld entspricht einem System von zwei mal unendlich vielen Schwingungen, charakterisiert durch Wellenzahlen \vec{k} und Polarisierungen $\lambda = 1, 2$. Jede Schwingung kann durch $n_{k,\lambda}$ Quanten angeregt sein. Diese Quanten bezeichnen

²¹Außerdem zeigt sich in der Rechnung deutlich der Sinn der Konventionen (II.4.47).

wir als *Photonen* bzw. als *transversale Photonen*. Wie üblich können wir beliebige Zustände sukzessive durch

$$|\dots, n_{\vec{k},\lambda}, \dots\rangle = \prod_{\vec{k},\lambda} \frac{(b_{\vec{k},\lambda}^+)^{n_{\vec{k},\lambda}}}{\sqrt{n_{\vec{k},\lambda}!}} |0\rangle \quad (\text{II.4.65})$$

aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$ mit

$$b_{\vec{k},\lambda} |0\rangle = 0 \quad (\text{II.4.66})$$

aufbauen, d.h. auf Grund der Normalordnung auch $H_{\text{Str}}|0\rangle = 0$. Z.B. können wir einen Ein-Photonen-Zustand definieren durch

$$|1_k\rangle = b_{\vec{k},\lambda}^+ |0\rangle \quad (\text{II.4.67})$$

für den dann gilt

$$H_{\text{Str}}|1_k\rangle = \omega_k |1_k\rangle. \quad (\text{II.4.68})$$

Photonen haben also Teilcheneigenschaften. $b_{\vec{k},\lambda}^+$ erzeugt ein Photon mit den Quantenzahlen \vec{k} und λ . Der zugehörige Ein-Photonen-Zustand hat die Energie $\omega_{k\lambda} = \omega_k = |\vec{k}| = k$, den Impuls²² \vec{k} und die Polarisation λ .

Wir können nun die quantisierten Felder angeben:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi}{V}} \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{\sqrt{k}} \vec{e}_{\vec{k},\lambda} \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{\vec{k},\lambda} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{\vec{k},\lambda}^+ \right), \quad (\text{II.4.69})$$

$$\vec{E}_\perp(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi}{V}} \sum_{\vec{k},\lambda} i\sqrt{k} \vec{e}_{\vec{k},\lambda} \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{\vec{k},\lambda} - e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{\vec{k},\lambda}^+ \right), \quad (\text{II.4.70})$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi}{V}} \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{i}{\sqrt{k}} (\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k},\lambda}) \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{\vec{k},\lambda} - e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{\vec{k},\lambda}^+ \right), \quad (\text{II.4.71})$$

mit

$$b_{\vec{k},\lambda}(t) = b_{\vec{k},\lambda}(0) e^{-i\omega_k t}, \quad b_{\vec{k},\lambda}^+(t) = b_{\vec{k},\lambda}^+(0) e^{i\omega_k t}. \quad (\text{II.4.72})$$

Man beachte, daß die Felder i.a. nicht miteinander kommutieren, so daß es keine simultane Eigenbasis gibt.

Wir wollen nun noch die Begründung nachliefern, warum der Photonenimpuls durch \vec{k} gegeben ist. Dazu gehen wir vom klassischen Ausdruck (II.4.40) aus und ersetzen die auftretenden Felder

²²Das werden wir gleich noch explizit zeigen!

durch ihre Quantisierungen:

$$\begin{aligned}
 \vec{P}_{\text{Str}} &= \frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{E}_\perp \times \vec{B} \\
 &= \frac{1}{2V} \int d^3r \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \lambda, \lambda'} (-1) \sqrt{\frac{k'}{k}} \left(\vec{e}_{\vec{k}', \lambda'} \times (\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k}, \lambda}) \right) \left(e^{i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}, \lambda} b_{\vec{k}', \lambda'} + \right. \\
 &\quad \left. + e^{-i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}, \lambda}^+ b_{\vec{k}', \lambda'}^+ - e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}', \lambda'} b_{\vec{k}, \lambda}^+ - e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}', \lambda'}^+ b_{\vec{k}, \lambda} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \lambda, \lambda'} (-1) \left(\vec{e}_{\vec{k}, \lambda'} \times (\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k}, \lambda}) \right) \left(b_{\vec{k}, \lambda} b_{-\vec{k}, \lambda'} + b_{\vec{k}, \lambda}^+ b_{-\vec{k}, \lambda'}^+ - b_{\vec{k}, \lambda}^+ b_{\vec{k}, \lambda'} - 1 - b_{\vec{k}, \lambda'}^+ b_{\vec{k}, \lambda} \right) \\
 &= \sum_{\vec{k}, \lambda} \vec{k} \left(b_{\vec{k}, \lambda}^+ b_{\vec{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \left(1 - b_{\vec{k}, \lambda} b_{-\vec{k}, \lambda} - b_{\vec{k}, \lambda}^+ b_{-\vec{k}, \lambda}^+ \right) \right) \\
 &= \sum_{\vec{k}, \lambda} \vec{k} b_{\vec{k}, \lambda}^+ b_{\vec{k}, \lambda}. \tag{II.4.73}
 \end{aligned}$$

Dabei haben wir zunächst die Integration ausgeführt, was zu Beiträgen proportional zu $\delta_{\vec{k} + \vec{k}', 0}$ und $\delta_{\vec{k} - \vec{k}', 0}$ führt. Außerdem haben wir die Vertauschungsrelationen für die Erzeuger und Vernichter verwendet. Das doppelte Kreuzprodukt $\vec{e}_{\vec{k}, \lambda'} \times (\vec{k} \times \vec{e}_{\vec{k}, \lambda})$ ergibt mit Hilfe der bekannten Regeln der Vektoranalysis gerade $\vec{k} \delta_{\lambda, \lambda'}$. Der zweite Beitrag in den Klammern in der vorletzten Zeile verschwindet, denn

$$\sum_{\vec{k}} \vec{k} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \vec{k} + \frac{1}{2} \sum_{-\vec{k}} \vec{k} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \vec{k} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (-\vec{k}) = 0, \tag{II.4.74}$$

$$\sum_{\vec{k}} \vec{k} b_{\vec{k}, \lambda} b_{-\vec{k}, \lambda} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \vec{k} b_{\vec{k}, \lambda} b_{-\vec{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (-\vec{k}) b_{-\vec{k}, \lambda} b_{\vec{k}, \lambda} = 0, \tag{II.4.75}$$

und analog für den Beitrag mit den beiden Erzeugern. Das Ergebnis (II.4.73) zeigt noch einmal explizit, daß $b_{\vec{k}, \lambda}^+$ ein Quant mit dem Impuls \vec{k} erzeugt. Außerdem folgt (wie früher)

$$\vec{P}|0\rangle = 0, \tag{II.4.76}$$

da wir implizit die Normalordnung schon vorgenommen haben.

Die bisherigen Ergebnisse zeigen, daß die quantisierte elektromagnetische Theorie zu Photonen führt, die genau die erwarteten Eigenschaften haben, insbesondere die korrekte Energie-Impulsbeziehung $\omega_{\vec{k}} = k$. Wir wollen nun versuchen, den Spin des Photons zu bestimmen. Zunächst werden wir den Strahlungsdrehimpuls in einen Bahn- und einen inneren Anteil aufspalten, wobei wir letzteren nach der Quantisierung als Spin interpretieren wollen. Nach (II.4.41) ist der Strahlungsdrehimpuls klassisch durch

$$\vec{J}_{\text{Str}} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{r} \times \left(\vec{E}_\perp \times \vec{B} \right) \stackrel{!}{=} \vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Bahn})} + \vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Spin})} \tag{II.4.77}$$

gegeben, wobei wir die Aufteilung in Bahn- und inneren Anteil schon vorweggenommen haben. Um diese explizit zu bestimmen, ist die Identität

$$(\vec{E}_\perp \times \vec{B})_j = \left(\vec{E}_\perp \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \right)_j = \vec{E}_\perp \cdot \partial_j \vec{A} - \vec{\nabla} \cdot (\vec{E}_\perp A_j) \quad (\text{II.4.78})$$

nützlich, die auf Grund von $\text{div } \vec{E}_\perp = 0$ gilt. Wir können daher den Bahnanteil identifizieren

$$\vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Bahn})} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r \sum_j E_{\perp,j} (\vec{r} \times \vec{\nabla}) A_j. \quad (\text{II.4.79})$$

Dieser Anteil hängt wegen $\vec{r} \times \vec{\nabla}$ von der Wahl des Koordinatenursprungs ab und ist deshalb als Bahndrehimpuls zu interpretieren. Der Spinanteil ist dann gegeben durch

$$\vec{J}_{\text{Str},i}^{(\text{Spin})} = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r \epsilon_{ijk} x_j \partial_l (E_{\perp,l} A_k) \quad (\text{II.4.80})$$

bzw.

$$\vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Spin})} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r \vec{E}_\perp \times \vec{A}. \quad (\text{II.4.81})$$

Dieser Anteil des Drehimpulses hängt also nur von den Feldgrößen ab und kann daher als innerer Drehimpuls oder Spin interpretiert werden.

Wir werden nun diesen Spinanteil des Drehimpulses quantisieren. Die Rechnung verläuft analog zur Quantisierung von Energie und Drehimpuls.

$$\begin{aligned} \vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Spin})} &= \frac{1}{4\pi} \frac{2\pi}{V} \int d^3r \sum_{k,\lambda,k',\lambda'} i \sqrt{\frac{k}{k'}} (\vec{e}_{k,\lambda} \times \vec{e}_{k',\lambda'}) \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{k\lambda} - e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} b_{k\lambda}^+ \right) \left(e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} b_{k'\lambda'} + e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} b_{k'\lambda'}^+ \right) \\ &= \frac{i}{2} \sum_{k,\lambda,\lambda'} (\vec{e}_{k,\lambda} \times \vec{e}_{k,\lambda'}) (b_{k\lambda} b_{-k\lambda'} - b_{k\lambda}^+ b_{-k\lambda'}^+ - b_{k\lambda}^+ b_{k\lambda'} + b_{k\lambda'}^+ b_{k\lambda} + 1) \\ &= i \sum_k (\vec{e}_{k,1} \times \vec{e}_{k,2}) (b_{k,2}^+ b_{k,1} - b_{k,1}^+ b_{k,2}). \end{aligned} \quad (\text{II.4.82})$$

Dieser Ausdruck ist im Gegensatz zur Energie (II.4.64) und dem Impuls (II.4.73) nicht diagonal in den Operatoren $b_{k\lambda}, b_{k\lambda}^+$, d.h. er läßt sich nicht vollständig durch die zugehörigen Teilchenzahloperatoren $n_{k\lambda} = b_{k\lambda}^+ b_{k\lambda}$ ausdrücken. Durch Wahl einer geeigneten Basis können wir jedoch eine Diagonalisierung des Ausdruckes (II.4.82) erreichen. Dies gelingt durch Übergang von *linear polarisierten Photonen* zu den *zirkular polarisierten Photonen*

$$a_{\vec{k},+} := \frac{1}{\sqrt{2}} (b_{\vec{k},1} + i b_{\vec{k},2}), \quad (\text{II.4.83})$$

$$a_{\vec{k},-} := -\frac{1}{\sqrt{2}} (b_{\vec{k},1} - i b_{\vec{k},2}), \quad (\text{II.4.84})$$

die den Vertauschungsrelationen

$$[a_{\vec{k},\sigma}, a_{\vec{k}',\sigma'}^+] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (\text{II.4.85})$$

mit $\sigma = \pm$ genügen. $a_{\vec{k},+}^+$ erzeugt ein *rechts-polarisiertes Photon*, $a_{\vec{k},-}^+$ ein *links-polarisiertes Photon*. Ersetzt man die linear-polarisierten Photonen durch zirkular-polarisierte, so ist der Spinanteil des Drehimpulses diagonal:

$$\vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Spin})} = \sum_{\vec{k}} \hat{k} (a_{\vec{k},+}^+ a_{\vec{k},+}^- - a_{\vec{k},-}^+ a_{\vec{k},-}^-), \quad (\text{II.4.86})$$

wobei $\hat{k} := \frac{\vec{k}}{k}$ der Einheitsvektor in Bewegungsrichtung ist.

Für die Ein-Photonen-Zustände $a_{\vec{k},+}^+ |0\rangle$ und $a_{\vec{k},-}^+ |0\rangle$ für Rechts- bzw. Linkspolarisation gilt nun:

$$\vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Spin})} a_{\vec{k},+}^+ |0\rangle = \hat{k} a_{\vec{k},+}^+ |0\rangle, \quad (\text{II.4.87})$$

$$\vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Spin})} a_{\vec{k},-}^+ |0\rangle = -\hat{k} a_{\vec{k},-}^+ |0\rangle, \quad (\text{II.4.88})$$

woraus wir die Spinkomponente in Bewegungsrichtung erhalten:

$$\hat{k} \cdot \vec{J}_{\text{Str}}^{(\text{Spin})} a_{\vec{k},\pm}^+ |0\rangle = \pm a_{\vec{k},\pm}^+ |0\rangle. \quad (\text{II.4.89})$$

Die Spinkomponente in Bewegungsrichtung ist also ± 1 bzw. $\pm \hbar$. Somit ist klar, daß Photonen nur den Spin 1 haben können. Ein Rechtsphoton besitzt Spinkomponente $+1$, d.h. $J^z = +\hbar$, ein Linksphoton -1 , also $J^z = -\hbar$, in Bewegungsrichtung. Auf Grund der Transversalität der Felder tritt die Projektion 0, die zu $J^z = 0$ korrespondiert, auf die Bewegungsrichtung nicht auf. Dies hängt wiederum mit der verschwindenden Ruhemasse des Photons zusammen. Bei einem Teilchen mit $m_0 > 0$ kann man immer in das Ruhesystem des Teilchens gehen und dann den Spin in jede beliebige Richtung drehen.

II.4.3 Teilchen- vs. Wellenaspekte

Durch Quantisierung des elektromagnetischen Feldes kommt man zwangsläufig zu Photonen und damit dem Teilchenaspekt. Wir wollen nun untersuchen, welcher Zusammenhang mit dem klassischen Wellenbild besteht.

Zunächst betrachten wir Zustände $|\dots, n_{k\lambda}, \dots\rangle_N$ mit

$$b_{k\lambda}^+ b_{k\lambda} |\dots, n_{k\lambda}, \dots\rangle_N = n_{k\lambda} |\dots, n_{k\lambda}, \dots\rangle_N \quad (\text{II.4.90})$$

zu fester Teilchenzahl $N = \sum_{k\lambda} n_{k\lambda}$. Für diese Zustände gilt offensichtlich

$${}_N \langle \dots, n_{k\lambda}, \dots | b_{k\lambda}^{(+)} | \dots, n_{k\lambda}, \dots \rangle_N = 0, \quad (\text{II.4.91})$$

da $b_{k\lambda}^+$, $b_{k\lambda}$ die Teilchenzahl um ± 1 ändern. Da die Felder Linearkombinationen von Erzeugern und Vernichtern sind, verschwinden ihre Erwartungswerte in Zuständen mit fester Teilchenzahl:

$$\langle \vec{A} \rangle_N = \langle \vec{E} \rangle_N = \langle \vec{B} \rangle_N = 0. \quad (\text{II.4.92})$$

Dies bedeutet nicht, daß die Felder vollständig verschwinden, denn die Schwankungen sind von Null verschieden. Es ist sogar $\langle 0|E_{\perp}^2|0\rangle = \langle 0|B^2|0\rangle = \infty$. Trotzdem stellt sich die Frage, wie wir makroskopische Felder beschreiben können, deren Feldstärke nicht verschwindet.

Zunächst muß man sich klarmachen, daß die oben angegebenen Teilchenzahlzustände dann nützlich sind, wenn der Teilchenaspekt des elektromagnetischen Feldes besonders hervortritt, z.B. bei der Emission oder Absorption von Photonen, der Comptonstreuung oder dem Photoeffekt. Auf der anderen Seite muß die quantenmechanische Beschreibung auch den klassischen Fall von üblichen Feldern $\vec{E} \neq 0$, $\vec{B} \neq 0$ erfassen. Es sollte daher Zustände geben, in denen $\langle \vec{E} \rangle$, $\langle \vec{B} \rangle$ nicht verschwinden.

Solche Zustände sind die sogenannten *kohärenten Zustände*, die manchmal auch als *Glauber-Zustände* bezeichnet werden. Wir wollen diese zunächst relativ allgemein definieren und betrachten daher festes \vec{k} und λ und unterdrücken daher zunächst den zugehörigen Index. Wir definieren nun

$$|\varphi\rangle := \mathcal{A}e^{cb^+}|0\rangle \quad (\text{II.4.93})$$

mit einer (komplexen) Konstanten c und der Normierung \mathcal{A} . Wir können den Zustand auch expliziter darstellen:

$$|\varphi\rangle = \mathcal{A}e^{cb^+}|0\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{c^j b^{+j}}{j!} |0\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{c^j b^{+j}}{\sqrt{j!}} |j\rangle. \quad (\text{II.4.94})$$

Es handelt sich also um eine kohärente Überlagerung von Zuständen zu verschiedenen Teilchenzahlen $j = 0, 1, 2, \dots$. Die Normierungskonstante \mathcal{A} können wir relativ einfach bestimmen:

$$\begin{aligned} \langle \varphi|\varphi\rangle &= \mathcal{A}^2 \langle 0|e^{c^*b} e^{cb^+}|0\rangle \\ &= \mathcal{A}^2 \langle 0|e^{cb^+} e^{c^*b} e^{c^2[b, b^+]}|0\rangle = \mathcal{A}e^{|c|^2}, \end{aligned} \quad (\text{II.4.95})$$

wobei wir von der Identität

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]} \quad (\text{II.4.96})$$

Gebrauch gemacht haben, die gilt, falls $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$ ist.

Wir zeigen nun, daß der kohärente Zustand $|\varphi\rangle$ ein Eigenzustand des Vernichters b ist:

$$\begin{aligned} b|\varphi\rangle &= \mathcal{A}b e^{cb^+}|0\rangle = \mathcal{A}e^{cb^+} e^{-cb^+} b e^{cb^+}|0\rangle \\ &= \mathcal{A}e^{cb^+} (b + c)|0\rangle = c|\varphi\rangle, \end{aligned} \quad (\text{II.4.97})$$

wobei wir zunächst mit $e^{cb^+} e^{-cb^+} = \mathbb{1}$ erweitert haben um dann

$$e^{-cb^+} b e^{cb^+} = b + c \quad (\text{II.4.98})$$

auszunutzen. Diese Identität sieht man folgendermaßen ein. Zunächst definieren wir die Funktion

$$f(c) := e^{-cb^+} b e^{cb^+}. \quad (\text{II.4.99})$$

Für deren Ableitung gilt

$$f'(c) = e^{-cb^+} [b, b^+] e^{cb^+} = e^{-cb^+} e^{cb^+} = 1. \quad (\text{II.4.100})$$

Da offensichtlich $f(0) = b$ ist, folgt $f(c) = c + b$.

Wir haben somit gezeigt, daß für den oben definierten kohärenten Zustand gilt

$$b|\varphi\rangle = c|\varphi\rangle. \quad (\text{II.4.101})$$

Man beachte, daß die kohärenten Zustände Eigenzustände zu einem Operator sind, der die Teilchenzahl ändert!

Die obigen Überlegungen können sofort verallgemeinert werden. Ein allgemeiner kohärenter Zustand hat dann die Form

$$|\varphi\rangle = \mathcal{A} e^{\sum_{k,\lambda} c_{k,\lambda} b_{k,\lambda}^+} |0\rangle, \quad (\text{II.4.102})$$

$$\mathcal{A} = e^{-\frac{1}{2} \sum_{k,\lambda} |c_{k,\lambda}|^2}. \quad (\text{II.4.103})$$

Um eine anschauliche Interpretation der Zahlen $c_{k,\lambda}$ zu erhalten, bestimmen wir die mittlere Zahl der Photonen mit Impuls \vec{k} und Polarisation λ in einem kohärenten Zustand:

$$\langle b_{k,\lambda}^+ b_{k,\lambda} \rangle = \langle \varphi | b_{k,\lambda}^+ b_{k,\lambda} | \varphi \rangle = |c_{k,\lambda}|^2 \quad (\text{II.4.104})$$

wobei wir (II.4.101) und die dazu adjungierte Beziehung $\langle \varphi | b_{k,\lambda}^+ = c_{k,\lambda}^* \langle \varphi |$ ausgenutzt haben. Wir sehen also, daß die Koeffizienten $c_{k,\lambda}$ die mittlere Zahl der Photonen zum entsprechenden Impuls und Polarisation bestimmen.

Wir bestimmen nun die Erwartungswerte der Felder in den kohärenten Zuständen. Für das Vektorpotential gilt:

$$\begin{aligned} \langle \vec{A} \rangle &= \langle \varphi | \vec{A}(\vec{r}, t) | \varphi \rangle \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{V}} \sum_{k,\lambda} \frac{\vec{e}_{k,\lambda}}{\sqrt{k}} \langle \varphi | \left(e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-kt)} b_{k,\lambda} + e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-kt)} b_{k,\lambda}^+ \right) | \varphi \rangle \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{V}} \sum_{k,\lambda} \frac{\vec{e}_{k,\lambda}}{\sqrt{k}} \left(c_{k,\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-kt)} + c_{k,\lambda}^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-kt)} \right). \end{aligned} \quad (\text{II.4.105})$$

Wir betrachten nun den Spezialfall, daß nur ein Koeffizient $c_{k,\lambda}$ nicht verschwindet und zwar wählen wir speziell

$$c_{k,\lambda} = -\sqrt{\frac{V}{2\pi}} \frac{A_k}{2\sqrt{k}} \quad (\text{II.4.106})$$

für ein festes \vec{k} und $\lambda = 1$ und $c_{k',\lambda} = 0$ sonst. Hiermit erhalten wir für die Feldstärke

$$\langle \vec{A} \rangle = -\vec{e}_{k,1} \frac{A_k}{k} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - kt), \quad (\text{II.4.107})$$

also eine stehende monochromatische Welle wie wir sie aus der klassischen Elektrodynamik kennen. Für die zugehörigen elektrischen und magnetischen Felder ergibt sich

$$\langle \vec{E}_\perp \rangle = -\langle \dot{\vec{A}} \rangle = \vec{e}_{k,1} A_k \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - kt), \quad (\text{II.4.108})$$

$$\langle \vec{B} \rangle = \text{rot} \langle \vec{A} \rangle = \vec{e}_{k,2} A_k \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - kt). \quad (\text{II.4.109})$$

Wir können also tatsächlich im Rahmen der quantenfeldtheoretischen Beschreibung der Elektrodynamik klassische Felder konstruieren. Die entsprechenden Zustände sind Überlagerungen von Zuständen zu verschiedenen Photonenzahlen, also nicht scharf in der Teilchenzahl!

Um den Übergang zum klassischen Verhalten näher zu beleuchten, betrachten wir noch die Unbestimmtheit

$$(\Delta n)^2 := \langle \varphi | (n - \langle \varphi \rangle)^2 | \varphi \rangle \quad (\text{II.4.110})$$

der Photonenzahl in kohärenten Zuständen²³. Man erhält für die relative Unschärfe

$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{1}{\sqrt{\langle n \rangle}}, \quad (\text{II.4.111})$$

d.h. die relative Unschärfe wird für große Photonenzahlen klein

$$\frac{\Delta n}{n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \quad (\text{II.4.112})$$

Anschaulich gesprochen besagt dieses Ergebnis, daß wir für den Fall, daß wir es mit ‘vielen’ Photonen zu tun haben, klassisches Verhalten erwarten können.

II.5 Quantisierung der Dirac-Gleichung

Bisher haben wir nur bosonische Feldtheorien untersucht. Durch Quantisierung der Klein-Gordon-Gleichung sind wir zu einer quantenfeldtheoretischen Beschreibung für neutrale und geladene Spin-0-Teilchen gelangt und die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes liefert eine Feldtheorie für masselose Spin-1-Teilchen. Die uns umgebenden Materie besteht in erster Linie aus Protonen und Elektronen. Diese haben Spin 1/2 und sind deshalb Fermionen. Wir werden deshalb im folgenden skizzieren, wie die Dirac-Gleichung quantisiert wird und so zu einer Quantenfeldtheorie für Spin-1/2-Teilchen gelangen.

Ausgangspunkt ist die freie Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = [c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_0 c^2] \Psi \quad (\text{II.5.1})$$

mit dem 4-Spinor Ψ . In Kapitel I.4.2 haben wir die Lösung dieser Gleichung bestimmt:

$$\Psi(\vec{r}, t) = w_j(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - E^{(j)} t)} \quad (\text{II.5.2})$$

mit

$$w_{1/2}(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \vec{e}_{1/2} \\ \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E_p + m_0 c^2} \vec{e}_{1/2} \end{pmatrix}, \quad w_{3,4}(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E_p + m_0 c^2} \vec{e}_{1/2} \\ \vec{e}_{1/2} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.5.3})$$

²³Wir unterdrücken dabei wieder den Index (\vec{k}, λ) .

Dabei ist $\vec{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\vec{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ und die Energien

$$E^{(1)} = E^{(2)} = +E_p = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}, \quad E^{(3)} = E^{(4)} = -E_p. \quad (\text{II.5.4})$$

Die allgemeine Lösung der freien Dirac-Gleichung ist daher

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_p}} b_{\vec{p}}^{(r)} w_r(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - E^{(r)} t)} \quad (\text{II.5.5})$$

mit den Entwicklungskoeffizienten $b_{\vec{p}}^{(r)}$.

Die Quantisierung muß nun so erfolgen, daß die Antisymmetrie der Zustände unter Teilchenvertauschung und das Pauli-Verbot folgen. Wir ersetzen daher die Entwicklungskoeffizienten $b_{\vec{p}}^{(r)}$ durch Operatoren²⁴ $\hat{b}_{\vec{p}}^{(r)}$ mit fermionischen Antikommutatoren

$$\left\{ \hat{b}_{\vec{p}}^{(r)}, \hat{b}_{\vec{q}}^{(s)+} \right\} = \delta_{\vec{p}, \vec{q}} \delta_{rs}. \quad (\text{II.5.6})$$

Alle anderen Antikommutatoren sind wieder gleich Null. Das Vakuum $|0\rangle$ definieren wir ebenfalls in Analogie zu unserem Vorgehen bei den bosonischen Theorien durch

$$\hat{b}_{\vec{p}}^{(r)} |0\rangle = 0. \quad (\text{II.5.7})$$

Wir können dann eine Basis des Hilbertraumes angeben:

$$|\{n_{\vec{p}}^{(r)}\}\rangle = \prod_{\vec{p}, r} \left(\hat{b}_{\vec{p}}^{(r)+} \right)^{n_{\vec{p}}^{(r)}} |0\rangle, \quad (\text{II.5.8})$$

wobei für die Besetzungszahlen nur $n_{\vec{p}}^{(r)} = 0, 1$ möglich ist.

Wie früher lassen sich alle relevanten Operatoren durch die Erzeuger und Vernichter ausdrücken. Explizit erhalten wir:

$$\text{Hamilton-Operator:} \quad H = \sum_{\vec{p}} E_p \left(b_{\vec{p}}^{(1)+} b_{\vec{p}}^{(1)} + b_{\vec{p}}^{(2)+} b_{\vec{p}}^{(2)} - b_{\vec{p}}^{(3)+} b_{\vec{p}}^{(3)} - b_{\vec{p}}^{(4)+} b_{\vec{p}}^{(4)} \right), \quad (\text{II.5.9})$$

$$\text{Impuls:} \quad \vec{P} = \sum_{\vec{p}} \sum_r \vec{p} b_{\vec{p}}^{(r)+} b_{\vec{p}}^{(r)}, \quad (\text{II.5.10})$$

$$\text{Ladung:} \quad Q = e \sum_{\vec{p}} \sum_r b_{\vec{p}}^{(r)+} b_{\vec{p}}^{(r)}, \quad (\text{II.5.11})$$

$$\text{Helizität:} \quad \Lambda_s = \frac{\hbar}{2} \sum_{\vec{p}} \left(b_{\vec{p}}^{(1)+} b_{\vec{p}}^{(1)} - b_{\vec{p}}^{(2)+} b_{\vec{p}}^{(2)} + b_{\vec{p}}^{(3)+} b_{\vec{p}}^{(3)} - b_{\vec{p}}^{(4)+} b_{\vec{p}}^{(4)} \right). \quad (\text{II.5.12})$$

²⁴Wie üblich werden wir später auch für die Operatoren einfach $b_{\vec{p}}^{(r)}$ schreiben, statt $\hat{b}_{\vec{p}}^{(r)}$.

Wenn wir den Ausdruck für den Hamilton-Operator näher betrachten fällt auf, daß das oben definierte Vakuum nicht der Zustand niedrigster Energie ist! Um dieses Problem zu lösen, definieren wir ein neues Vakuum $|\text{Vak}\rangle$ als den Zustand des Hilbertraumes, der die niedrigste Energie hat. Offensichtlich ist dies der Zustand, in dem alle Einteilchen-Zustände mit Energie $E < 0$ besetzt sind. Die Energie dieses Zustandes ist $E_{\text{vak}} = -\infty$. Wir verschieben daher den Energienullpunkt und messen alle Energien relativ zu der des Vakuumzustandes $|\text{Vak}\rangle$.

Das weitere Vorgehen ist analog zu den Überlegungen bei der Betrachtung der Dirac-Gleichung in 1. Quantisierung. Vernichtet man ein Elektron mit negativer Energie $-E_p < 0$, Impuls \vec{p} , Helizität Λ_s und Ladung $e = -|e|$ im Vakuum, so wird die Energie um den Betrag $E_p > 0$ erhöht, der Impuls ändert sich um $-\vec{p}$, die Helizität um $-\Lambda_s$ und die Ladung um $-e$. Die Vernichtung eines Elektrons negativer Energie ist daher äquivalent zur Erzeugung eines Teilchens (Positrons) mit Energie $E_p < 0$, Impuls $-\vec{p}$, Helizität $-\Lambda_s$ und Ladung $-e$.

Formal können wir dies durch eine kanonische Transformation von den Fermionenoperatoren $b_p^{(r)}$ zu neuen Fermioperatoren $c_p^{(r)}$ erreichen, nämlich der sogenannten *Teilchen-Loch-Transformation*

$$c_{\vec{p}}^{(1)} = b_{\vec{p}}^{(1)}, \quad c_{\vec{p}}^{(2)} = b_{\vec{p}}^{(2)}, \quad c_{\vec{p}}^{(3)} = -b_{-\vec{p}}^{(4)+}, \quad c_{\vec{p}}^{(4)} = b_{-\vec{p}}^{(3)+}. \quad (\text{II.5.13})$$

Man beachte, daß eine solche Teilchen-Loch-Transformation nur für Fermionen kanonisch ist, nicht für Bosonen. Hierin liegt ein tieferer Grund dafür, daß die Dirac-Gleichung nicht in sinnvoller Weise bosonisch quantisiert werden kann. Wie schon früher erwähnt, ist die Forderung nach "Stabilität" mitverantwortlich für den fermionischen Teil des Spin-Statistik-Theorems.

Der Grund für die Bezeichnung "Teilchen-Loch-Transformation" ist aus (II.5.13) klar abzulesen und zeigt sich auch bei den entsprechenden neuen Teilchenzahloperatoren $\tilde{n}_{\vec{p}}^{(r)}$:

$$\tilde{n}_{\vec{p}}^{(3)} = 1 - n_{-\vec{p}}^{(4)}, \quad \tilde{n}_{\vec{p}}^{(4)} = 1 - n_{-\vec{p}}^{(3)}, \quad (\text{II.5.14})$$

wobei die sich die Operatoren für $r = 1, 2$ natürlich nicht ändern. Mit der Hilfe der neuen Operatoren kann man nun das neue Vakuum $|\text{Vak}\rangle$ in gewohnter Weise definieren:

$$c_{\vec{p}}^{(r)} |\text{Vak}\rangle = 0. \quad (\text{II.5.15})$$

Für den Hamilton-Operator, Impuls, Ladung und Helizität ergeben sich folgende Darstellungen durch die neuen Operatoren:

Hamilton-Operator:	$H = \sum_{\vec{p}} \sum_r E_p \tilde{n}_{\vec{p}}^{(r)},$	(II.5.16)
Impuls:	$\vec{P} = \sum_{\vec{p}} \sum_r \vec{p} \tilde{n}_{\vec{p}}^{(r)},$	(II.5.17)
Ladung:	$Q = e \sum_{\vec{p}} \sum_r \left(\tilde{n}_{\vec{p}}^{(1)} + \tilde{n}_{\vec{p}}^{(2)} - \tilde{n}_{\vec{p}}^{(3)} - \tilde{n}_{\vec{p}}^{(4)} \right),$	(II.5.18)
Helizität:	$\Lambda_s = \frac{\hbar}{2} \sum_{\vec{p}} \left(\tilde{n}_{\vec{p}}^{(1)} - \tilde{n}_{\vec{p}}^{(2)} + \tilde{n}_{\vec{p}}^{(3)} - \tilde{n}_{\vec{p}}^{(4)} \right).$	(II.5.19)

Dabei haben wir beim Hamiltonoperator und der Ladung die divergenten Beiträge $-2 \sum_p E_p$ bzw. $2e \sum_p 1$ ignoriert.

Für den quantisierten Feldoperator erhält man im Heisenberg-Bild

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} \sqrt{\frac{m_0 c^2}{E_p}} \left[(c_p^{(1)} v_1(\vec{p}) + c_p^{(2)} v_2(\vec{p})) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - E_p t)} + (c_p^{(3)+} v_3(\vec{p}) + c_p^{(4)+} v_4(\vec{p})) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} + E_p t)} \right] \quad (\text{II.5.20})$$

mit

$$v_1(\vec{p}) = w_1(\vec{p}), \quad v_2(\vec{p}) = w_2(\vec{p}), \quad v_3(\vec{p}) = -w_4(-\vec{p}), \quad v_4(\vec{p}) = w_3(-\vec{p}). \quad (\text{II.5.21})$$

II.6 Wechselwirkung von Teilchen mit Strahlung

Bisher haben wir nur freie Quantenfeldtheorien betrachtet. Wir werden nun Wechselwirkungen berücksichtigen und uns dabei speziell mit dem relevanten Fall der Wechselwirkung elektromagnetischer Felder mit Materie befassen.

Wir hatten früher schon den Gesamthamiltonoperator eines Systems geladener Teilchen (z.B. ein Atom) und der Strahlung abgeleitet:

$$H = H_{\text{Teilchen}} \left(\left\{ \vec{p}_n - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_n) \right\} \right) + H_{\text{Coul}} + H_{\text{Str}}. \quad (\text{II.6.1})$$

Die Wechselwirkung zwischen Strahlung und Teilchen ist in H_{Teilchen} enthalten, z.B.

$$H_{\text{Teilchen}} \left(\left\{ \vec{p}_n - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_n) \right\} \right) = \begin{cases} \sum_n \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p}_n - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_n) \right) & \text{relativistisch} \\ \sum_n \frac{1}{2m_n} \left[\left(\vec{p}_n - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_n) \right)^2 - e \vec{\sigma}_n \cdot \vec{B}(\vec{r}_n) \right] & \text{nicht-relativistisch.} \end{cases} \quad (\text{II.6.2})$$

Der nicht-relativistische Ausdruck ist anwendbar, wenn nur Übergänge in atomaren Niveaus mit $|E_n - E_{n'}| \ll m_0 c^2$ betrachtet werden, worauf wir uns im folgenden beschränken wollen.

Wir nehmen nun eine weitere Aufteilung des Hamilton-Operators vor:

$$H = H_0 + H', \quad H' = H'_1 + H'_2 + H'_3, \quad (\text{II.6.3})$$

mit dem ungestörten Anteil

$$H_0 = \sum_n \left[\frac{\vec{p}_n^2}{2m_n} + V(\vec{r}_n) \right] + H_{\text{Coul}} + H_{\text{Str}}. \quad (\text{II.6.4})$$

Dabei ist der Strahlungsanteil durch

$$H_{\text{Str}} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega_k b_{\vec{k}, \lambda}^+ b_{\vec{k}, \lambda} \quad (\text{II.6.5})$$

gegeben. Der Wechselwirkungsanteil H' setzt sich aus den Beiträgen²⁵

$$H'_1 = -\frac{e}{m} \sum_n \vec{p}_n \cdot \vec{A}(\vec{r}_n), \quad (\text{II.6.6})$$

$$H'_2 = -\frac{e}{2m} \sum_n \vec{\sigma}_n \cdot \vec{B}(\vec{r}_n), \quad (\text{II.6.7})$$

$$H'_3 = \frac{e^2}{2m} \sum_n A^2(\vec{r}_n) \quad (\text{II.6.8})$$

zusammen. Bei der Umformung von H'_1 haben wir berücksichtigt, daß wegen $\vec{A} = \vec{A}_\perp$ gilt $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$.

Für das weitere Vorgehen haben wir nun zwei Möglichkeiten;

- a) Wir können das elektromagnetische Feld klassisch behandeln. Dies ist gerechtfertigt, wenn die Energieüberträge groß gegen die Photonenergien und die Feldstärken groß sind. Dies gilt z.B. für die in der Vorlesung *Quantenmechanik I* behandelten homogenen Felder, den Stark-Effekt, den Zeeman-Effekt und den Fall von Radiofeldern (d.h. kleinen Photonenergien).
- b) Alternativ können wir den Einfluß von H' in Störungstheorie behandeln. Dies ist gerechtfertigt, wenn die auftretenden Intensitäten klein sind (d.h. wenige Photonen beteiligt sind), aber die Photonenergie relativ groß ist. Ein typischer Fall, bei dem diese Bedingungen erfüllt sind, ist die *optische Spektroskopie* von Atomen oder Molekülen.

Im folgenden wollen wir den Fall b) betrachten. Der typische Entwicklungsparameter der Störungstheorie ist dabei e^2 bzw. die Feinstrukturkonstante $\frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$.

Als einfachsten Fall untersuchen wir nun *Einphotonenprozesse*. Wir nehmen an, daß auf Grund der Wechselwirkung ein Übergang von einem Zustand α in einen Zustand β stattfindet. Diese Zustände seien Eigenzustände des nicht-wechselwirkenden Anteils H_0 . Sie lassen sich charakterisieren durch den Zustand μ des Teilchenanteils und den Zustand $\{n_{k\lambda}\}$ des Strahlungsanteils. Da wir uns auf Einphotonenprozesse konzentrieren wollen, genügt zur Charakterisierung der Zustände die Angabe der Besetzungszahl $n_{k\lambda}$ des entsprechenden Photonenzustandes²⁶. Damit können wir Ausgangs- und Endzustand folgendermaßen charakterisieren:

$$|\alpha\rangle = |\mu, n_{k\lambda}\rangle, \quad |\beta\rangle = |\mu', n_{k\lambda} \pm 1\rangle. \quad (\text{II.6.9})$$

Dabei ist in $|\beta\rangle$ für Prozesse, bei denen das Atom ein Photon emittiert, $n_{k\lambda} + 1$ zu wählen, und für Prozesse, bei denen ein Photon absorbiert wird, $n_{k\lambda} - 1$. Die Energien der Zustände sind

$$E_\alpha = E_\mu + \sum_{k', \lambda'} \omega_{k'} n_{k', \lambda'}, \quad (\text{II.6.10})$$

$$E_\beta = E_{\mu'} + \sum_{k', \lambda'} \omega_{k'} n_{k', \lambda'} \pm \omega_k. \quad (\text{II.6.11})$$

²⁵Wir nehmen im folgenden an, daß alle Teilchen die Ruhemasse $m_n = m$ haben.

²⁶Die anderen Besetzungszahlen ändern sich im Laufe des Prozesses nicht und werden deshalb unterdrückt.

E_μ und $E_{\mu'}$ sind die Energien des Teilchenanteils vor bzw. nach dem Übergang. Die Energie des Strahlungsanteils ändert sich um die Energie ω_k des absorbierten bzw. emittierten Photons (\vec{k}, λ). Nach *Fermis Goldener Regel* ist die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeit auf Grund der Störung H' gegeben durch

$$w_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta | H' | \alpha \rangle|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta). \quad (\text{II.6.12})$$

Die Energieerhaltung wird durch die Delta-Funktion $\delta(E_\alpha - E_\beta)$ sichergestellt. Somit folgt $E_\alpha = E_\beta$ und daher für die Energieänderung des Teilchensystems

$$E_{\mu'} - E_\mu = \pm \omega_k = \begin{cases} > 0 & \text{Absorption} \\ < 0 & \text{Emission.} \end{cases} \quad (\text{II.6.13})$$

Zur Bestimmung der Übergangsrate müssen wir also die Matrixelemente $\langle \beta | H' | \alpha \rangle$ berechnen. Dazu benötigen wir das Vektorpotential in quantenfeldtheoretischer Sprache (vgl. (II.4.69)):

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi}{V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{1}{\sqrt{k}} \vec{e}_{\vec{k}, \lambda} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}, \lambda} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \right). \quad (\text{II.6.14})$$

Hieraus sehen wir sofort, daß der Beitrag von H'_3 verschwindet:

$$\langle \beta | H'_3 | \alpha \rangle \propto \langle \beta | A^2 | \alpha \rangle \propto \sum \langle \beta | \left(b^2 + bb^\dagger + b^\dagger b + b^{\dagger 2} \right) | \alpha \rangle = 0. \quad (\text{II.6.15})$$

Dabei haben wir die beim Quadrieren von \vec{A} auftretenden Terme nur skizziert. Die Beträge aller vier Terme verschwinden, da sie die Photonenzahl im Zustand $|\alpha\rangle$ um -2 , 0 oder $+2$ ändern. Da sich die Photonenzahlen in den Zuständen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ aber um ± 1 unterscheiden, verschwinden die entsprechenden Matrixelemente in allen Fällen. Somit bleibt also nur der Beitrag $\langle \beta | H'_1 + H'_2 | \alpha \rangle$ zu berechnen.

Bevor wir dies tun, betrachten wir Übergänge in eine Gruppe B von Photonenzuständen hinein, die in einem Energieintervall $\omega \leq \omega_k \leq \omega + d\omega$ der Breite $d\omega$ um ω_k herum liegen. Außerdem sollen die Richtungen der zugehörigen \vec{k} -Vektoren alle in einem Raumwinkelelement der Größe $d\Omega_k$ liegen. Dann folgt für den entsprechenden Beitrag zur Übergangsrate unter Berücksichtigung von $\omega_k = k$:

$$\begin{aligned} dw_{\alpha \rightarrow B} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k \in B} |\langle \beta | H' | \alpha \rangle|^2 \delta(E_{\mu'} - E_\mu \mp \omega_k) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^2} d\Omega_k \int dk k^2 |\langle \beta | H' | \alpha \rangle|^2 \delta(E_{\mu'} - E_\mu \mp k) \end{aligned} \quad (\text{II.6.16})$$

und somit

$$\frac{dw_{\alpha \rightarrow B}}{d\Omega_k} = \frac{V k^2}{4\pi^2} |\langle \beta | H' | \alpha \rangle|^2 \quad (\text{II.6.17})$$

mit $k = |E_{\mu'} - E_\mu|$.

Wir berechnen nun die Matrixelemente explizit. Für den Beitrag von H'_1 erhält man

$$\begin{aligned}\langle \beta | H'_1 | \alpha \rangle &= -\frac{e}{m} \sum_n \sqrt{\frac{2\pi}{V k}} \langle \mu', n_{k,\lambda} \pm 1 | (\vec{e}_{k,\lambda} \cdot \mathbf{p}_n) (e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} b_{k,\lambda} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} b_{k,\lambda}^\dagger) | \mu, n_{k,\lambda} \rangle \\ &= -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi}{V k}} \cdot \begin{cases} F_a^1 \sqrt{n_{k,\lambda}} & \text{Absorption} \\ F_e^1 \sqrt{n_{k,\lambda} + 1} & \text{Emission} \end{cases} \quad (\text{II.6.18})\end{aligned}$$

wobei

$$F_{a,e}^1 = \sum_n \langle \mu' | (\vec{e}_{k,\lambda} \cdot \mathbf{p}_n) e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \mu \rangle. \quad (\text{II.6.19})$$

nur noch ein Matrixelement bzg. des Teilchenanteils ist.

Eine analoge Rechnung liefert für H'_2 :

$$\langle \beta | H'_2 | \alpha \rangle = \frac{ie}{m} \sqrt{\frac{2\pi}{V k}} \cdot \begin{cases} F_a^2 \sqrt{n_{k,\lambda}} & \text{Absorption} \\ F_e^2 \sqrt{n_{k,\lambda} + 1} & \text{Emission} \end{cases} \quad (\text{II.6.20})$$

mit

$$F_{a,e}^2 = \sum_n \frac{1}{2} \langle \mu' | \sigma_n \cdot (\vec{e}_{k,\lambda} \cdot \mathbf{p}_n) e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \mu \rangle. \quad (\text{II.6.21})$$

Insgesamt ergibt sich daher für die Übergangsrate

$$\boxed{\frac{dw_{\alpha \rightarrow \beta}}{d\Omega_k} = \frac{e^2 k}{2\pi m^2} |F_{a,e}^1 - iF_{a,e}^2|^2 \cdot \begin{cases} n_{k,\lambda} & \text{Absorption} \\ n_{k,\lambda} + 1 & \text{Emission.} \end{cases} \quad (\text{II.6.22})}$$

Wir wollen einige charakteristische Merkmale dieses Ergebnisses diskutieren. Für den Fall der Emission ist die Übergangsrate proportional zu $n_{k,\lambda} + 1$. Insbesondere ist also eine *spontane Emission* möglich, bei der $n_{k,\lambda} = 0$ ist. Übergänge sind also auch dann möglich, wenn vorher keine Photonen vorhanden sind. Die neue Energie des Atoms nach der Emission ist durch

$$E_{\mu'} = E_\mu - k < E_\mu \quad (\text{II.6.23})$$

gegeben. Für $n_{k,\lambda} > 0$ spricht man von *stimulierter Emission*. Hier ist die Übergangsrate proportional zur Strahlungsintensität.

Bei der Absorption ist die Übergangsrate proportional zu $n_{k,\lambda}$, also zur Intensität der Strahlung. Sie kann daher nur auftreten, wenn bereits Photonen vorhanden sind, die absorbiert werden können. Die Energie des erhöht sich durch die Absorption des Photons:

$$E_{\mu'} = E_\mu + k > E_\mu. \quad (\text{II.6.24})$$

Für nicht zu kurzwelliges Licht ist die Bedingung $\langle \vec{k} \cdot \vec{r}_n \rangle \ll 1$ erfüllt. Dabei ist $\langle r_n \rangle$ typischerweise von der Größenordnung des Bohrschen Radius $a_0 \approx 10^{-8}$ cm, so daß $\langle \vec{k} \cdot \vec{r}_n \rangle \sim 2\pi \frac{a_0}{\lambda} \ll 1$

erfüllt ist, falls die Wellenlänge der Strahlung $\lambda \gg 10^{-7}$ cm. In diesem Falle können wir in der Gleichung für die F-Koeffizienten entwickeln $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \approx 1 \pm i\vec{k}\cdot\vec{r}_n$ und somit

$$F_{a,e}^1 \sim \sum_n \vec{e}_{k,\lambda} \cdot \langle \vec{p}_n \rangle \sim \cdots \sim \sum_n \vec{e}_{k,\lambda} \cdot \langle \vec{r}_n \rangle, \quad (\text{II.6.25})$$

wobei wir hier auf die Details der Rechnung, bei denen u.a. das Wigner-Eckart-Theorem verwendet wurde, nicht eingehen wollen. Das Auftreten des Dipolmatrixelementes $\langle r_n \rangle$ zeigt, daß der Koeffizient $F_{a,e}^1$ im betrachteten Grenzfall die elektrische Dipolstrahlung liefert. Höhere Korrekturen liefern dann die elektrische Quadrupolstrahlung usw. Der Beitrag von $F_{a,e}^2$ läßt sich wegen

$$F_{a,e}^2 \sim \sum_n \langle \sigma_n \rangle \cdot (\vec{k} \times \vec{e}_{k,\lambda}) \quad (\text{II.6.26})$$

als magnetische Dipolstrahlung interpretieren. Eine Abschätzung des Verhältnisses der Beiträge

$$\frac{F_{a,e}^1}{F_{a,e}^2} \sim \frac{\langle \sigma_n \rangle \cdot \vec{k}}{|\langle \vec{p}_n \rangle|} \sim \frac{k}{1/a_0} \sim \frac{a_0}{\lambda} \ll 1 \quad (\text{II.6.27})$$

zeigt, daß der Anteil der elektrischen Dipolstrahlung dominiert. Sukzessive ergibt sich so eine Multipolentwicklung der Strahlung, mit der Wichtigkeit der Beiträge:

elektrische Dipolstrahlung \gg magnetische Dipolstrahlung \gg elektrische Quadrupolstrahlung. (II.6.28)

Linienbreite und Lebensdauer

Wir haben gesehen, daß ein angeregtes atomares Niveau spontan zerfallen kann, obwohl keine Strahlung vorhanden ist. Das heißt aber, daß dieses Niveau nicht stabil ist und somit nicht scharf definiert werden kann. Als Folge der *endlichen Lebensdauer* tritt eine *Linienverbreiterung* auf, die man als *natürliche Linienbreite* bezeichnet.

Wir betrachten wieder den Hamiltonoperator $H = H_0 + H'$. Es sei $|\lambda\rangle$ ein Eigenzustand von H_0

$$H_0|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle, \quad \text{mit} \quad \langle \lambda|H'|\lambda\rangle = 0, \quad (\text{II.6.29})$$

wobei es sich bei E_λ um ein diskretes Niveau handeln soll. Es sei weiterhin P_λ der Projektionsoperator auf den Unterraum der Zustände $|\lambda'\rangle$ mit Energie E_λ .

Wir betrachten nun die Zeitentwicklung $|\psi(t)\rangle$ eines Zustandes mit $|\psi(t=0)\rangle = |\lambda\rangle$. Explizit haben wir

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(t=0)\rangle = e^{-iHt}|\lambda\rangle, \quad (\text{II.6.30})$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator

$$U(t) = e^{-iHt}. \quad (\text{II.6.31})$$

Auf Grund der Wirkung der Störung H' erwarten wir, daß der Anfangszustand $|\lambda\rangle$ im Laufe der Zeit zerfällt. Dieser Zerfall wird beschrieben durch den Operator

$$U(t) = P_\lambda U(t) P_\lambda. \quad (\text{II.6.32})$$

Dieser Operator kann explizit bestimmt werden. Dabei wird wesentlich die Darstellung

$$U(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ixt} [G^+(x) - G^-(x)] \quad (\text{II.6.33})$$

mit dem Resolventenoperator

$$G^\pm(x) = \frac{1}{x \pm i\delta - H} \quad (\text{II.6.34})$$

mit $\delta \rightarrow 0$ verwendet. Auf die Details der Rechnung wollen wir hier nicht eingehen. Stattdessen geben wir das Endergebnis an. Näherungsweise folgt

$$\mathcal{U}(t) \approx e^{-it(\bar{E}_\lambda - \frac{i}{2}\Gamma_\lambda)}. \quad (\text{II.6.35})$$

Dabei ist $\bar{E}_\lambda = E_\lambda + \delta E_\lambda$ ein Maß für die Linienverschiebung, d.h. der natürlichen Linienbreite. Die Zerfallsrate läßt sich aus dem Überlapp des Zustandes $|\psi(t)\rangle$ mit dem Zustand $|\psi(t=0)\rangle = |\lambda\rangle$ ablesen. Dieser ist gegeben durch

$$|\langle \lambda | \psi(t) \rangle| = |\mathcal{U}(t)|^2 = e^{-\Gamma_\lambda t}. \quad (\text{II.6.36})$$

Der Zustand $|\lambda\rangle$ zerfällt also exponentiell. Die typische Zerfallszeit des Zustandes $|\lambda\rangle$ unter dem Einfluß der Wechselwirkung H' ist gegeben durch

$$\tau_\lambda = \frac{1}{\Gamma_\lambda}. \quad (\text{II.6.37})$$

Neben der spontanen Emission gibt es natürlich noch andere Prozesse, die zu einer endlichen Lebensdauer — und damit Linienbreite — betragen, insbesondere Stöße zwischen den Atomen.

Als nächsten Schritt müßte man nun eine allgemeine Theorie für wechselwirkende Systeme entwickeln. Dies führt auf die sogenannte *Propagatortheorie*. Der Propagator entspricht dabei der Greenschen Funktion für Differentialgleichung und somit eine Art Fundamentallösung für ein System mit δ -Wechselwirkung. Außerdem kann er anschaulich interpretiert werden, da er die Ausbreitung und Streuung eines Teilchens beschreibt. Auf der Basis der Propagatortheorie läßt sich dann ein Formalismus für die Vielteilchen-Störungstheorie entwickeln.