
Quantentheorie 2

© Carsten Timm 2013–2020

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	4
1.1	Was fehlt noch?	4
1.2	Lehrbücher	5
1.3	Danksagung	6
1.4	Formalismus der Quantenmechanik	6
1.4.1	Zustände und Operatoren	6
1.4.2	Dynamik	8
2	Ununterscheidbare Teilchen und zweite Quantisierung	10
2.1	Unterscheidbare Teilchen	10
2.1.1	N -Teilchen-Hilbertraum	10
2.1.2	Observable	12
2.1.3	Dynamik	13
2.2	Ununterscheidbare Teilchen	15
2.2.1	Symmetrisierte und antisymmetrisierte Zustände	17
2.2.2	Das Pauli-Prinzip	20
2.2.3	Observable	22
2.3	Zweite Quantisierung	25
2.3.1	Besetzungszahldarstellung	25
2.3.2	Operatoren in zweiter Quantisierung	31
2.3.3	Quantenfeldoperatoren	34
2.4	Festkörperelektronen	36
2.4.1	Der Fermi-See	37
2.4.2	Teilchen und Löcher	38
2.5	Austausch-Wechselwirkung und Hartree-Fock-Näherung	39
2.5.1	Direkte und Austausch-Wechselwirkung	40
2.5.2	Hartree-Fock-Gleichung	43
2.5.3	Hartree-Fock-Näherung in zweiter Quantisierung	46
2.5.4	Das Wasserstoffmolekül	49
2.6	Bosonen	53
3	Relativistische Quantentheorie	55
3.1	Spezielle Relativitätstheorie	55
3.1.1	Viererschreibweise und relativistische Mechanik	56
3.1.2	Elektrodynamik	60
3.1.3	Minimale Kopplung	62
3.2	Die Klein-Gordon-Gleichung	63
3.2.1	Freie Teilchen	63
3.2.2	Eigenschaften der Klein-Gordon-Gleichung	65
3.2.3	Teilchen im elektromagnetischen Feld	67
3.3	Die Dirac-Gleichung	69

3.3.1	Freies Teilchen	69
3.3.2	Eigenschaften der Dirac-Gleichung	73
3.3.3	Drehimpuls und Spin	74
3.3.4	Wahrscheinlichkeitsdichte	77
3.3.5	Teilchen im elektromagnetischen Feld	78
3.3.6	Klein-Paradoxon	79
3.3.7	Löchertheorie	85
3.4	Nichtrelativistischer Grenzfall und relativistische Korrekturen	87
3.4.1	Große und kleine Komponenten, Pauli-Theorie	87
3.4.2	Relativistische Korrekturen, Spin-Bahn-Kopplung	90
3.4.3	Feinstruktur des Spektrums des Wasserstoffatoms	92
3.5	Graphen	93
3.6	Relativistische Quantenmechanik für größere Spins	97
3.6.1	Spin-1-Bosonen und die Proca-Gleichung	97
3.6.2	Spin-3/2-Fermionen und die Rarita-Schwinger-Gleichung	102
4	Streutheorie	105
4.1	Grundlagen	105
4.1.1	Teilchenzahlerhaltung und Optisches Theorem	109
4.2	Partialwellen und Streuphasen	111
4.2.1	Streupotentiale mit endlichem Träger	117
4.2.2	Resonanzstreuung	123
4.2.3	Integraldarstellung der Streuphasen und Bornsche Näherung	126
4.3	Coulomb-Streuung	127
4.3.1	Die Rutherford'sche Streuformel	131
4.3.2	Partialwellenzerlegung	132
4.4	Streuung ununterscheidbarer Teilchen	134
4.4.1	Streuung von Teilchen aneinander	134
4.4.2	Ununterscheidbare Teilchen	135
4.4.3	Mittelung über Spin-Einstellungen	137
4.5	Green-Funktions-Methode	138
4.5.1	Integraldarstellung der Streuamplitude	138
4.5.2	Bornsche Reihe	140
4.6	Basisunabhängige Streutheorie	142
4.6.1	Die allgemeine Lippmann-Schwinger-Gleichung	143
4.6.2	Die S -Matrix	146
4.6.3	Die T -Matrix	148
4.6.4	Zusammenhang mit der Streuamplitude	149
4.7	Anhang: Zeitabhängige Störungstheorie	150
4.7.1	Bildwechsel in der Quantentheorie	150
4.7.2	Fermis Goldene Regel	153
4.7.3	Verallgemeinerung auf die T -Matrix	155
5	Feldquantisierung	157
5.1	Von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik	157
5.2	Lagrange- und Hamilton-Formalismus für Felder	160
5.2.1	Lagrange-Formalismus	160
5.2.2	Hamilton-Formalismus	162
5.3	Kanonische Quantisierung und Quantenfeldtheorien	164
5.3.1	Schrödingersche Wellenfunktion	165
5.3.2	Elektromagnetisches Feld	166
5.3.3	Kopplung an Materie: QED	172

Kapitel 1

Einführung

1.1 Was fehlt noch?

Die Vorlesung Quantentheorie 2 bildet den abschließenden Teil des Vorlesungszyklus zur Theoretischen Physik im Bachelor-Studium. Zugleich setzt sie die Vorlesung Quantentheorie 1 fort. Es stellt sich die Frage, welche Themen der physikalischen Allgemeinbildung durch die Quantentheorie 1 noch nicht abgedeckt wurden.

Die Quantentheorie 1 beschäftigt sich mit der Quantenmechanik *einzelner Teilchen*, die sich mit im Vergleich zur Lichtgeschwindigkeit c *kleinen Geschwindigkeiten* bewegen. Weiter wurden, mit Ausnahme von einfachen Tunnelproblemen, nur *gebundene Zustände* untersucht. Daraus ergeben sich die folgenden Lücken und Mängel der Beschreibung, die wir zumindest zum Teil schließen bzw. beheben werden:

1. Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ ist eine Funktion eines Ortes oder, in der Verallgemeinerung auf N Teilchen, von N Orten, $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ sowie i. A. der Zeit. Wir haben bisher die Möglichkeit, dass die Wellenfunktion Symmetrien unter Vertauschungen von Teilchen haben könnte, ignoriert. Solche Symmetrien stellen sich aber als sehr wichtig heraus. Im Rahmen des bisher entwickelten Formalismus kann sich außerdem die Zahl der Argumente von ψ nicht zeitlich ändern. Er kann daher die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen nicht beschreiben, z. B. den β -Zerfall $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$. Eine solche Beschreibung ist mittels der sogenannten *zweiten Quantisierung* möglich, die wir in Kap. 2 diskutieren werden.
2. Die bisher beschriebene Quantentheorie, basierend auf der Schrödinger-Gleichung, ist nicht Lorentz-invariant und ihr klassischer Grenzfall ist daher nicht mit der Speziellen Relativitätstheorie vereinbar. Daher wird die Dynamik von Teilchen mit Geschwindigkeiten nahe c nicht korrekt beschrieben. Die vernachlässigten relativistischen Effekte sind auch für das Verständnis der Atomniveaus und -spektren wichtig. Die Schrödinger-Gleichung ergibt nicht die beobachtete Feinstruktur. Das liegt v. a. an der vernachlässigten Spin-Bahn-Kopplung. Diese ist auch für die Festkörperphysik von – in der letzten Zeit stark zunehmender – Bedeutung. In Kap. 3 werden wir Lorentz-invariante Formulierungen der Quantenmechanik kennenlernen.
3. Während wir gebundene Zustände z. B. in Atomen recht gut verstehen, fehlt es uns bisher an einer systematischen Theorie für Streuprozesse. Diese sind aber als Basis für zahlreiche experimentelle Methoden sehr wichtig. In Kap. 4 beschäftigen wir uns mit der Streutheorie.
4. Wir können die Dynamik von Materieteilchen quantentheoretisch beschreiben und in der zweiten Quantisierung auch deren Erzeugung und Zerfall. Dagegen kennen wir bisher nur klassische Theorien von Feldern, insbesondere die Maxwell-Theorie des elektromagnetischen Feldes. Viele Experimente zeigen aber, dass Licht auch Teilchencharakter hat, z. B. der photoelektrische Effekt. Eine Quantentheorie von Feldern, insbesondere des elektromagnetischen, ist daher erforderlich. Die Grundlagen dafür sollen in Kap. 5 besprochen werden.

Es sei darauf hingewiesen, dass die Themen Vielteilchentheorie, relativistische Quantentheorie und Streutheorie durch die Modulbeschreibung vorgegeben sind. Das zusätzliche kurze Kapitel zur Feldquantisierung wurde aufge-

nommen, damit alle Bachelor-Absolventinnen und -Absolventen zumindest einmal die Grundideen dieses für die moderne Physik zentralen Gebietes gesehen haben.

1.2 Lehrbücher

Aus dem Angebot von Lehrbüchern soll hier eine kleine und subjektive Auswahl erwähnt werden:

- F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*, 5. Aufl. (Springer, Berlin, 2008): Bekanntes deutsches Lehrbuch, das eine ähnliche Stoffauswahl wie die Vorlesung abdeckt. Da die Vorlesung nicht auf Basis dieses Lehrbuchs entwickelt wurde, sondern eher ausgehend von den Büchern von W. Nolting und A. Messiah, stellt es eine gute Möglichkeit dar, eine ganz unabhängige Darstellung des Stoffs zu lesen. Das Buch enthält Übungsaufgaben zu den einzelnen Kapiteln, aber ohne Lösungen. Ein großer Vorteil des Buchs ist, dass es unter <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-540-85076-2> online zur Verfügung steht. Es ist aus dem Universitätsnetz oder mit VPN zugänglich.
- W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik, Band 5/2: Quantenmechanik – Methoden und Anwendungen*, 6. Aufl. (Springer-Verlag, Berlin, 2006): Die gesamte Reihe von Lehrbüchern ist empfehlenswert. Nolting legt relativ großes Gewicht auf das Einüben der Formalismen und weniger auf die ausführliche Diskussion des physikalischen Gehalts. Er führt Herleitungen oft im Detail vor, wo andere Autoren nur das Ergebnis angeben. Die Darstellung ist fast immer klar. Die Bücher enthalten viele gute Übungsaufgaben mit Lösungen und Kontrollfragen. Format und Layout sind ansprechend. Die relativistische Quantentheorie kommt relativ kurz.
- A. Messiah, *Quantenmechanik, Band 1*, 2. Aufl. (de Gruyter, Berlin, 1991) und *Band 2*, 3. Aufl. (de Gruyter, Berlin, 1990): Ein empfehlenswertes klassisches Lehrbuch in zwei Bänden, wobei wir überwiegend den zweiten Band benötigen. Sehr umfangreich in der Stoffauswahl und mit etwas größerem Gewicht auf Prosa als Noltings Buch. Die Bücher enthalten Übungsaufgaben ohne Lösungen. Sie sind ebenfalls aus dem Universitätsnetz oder mit VPN zugänglich.
- S. Stepanow, *Relativistische Quantentheorie* (Springer, Berlin, 2010): Ein weniger verbreitetes deutsches Lehrbuch, das wesentliche Teile der Vorlesung abdeckt, aber eine andere Gewichtung aufweist, wie der Titel schon nahelegt. Streutheorie kommt nur am Rande in Form von Anwendungen vor, dafür gibt es ein ausführliches Kapitel zur Quantenelektrodynamik. Das Buch wirkt teilweise nicht gründlich redigiert. Es enthält Übungsaufgaben zu den einzelnen Kapiteln ohne Lösungen. Es steht wie Schwabls Buch online zur Verfügung unter <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-12050-3>.
- L. D. Landau und E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik, Band 3: Quantenmechanik*, 9. Aufl. (Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1986/1992) und *Band 4: Quantenelektrodynamik*, 7. Aufl. (Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1991/2009): Teile der klassischen Reihe von russischen Lehrbüchern. Inzwischen etwas altmodisch in der Stoffauswahl und der Darstellung. Zwischenschritte werden selten angegeben. Die Bücher enthalten recht schwierige Übungsaufgaben ohne Lösungen. Band 3 umfasst die nicht relativistische Quantenmechanik, die überwiegend schon in der Vorlesung Quantentheorie 1 behandelt wurde, Band 4 die relativistische Quantenmechanik, die Feldquantisierung und, wie der Titel sagt, die Quantenelektrodynamik. Band 4 geht damit deutlich über den Stoff der Vorlesung hinaus.
- J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics* (Pearson Education, 2006): Relevant für die relativistische Quantenmechanik und die Feldquantisierung. Altmodische Formulierung der relativistischen Metrik unter Verwendung der imaginären Einheit i .
- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu und F. Laloë, *Quantenmechanik*, Band 1 und 2, 4. Aufl. (de Gruyter, 2010).
- R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, 2. Aufl., 3. Nachdruck (Springer-Verlag, 2008).

Die zweite Quantisierung wird auch am Anfang von vielen Lehrbüchern der Vielteilchentheorie und der Quantenfeldtheorie diskutiert. Ansprechende Darstellungen finden sich z. B. in H. Bruus und K. Flensberg, *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics* (Oxford University Press, Oxford, 2004) und in A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, Mineola, 2003).

1.3 Danksagung

Ich möchte Herrn Alexander Lau ganz herzlich für das Abtippen, den LaTeX-Satz und die Erstellung der elektronischen Skizzen für die erste Version dieses Skriptes danken. Mein Dank gilt auch Herrn Jürgen Wagner für zahlreiche Hinweise zu Tippfehlern und missverständlichen Formulierungen.

1.4 Formalismus der Quantenmechanik

Wir wiederholen zunächst Material aus der Quantentheorie 1, zur Vorbereitung auf den neuen Stoff.

1.4.1 Zustände und Operatoren

Ein *Zustand* eines quantenmechanischen Systems wird durch einen Vektor $|\psi\rangle \neq 0$ aus einem *Hilbertraum* \mathcal{H} repräsentiert. Genauer beschreiben zwei Vektoren $|\psi\rangle$ und $c|\psi\rangle$, $c \in \mathbb{C}$, $c \neq 0$, denselben Zustand, Zustände werden also durch ganze eindimensionale, komplexe Unterräume von \mathcal{H} (*Strahlen*) dargestellt. Wir werden i. A. aber nicht zwischen Hilbertraum-Vektoren und Zuständen unterscheiden.

Ein Hilbertraum ist ein Vektorraum über \mathbb{R} oder \mathbb{C} , für den ein Skalarprodukt $\langle\psi|\phi\rangle$ existiert und der bezüglich der durch dieses Skalarprodukt induzierten Norm $\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ vollständig ist. Der Hilbertraum der Quantenmechanik ist speziell ein Vektorraum über \mathbb{C} und ist zusätzlich *separabel*. Folgende Begriffe sind wichtig:

- *Vollständigkeit*: Jede Cauchy-Folge von Elementen aus \mathcal{H} konvergiert in \mathcal{H} . Eine Cauchy-Folge $|\psi_n\rangle$ ist definiert durch die Bedingung $\forall \epsilon > 0: \exists N \in \mathbb{N}: \forall m, n > N: \|(|\psi_m\rangle - |\psi_n\rangle)\| < \epsilon$ (anschaulich: die Abstände werden für große n immer kleiner). Vollständigkeit garantiert, dass Superpositionen von abzählbar vielen Vektoren aus \mathcal{H} in \mathcal{H} enthalten sind:

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n |\psi_n\rangle \in \mathcal{H}. \quad (1.1)$$

Der Beweis wird hier nicht durchgeführt. Dazu wird die Reihe als Folge der Partialsummen aufgefasst.

- *Separabilität*: Es existiert eine *abzählbare* Orthonormalbasis $\{|\phi_n\rangle\}$. Daraus folgt, dass sich alle Vektoren aus \mathcal{H} als Superpositionen von abzählbar vielen Basisvektoren darstellen lassen. Tatsächlich haben wir es in der Quantenmechanik oft mit Systemen mit überabzählbar vielen linear unabhängigen Zuständen zu tun. Wir gehen hier nicht auf die zusätzlichen mathematischen Komplikationen ein, die solche uneigentlichen Zustände, die formal nicht im Hilbertraum liegen, mit sich bringen. Im Zweifel stellen wir uns das System geeignet regularisiert vor, z. B. durch Einschränkung auf ein großes, aber endliches Volumen, so dass eine abzählbare Basis existiert.

Operatoren, genauer *lineare Operatoren*, sind lineare Abbildungen $\mathcal{H} \mapsto \mathcal{H}$. Ein Operator A kann eindeutig durch seine Matrixelemente $\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle$ bezüglich einer Orthonormalbasis $\{|\phi_n\rangle\}$ charakterisiert werden. Zu jedem Operator A existiert ein *adjungierter* Operator A^\dagger , definiert durch

$$\langle\psi|A\phi\rangle \equiv \langle\psi|A|\phi\rangle =: \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle^* \equiv \langle\phi|A^\dagger\psi\rangle^* \equiv \langle A^\dagger\psi|\phi\rangle. \quad (1.2)$$

Wichtig sind insbesondere zwei Typen von Operatoren:

- *Hermiteische* Operatoren A erfüllen $A = A^\dagger$, also $\langle\psi|A\phi\rangle = \langle A\psi|\phi\rangle$. Es folgt $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^*$ und damit $\langle\psi|A|\psi\rangle \in \mathbb{R}$. *Observable* werden in der Quantenmechanik durch hermitesche Operatoren dargestellt.
- *Unitäre* Operatoren U erfüllen $U^{-1} = U^\dagger$ oder äquivalent $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$. Es folgt

$$\langle U\psi|U\phi\rangle = \langle U^\dagger U\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle, \quad (1.3)$$

Skalarprodukte und damit insbesondere die Norm von Vektoren sind also invariant unter unitären Operatoren. Für jeden hermiteschen Operator A ist e^{iA} ein unitärer Operator. In der Quantenmechanik werden viele *Transformationen* durch unitäre Operatoren dargestellt, z. B. Drehungen durch Drehoperatoren $e^{-i\mathbf{L}\cdot\mathbf{n}\alpha/\hbar}$. Manche Transformationen, z. B. die Zeitumkehr, lassen sich aber nicht durch unitäre, sondern durch antiunitäre Operatoren darstellen.

Wichtige Operatoren wie die Auf- und Absteigeoperatoren für Drehimpulse, $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$, und für den harmonischen Oszillator, b^{\dagger} und b , sind weder hermitesch noch unitär.

Sowohl für hermitesche als auch für unitäre Operatoren A (allgemein für *normale* Operatoren) existiert eine Orthonormalbasis von *Eigenzuständen* $|a\rangle \in \mathcal{H}$ zu *Eigenwerten* $a \in \mathbb{C}$, die also

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (1.4)$$

erfüllen. Diese Orthonormalbasis nennen wir die *Eigenbasis* von A . Eigenwerte von hermiteschen Operatoren sind immer reell, Eigenwerte von unitären Operatoren sind komplexe Zahlen vom Betrag eins (reine Phasenfaktoren).

Nützlich sind die Eigenzustände $|\mathbf{r}\rangle$ des Ortsoperators $\hat{\mathbf{r}}$,

$$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle. \quad (1.5)$$

Die Darstellung der Zustände $|\psi\rangle$ in der von den $|\mathbf{r}\rangle$ gebildeten Orthonormalbasis ergibt die zugehörigen *Wellenfunktionen*

$$\psi(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | \psi \rangle. \quad (1.6)$$

Da die Ortseigenzustände vollständig sind, können wir schreiben

$$\int d^d r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = \mathbb{1} \quad (1.7)$$

(d ist die Dimension des Ortsraumes). Damit können wir die Zustandsvektoren durch die zugehörige Wellenfunktion ausdrücken:

$$|\psi\rangle = \int d^d r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^d r \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle. \quad (1.8)$$

Auch Operatoren lassen sich in der Ortsbasis darstellen:

$$A = \int d^d r d^d r' |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | A | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | =: \int d^d r d^d r' A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}'|. \quad (1.9)$$

Man kann jede Basis nehmen, z. B. von Eigenzuständen $|\mathbf{k}\rangle$ des Impulsoperators $\hat{\mathbf{p}}$, die die Gleichung

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{k}\rangle = \hbar \mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \quad (1.10)$$

erfüllen. Mit $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = (1/\sqrt{\mathcal{V}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ (\mathcal{V} ist das d -dimensionale Volumen des Systems) folgt

$$\langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \int d^d r \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^d r \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.11)$$

Das ist offenbar die Fourier-Transformierte von $\psi(\mathbf{r})$.

Mögliche Ergebnisse der Messung einer Observablen, dargestellt durch einen hermiteschen Operator A , sind die Eigenwerte von A . Der Mittelwert der Messwerte für viele Messungen von A für *denselben* Anfangszustand $|\psi\rangle$ konvergiert (mit Wahrscheinlichkeit eins) gegen den *Erwartungswert* $\langle \psi | A | \psi \rangle$. Dieser ist i. A. kein Eigenwert. Der Zustand $|\psi\rangle$ lässt sich (natürlich) in der Eigenbasis von A darstellen: $|\psi\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a | \psi \rangle$. Damit können wir für den Erwartungswert schreiben

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{a,a'} \langle \psi | a \rangle \langle a | A | a' \rangle \langle a' | \psi \rangle = \sum_{a,a'} \langle \psi | a \rangle \delta_{aa'} a' \langle a' | \psi \rangle = \sum_a |\langle a | \psi \rangle|^2 a. \quad (1.12)$$

$|\langle a | \psi \rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Messwertes a bei einer Einzelmessung (Bornsche Regel). Nach der Messung wissen wir, dass das System im Zustand $|a\rangle$ ist (wir nehmen der Einfachheit halber an, dass der Eigenwert a nicht entartet ist). Dieser scheinbar un stetige Übergang des Zustands von $|\psi\rangle$ in $|a\rangle$ („Kollaps“) während der Messung sowie die Bornsche Regel sind noch immer Gegenstand der Diskussion über die Interpretation der Quantenmechanik.

1.4.2 Dynamik

Die Zeitentwicklung eines Zustandes wird durch die *Schrödinger-Gleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (1.13)$$

mit dem *Hamilton-Operator (Hamiltonian)* H bestimmt. H ist ein hermitescher Operator auf \mathcal{H} . Ist H zeitunabhängig, so lautet die formale Lösung

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle =: U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (1.14)$$

wie man durch Einsetzen sieht. Hier ist $U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$ der *Zeitentwicklungsoperator*, der offenbar unitär ist und daher insbesondere die Norm des Zustands erhält. Dies ist wünschenswert für die Konsistenz der Wahrscheinlichkeitsinterpretation. Für einen zeitabhängigen Hamiltonian schreibt man $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$, aber der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0)$ hat eine kompliziertere Form, siehe Quantentheorie 1. Wir nehmen im Folgenden den Hamiltonian aber als zeitunabhängig an.

Observable und allgemeiner Operatoren sind in diesem Bild höchstens explizit zeitabhängig. Dadurch ist das *Schrödinger-Bild* definiert. Da nur Matrixelemente beobachtbare Konsequenzen haben, kann die Zeitentwicklung äquivalent auch den Operatoren anstatt den Zuständen zugeordnet werden:

$$\langle \psi | A | \phi \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \phi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \underbrace{U^\dagger(t, t_0) A U(t, t_0)} | \phi(t_0) \rangle =: \langle \psi | A(t) | \phi \rangle \quad (1.15)$$

mit

$$A(t) = U^\dagger(t, t_0) A U(t, t_0). \quad (1.16)$$

Dies ist das *Heisenberg-Bild*. Offenbar sind durch Aufteilung der Zeitentwicklung zwischen den Zuständen und den Operatoren beliebig viele Bilder möglich, die dieselben Matrixelemente ergeben und damit gleiche physikalische Aussagen machen.

Eine besonders nützliche Basis wird von den Eigenzuständen des Hamiltonians gebildet:

$$H |\nu\rangle = E_\nu |\nu\rangle \quad (1.17)$$

(ν steht für einen geeigneten vollständigen Satz kompatibler Quantenzahlen). Das ist die *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung*. Die Zustände $|\nu\rangle$ sind vollständig, was sich als

$$\sum_\nu |\nu\rangle \langle \nu| = \mathbb{1} \quad (1.18)$$

schreiben lässt. Die *Eigenfunktionen* von H sind die zu den Eigenzuständen gehörenden Wellenfunktionen,

$$\psi_\nu(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu \rangle. \quad (1.19)$$

Diese erfüllen die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung in der Ortsdarstellung

$$\int d^d r' H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_\nu(\mathbf{r}') = E_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}). \quad (1.20)$$

Diese Gleichung sieht ungewohnt aus. Für den Einteilchen-Hamiltonian

$$H = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.21)$$

lautet die Ortsdarstellung

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \quad (1.22)$$

(der Hamiltonian ist also lokal) und die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung nimmt die bekannte Form

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}) = E_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

an. Man sollte nicht vergessen, dass die Ortsdarstellung von H nicht dasselbe ist wie der (basisunabhängige) Operator H .

Die Darstellung eines beliebigen Zustands in der Eigenbasis lautet

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu | \psi \rangle = \sum_{\nu} \underbrace{\langle \nu | \psi \rangle}_{\text{Zahlen}} |\nu\rangle \quad (1.24)$$

und für die Wellenfunktion

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle \langle \nu | \psi \rangle = \sum_{\nu} \langle \nu | \psi \rangle \psi_{\nu}(\mathbf{r}). \quad (1.25)$$

Diese Darstellung ist besonders nützlich, da die Zeitentwicklung der Eigenzustände und Eigenfunktionen einfach ist: Die Eigenzustände und Eigenfunktionen ändern sich mit der Zeit nur in ihrer *Phase*,

$$|\nu(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\nu(t_0)\rangle = \underbrace{e^{-iE_{\nu}(t-t_0)/\hbar}}_{\text{Zahlenfunktion}} |\nu(t_0)\rangle \quad (1.26)$$

und

$$\psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) = \underbrace{e^{-iE_{\nu}(t-t_0)/\hbar}}_{\text{unabhängig von } \mathbf{r}} \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t_0). \quad (1.27)$$

Das Betragsquadrat $|\psi_{\nu}(\mathbf{r}, t)|^2$ ändert sich also zeitlich nicht. Man kann also die Zeitentwicklung eines beliebigen Zustands dadurch ermitteln, dass man ihn zunächst nach Eigenzuständen des Hamiltonians entwickelt und diese dann mit den zeitabhängigen Faktoren nach Glg. (1.26) bzw. (1.27) multipliziert.

Kapitel 2

Ununterscheidbare Teilchen und zweite Quantisierung

In diesem Kapitel geht es um Systeme aus mehreren Teilchen. Nach einer Diskussion *unterscheidbarer* Teilchen besprechen wir den zentralen Begriff *ununterscheidbarer* Teilchen. Es wird sich herausstellen, dass, sofern die Teilchenzahl erhalten ist, eine Beschreibung von Systemen mit mehreren ununterscheidbaren Teilchen im bisherigen Hilbertraum-Bild zwar möglich, aber unpraktisch, ist. Die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen kann in diesem Bild gar nicht beschrieben werden. Der Ausweg ist der Formalismus der zweiten Quantisierung.

2.1 Unterscheidbare Teilchen

Hier erweitern wir die bekannte Quantentheorie für ein Teilchen auf den Fall mehrerer Teilchen. Zentral ist dabei die Frage, wie Zustände und damit der Hilbertraum mehrerer Teilchen aussehen. Wir beschäftigen uns zunächst nur mit Fällen, in denen wir die Teilchen sicher voneinander unterscheiden können, z. B. das Proton und das Elektron im Wasserstoffatom.

Zwei Teilchen nennen wir *unterscheidbar*, wenn wir sie im Prinzip experimentell eindeutig unterscheiden können. Das bedeutet, dass sie bezüglich mindestens einer *intrinsischen* Eigenschaft unterschiedliche Messwerte liefern müssen, z. B. können sie unterschiedliche Ladung oder Ruhemasse oder unterschiedlichen Gesamtspin S haben. Unterscheidbare Teilchen tragen gewissermaßen ein Etikett. Wir können z. B. eindeutig sagen, dass Teilchen 1 auf Detektor A trifft und Teilchen 2 auf Detektor B; das ist eine andere Aussage als die, dass Teilchen 2 auf Detektor A trifft und Teilchen 1 auf Detektor B. $N > 2$ Teilchen nennen wir unterscheidbar, wenn sie paarweise unterscheidbar sind. Wir betrachten in diesem Abschnitt nur unterscheidbare Teilchen.

2.1.1 N -Teilchen-Hilbertraum

Für mehr als ein Teilchen brauchen wir eine zusätzliche Annahme darüber, wie wir Zustände des Gesamtsystems beschreiben wollen. Die formale Frage lautet: Was ist der Zustandsraum für mehrere Teilchen? Eine naheliegende Antwort ist folgende: Für zwei unterscheidbare Teilchen ist der Hilbertraum das *Tensorprodukt* der Hilberträume der einzelnen Teilchen,

$$\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{\text{Teilchen 1}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Teilchen 2}}. \quad (2.1)$$

Diese Gleichung drückt aus, dass jedes der beiden Teilchen in jedem Einteilchenzustand sein kann, ganz gleich in welchem Zustand sich das andere Teilchen befindet. Jedes der Teilchen hat einen vollständigen Einteilchen-Hilbertraum zur Verfügung. Wir brauchen also für jedes Teilchen einen vollständigen Satz kompatibler Einteilchen-Quantenzahlen, um den Vielteilchenzustand eindeutig zu beschreiben. Das bedeutet nicht unbedingt, dass die Zustände der beiden Teilchen unkorreliert sind. Als Beispiel können das Proton und das Elektron im Wasserstoffatom dienen: Jedes der beiden Teilchen kann sich an einem beliebigen Ort im Raum befinden, aber aus der Kenntnis des Ortes des Protons können wir – für einen gebundenen Zustand – schließen, dass sich das Elektron

bevorzugt in der Nähe dieses Ortes aufhält. Die Dimension des Produktraums ist das Produkt der Dimensionen der Faktorräume.

Wollen wir z. B. nur die Bewegung der Teilchen im d -dimensionalen Raum beschreiben, so sind die beiden Einteilchen-Hilberträume identisch (obwohl die Teilchen unterscheidbar sind) und wir haben speziell $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$. Die Verallgemeinerung auf N Teilchen lautet offenbar

$$\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_{N\text{-mal}} \equiv \mathcal{H}^{\otimes N}. \quad (2.2)$$

Man kann zeigen, dass der Raum \mathcal{H}_N ein separabler Hilbertraum über \mathbb{C} ist, wenn dies für \mathcal{H} gilt.

Ausgehend von einer beliebigen Basis $\{|\nu\rangle\}$ des Einteilchen-Hilbertraums \mathcal{H} können wir eine Basis des Vielteilchen-Hilbertraums \mathcal{H}_N konstruieren, nämlich die *Produktbasis* bestehend aus den Vektoren

$$|\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle := |\nu_1\rangle |\nu_2\rangle \cdots |\nu_N\rangle. \quad (2.3)$$

Dies ist die übliche Definition des Tensorprodukts von Vektorräumen. ν_1, \dots, ν_N sind vollständige Sätze von kompatiblen Einteilchen-Quantenzahlen für die Teilchen $1, \dots, N$. Hat \mathcal{H} die Dimension d , so hat $\mathcal{H}^{\otimes N}$ die Dimension d^N . Für $N = 3$ Spins $1/2$ ist z. B. $d = 2$ und $d^N = 8$. Für $N = 2$ Spins 1 ist dagegen $d = 3$ und $d^N = 9$.

Bezüglich der Produktbasis, Gl. (2.3), können wir die Zustände aus \mathcal{H}_N zerlegen:

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \langle \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \langle \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle. \quad (2.4)$$

Wir definieren nun *allgemeine Produktzustände*: Falls sich die Koeffizienten in der Form

$$\langle \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle = c_{\nu_1}^{(1)} \cdots c_{\nu_N}^{(N)} \quad (2.5)$$

mit $c_{\nu_n}^{(n)} \in \mathbb{C}$ schreiben lassen, so folgt

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu_1} c_{\nu_1}^{(1)} |\nu_1\rangle \cdots \sum_{\nu_N} c_{\nu_N}^{(N)} |\nu_N\rangle. \quad (2.6)$$

Also ist $|\psi\rangle$ ein Produkt von Einteilchenzuständen $|\psi_n\rangle = \sum_{\nu_n} c_{\nu_n}^{(n)} |\nu_n\rangle$. Wir nennen einen N -Teilchenzustand von der Form

$$|\psi\rangle = \prod_n |\psi_n\rangle \quad (2.7)$$

separabel oder einen *Produktzustand*. Ist $|\psi\rangle$ nicht separabel, so nennen wir $|\psi\rangle$ *verschränkt*. (Separabilität ist invariant unter Wechsel der Basis des *Einteilchen*-Hilbertraums.) Für zwei unterscheidbare Spins der Länge $1/2$ (etwa an verschiedenen Orten) ist z. B. $|\psi\rangle = (|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ ein verschränkter Zustand.

Wir benötigen auch ein *Skalarprodukt* auf \mathcal{H}_N . Die Standarddefinition für Produktvektorräume ergibt für die Elemente einer Produktbasis

$$\langle \nu_1, \dots, \nu_N | \nu'_1, \dots, \nu'_N \rangle := \prod_{n=1}^N \langle \nu_n | \nu'_n \rangle. \quad (2.8)$$

Dies legt das Skalarprodukt für beliebige Elemente von \mathcal{H}_N eindeutig fest, da wir beliebige Elemente gemäß Gl. (2.4) nach einer Produktbasis entwickeln können. Man kann zeigen, dass es tatsächlich die Axiome für ein Skalarprodukt erfüllt. Die Definition ist auch physikalisch plausibel, da unterscheidbare Teilchen nicht miteinander interferieren.

Speziell können wir die Ortsbasis von \mathcal{H}_N einführen:

$$|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\rangle := \underbrace{|\mathbf{r}_1\rangle}_{\text{im } 1. \mathcal{H}} \underbrace{|\mathbf{r}_2\rangle}_{\text{im } 2. \mathcal{H}} \underbrace{|\mathbf{r}_3\rangle}_{\dots} \cdots |\mathbf{r}_N\rangle. \quad (2.9)$$

Die zum Zustand $|\psi\rangle$ gehörende *Vielteilchen-Wellenfunktion* ist seine Darstellung bezüglich dieser Basis:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) := \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | \psi \rangle. \quad (2.10)$$

Dann ist

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 d^d r_1 \cdots d^d r_N \quad (2.11)$$

die Wahrscheinlichkeit, Teilchen 1 in $d^d r_1$ um \mathbf{r}_1 und Teilchen 2 in $d^d r_2$ um \mathbf{r}_2 usw. zu finden.

Wenn wir die Einteilchen-Wellenfunktionen der Zustände $|\nu\rangle$ mit $u_\nu(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | \nu \rangle$ bezeichnen, dann lautet die Vielteilchen-Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | \psi \rangle \\ &= \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} |\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle \langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle \\ &= \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \langle \mathbf{r}_1 | \nu_1 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \nu_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{r}_N | \nu_N \rangle \langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle \\ &= \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \underbrace{\langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle}_{\text{Zahlen}} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Beim vorletzten Gleichheitszeichen haben wir die Definition (2.8) des Skalarproduktes in \mathcal{H}_N verwendet.

Abschließend sei betont, dass die Wahl des Produktraums mit dem Standardskalarprodukt als Zustandsraum \mathcal{H}_N für N Teilchen nicht aus der Einteilchen-Quantenmechanik folgt (und folgen kann). Vielmehr hat die Definition von \mathcal{H}_N den Charakter eines weiteren *Postulats*, das sich im Vergleich mit Experimenten bewähren muss. Wir werden Beispiele kennenlernen, in denen dieses Postulat falsch ist.

2.1.2 Observable

Observable sollten weiterhin durch hermitesche Operatoren dargestellt werden, aber nun durch Operatoren auf \mathcal{H}_N . Wir betrachten zunächst Observable $A_N^{(n)}$, die sich nur auf ein Teilchen, bezeichnet mit der Nummer n , beziehen, etwa seinen Ort oder Impuls. Der Subskript N soll andeuten, dass $A_N^{(n)}$ auf \mathcal{H}_N definiert ist. Falls sich die Teilchen in einem Produktzustand befinden, sollten Messungen von $A_N^{(n)}$ an Teilchen Nr. n nicht von den Zuständen der übrigen Teilchen beeinflusst werden. Dies erfordert für die Matrixelemente von $A_N^{(n)}$ bezüglich einer Produktbasis, dass gilt

$$\begin{aligned} \langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | A_N^{(n)} | \nu'_1, \nu'_2, \dots, \nu'_N \rangle &= \langle \nu_1 | \nu'_1 \rangle \cdots \langle \nu_{n-1} | \nu'_{n-1} \rangle \langle \nu_n | A^{(n)} | \nu'_n \rangle \langle \nu_{n+1} | \nu'_{n+1} \rangle \cdots \langle \nu_N | \nu'_N \rangle \\ &= \delta_{\nu_1 \nu'_1} \cdots \delta_{\nu_{n-1} \nu'_{n-1}} \langle \nu_n | A^{(n)} | \nu'_n \rangle \delta_{\nu_{n+1} \nu'_{n+1}} \cdots \delta_{\nu_N \nu'_N}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

wobei $A^{(n)}$ der zur Observablen gehörende Operator auf dem *Einteilchen*-Hilbertraum von Teilchen n ist. Durch die Angabe aller Matrixelemente bzgl. einer Basis ist der Operator aber eindeutig festgelegt. Er lautet

$$A_N^{(n)} = \mathbb{1}^{(1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}^{(n-1)} \otimes A^{(n)} \otimes \mathbb{1}^{(n+1)} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}^{(N)}, \quad (2.14)$$

wobei $\mathbb{1}^{(n)}$ der identische Operator auf dem Einteilchen-Hilbertraum von Teilchen n ist. Damit ist die Wirkung von $A_N^{(n)}$ auf beliebige Zustände, nicht nur Produktzustände, festgelegt. Es ist üblich, wenn auch ungenau, die Operatoren $A_N^{(n)}$ und $A^{(n)}$ miteinander zu identifizieren. Wir werden daher i. A. den Subskript N weglassen. Aus der Darstellung folgt sofort, dass Observable zu unterschiedlichen Teilchen kommutieren: $[A_N^{(n)}, B_N^{(n')}] = 0$ für $n \neq n'$.

Observable, die sich auf mehr als ein Teilchen beziehen, müssen entsprechend durch hermitesche Operatoren repräsentiert werden, die in mindestens zwei Faktorräumen vom identischen Operator verschieden sind. Weiter gibt es keine prinzipiellen Einschränkungen. Solche Wechselwirkungsterme werden wir im Zusammenhang mit ununterscheidbaren Teilchen in Abschnitt 2.2.3 ausführlicher besprechen. Als Beispiel für eine Zwei-Teilchen-Observable betrachten wir die Coulomb-Energie von zwei Teilchen $n < n'$ mit den Ladungen q und q' . Der entsprechende Operator ist

$$V_C^{(n, n')} = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 s_n d^3 s_{n'} \frac{1}{|\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_{n'}|}$$

$$\times \mathbb{1}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(n-1)} \otimes |\mathbf{s}_n\rangle\langle\mathbf{s}_n| \otimes \mathbb{1}^{(n+1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(n'-1)} \otimes |\mathbf{s}_{n'}\rangle\langle\mathbf{s}_{n'}| \otimes \mathbb{1}^{(n'+1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(N)}. \quad (2.15)$$

Hier ist $|\mathbf{s}_n\rangle\langle\mathbf{s}_n|$ der Projektionsoperator auf den Ortseigenzustand $|\mathbf{s}_n\rangle$ des Teilchens n . Er filtert den Anteil aus Zuständen heraus, in dem Teilchen n am Ort \mathbf{s}_n ist. Wie im Fall von Einteilchenoperatoren ist es offensichtlich vorteilhaft, die Einsoperatoren zu unterdrücken. Daher schreiben wir

$$V_C^{(n,n')} = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0} \int d^3s_n d^3s_{n'} \frac{1}{|\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_{n'}|} |\mathbf{s}_n\rangle\langle\mathbf{s}_n| \otimes |\mathbf{s}_{n'}\rangle\langle\mathbf{s}_{n'}|. \quad (2.16)$$

Um zu zeigen, dass dieser Operator vernünftige Ergebnisse liefert, betrachten wir seinen Erwartungswert in einem Produktzustand. Wir betrachten nur zwei Teilchen $n = 1, n' = 2$, die Zustände der übrigen spielen ja keine Rolle. Den Produktzustand schreiben wir in der Ortsbasis als

$$|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) |\mathbf{r}_1\rangle|\mathbf{r}_2\rangle. \quad (2.17)$$

Dann lautet der Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle\psi_2|\langle\psi_1| V_C^{(1,2)} |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle &= \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3s_1 d^3s_2 d^3r'_1 d^3r'_2 \frac{\psi_2^*(\mathbf{r}_2) \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}'_1) \psi_2(\mathbf{r}'_2)}{|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|} \\ &\times \langle\mathbf{r}_2|\langle\mathbf{r}_1| (|\mathbf{s}_1\rangle\langle\mathbf{s}_1| \otimes |\mathbf{s}_2\rangle\langle\mathbf{s}_2|) |\mathbf{r}'_1\rangle|\mathbf{r}'_2\rangle \\ &= \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3s_1 d^3s_2 d^3r'_1 d^3r'_2 \frac{\psi_2^*(\mathbf{r}_2) \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}'_1) \psi_2(\mathbf{r}'_2)}{|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|} \langle\mathbf{r}_1|\mathbf{s}_1\rangle\langle\mathbf{s}_1|\mathbf{r}'_1\rangle\langle\mathbf{r}_2|\mathbf{s}_2\rangle\langle\mathbf{s}_2|\mathbf{r}'_2\rangle \\ &= \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

wobei wir mehrfach die Orthonormalitätsrelation

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.19)$$

für Ortseigenzustände verwendet haben. Das Ergebnis für Produktzustände ist das erwartete Coulomb-Gesetz mit den Ladungsdichten $q|\psi_1(\mathbf{r})|^2$ und $q'|\psi_2(\mathbf{r})|^2$, was zeigt, dass der klassische Grenzfall korrekt herauskommt. Für verschränkte Zustände ergibt sich dagegen kein klassisch verständliches Ergebnis.

2.1.3 Dynamik

Solange die N Teilchen nicht wechselwirken, sollte die Dynamik eines Teilchens von allen anderen unabhängig sein. Falls sich die Teilchen in einem Produktzustand $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \dots |\psi_N\rangle$ befinden, sollte für jedes Teilchen $n = 1, \dots, N$ die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_n\rangle = H^{(n)} |\psi_n\rangle \quad (2.20)$$

mit dem Hamiltonian $H^{(n)}$ gelten. Wie sieht dann der Hamiltonian H des N -Teilchen-Systems aus? H ist ein Operator auf \mathcal{H}_N , der im Faktorraum zu Teilchen n wie $H^{(n)}$ wirkt. Der Beitrag von $H^{(n)}$ zu H darf aber keine Wirkung auf die anderen Teilchen haben. Die Antwort lautet formal

$$H = \sum_{n=1}^N \mathbb{1}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(n-1)} \otimes H^{(n)} \otimes \mathbb{1}^{(n+1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(N)}. \quad (2.21)$$

Jeder Term in der Summe hat wieder die Form einer Einteilchenobservablen, die auf den gesamten N -Teilchen-Hilbertraum trivial ausgedehnt wurde. Wie im vorigen Abschnitt ist es üblich, den Operator $H^{(n)}$ auf \mathcal{H} stillschweigend mit dem Operator $\mathbb{1}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(n-1)} \otimes H^{(n)} \otimes \mathbb{1}^{(n+1)} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}^{(N)}$ auf \mathcal{H}_N zu identifizieren und einfach zu schreiben

$$H = \sum_{n=1}^N H^{(n)}. \quad (2.22)$$

Für Produktzustände $|\psi\rangle$ ist die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (2.23)$$

äquivalent zu den N Gleichungen (2.20).

Beweis: 1. [(2.20) \Rightarrow (2.23)] Unter der Voraussetzung von (2.20) gilt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \cdots |\psi_N\rangle \\ &= \sum_n |\psi_1\rangle \cdots |\psi_{n-1}\rangle (i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_n\rangle) |\psi_{n+1}\rangle \cdots |\psi_N\rangle \\ &= \sum_n |\psi_1\rangle \cdots |\psi_{n-1}\rangle (H^{(n)} |\psi_n\rangle) |\psi_{n+1}\rangle \cdots |\psi_N\rangle \\ &= \sum_n H^{(n)} |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \cdots |\psi_N\rangle = H |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

2. [(2.20) \Leftarrow (2.23)] Aus (2.23) folgt

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_n H^{(n)} (t-t_0)\right) |\psi_1(t_0)\rangle \cdots |\psi_N(t_0)\rangle. \quad (2.25)$$

Nun kommutieren $H^{(m)}$ und $H^{(n)}$ für $m \neq n$ miteinander und daher ist

$$|\psi(t)\rangle = \prod_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H^{(n)} (t-t_0)\right) |\psi_1(t_0)\rangle \cdots |\psi_N(t_0)\rangle = \prod_n \left(e^{-iH^{(n)}(t-t_0)/\hbar} |\psi_n(t_0)\rangle\right). \quad (2.26)$$

Wir können also $|\psi(t)\rangle$ schreiben als

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle \cdots |\psi_N(t)\rangle \quad (2.27)$$

mit

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-iH^{(n)}(t-t_0)/\hbar} |\psi_n(t_0)\rangle, \quad (2.28)$$

was äquivalent zu Gl. (2.20) ist. \square

Allgemeine, nicht unbedingt separable, Zustände $|\psi\rangle$ können wir nach einer Produktbasis $\{|\nu_1\rangle |\nu_2\rangle \cdots |\nu_N\rangle\}$ entwickeln. Die Zeitentwicklung jedes Einteilchenzustands $|\nu_n\rangle$ ist durch Gl. (2.20) bestimmt, so dass auch die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ eindeutig bestimmt ist. Wird sie allgemein durch die Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung (2.23) korrekt beschrieben? Ja, denn sonst ließe sich in der Entwicklung nach der Produktbasis zumindest ein (Produkt-) Zustand finden, der Gl. (2.23) nicht erfüllt. Wir hatten aber gezeigt, dass Gl. (2.23) für Produktzustände aus Gl. (2.20) folgt. Es ergibt sich ein Widerspruch.

Bisher haben wir wechselwirkungsfreie Teilchen betrachtet. Jetzt nehmen wir eine Wechselwirkung hinzu. Mit „Wechselwirkung“ meinen wir, dass die Dynamik eines Teilchens von den Zuständen der übrigen abhängt. Der Hamiltonian für ein wechselwirkendes System muss von der Form $H = \sum_n H^{(n)}$ abweichen, denn diese ist, wie eben gezeigt, äquivalent zu unabhängiger Dynamik der einzelnen Teilchen. Der Hamiltonian für ein wechselwirkendes N -Teilchen-System hat also allgemein die Form

$$H = \sum_{n=1}^N H_0^{(n)} + V, \quad (2.29)$$

wobei $V \neq 0$ ein hermitescher Operator auf \mathcal{H}_N ist, der sich nicht in Summanden zerlegen lässt, die jeweils nur in einem der Faktorräume wirken.

Als Beispiel nehmen wir die Coulomb-Wechselwirkung. Gemäß Gl. (2.16) lautet die Coulomb-Energie von N Teilchen mit den Ladungen q_n ,

$$V_C = \sum_{n < n'} V_C^{(n,n')} = \sum_{n < n'} \frac{q_n q_{n'}}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 s_n d^3 s_{n'} \frac{1}{|\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_{n'}|} |\mathbf{s}_n\rangle \langle \mathbf{s}_n| \otimes |\mathbf{s}_{n'}\rangle \langle \mathbf{s}_{n'}|$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \frac{q_n q_{n'}}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 s_n d^3 s_{n'} \frac{1}{|\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_{n'}|} |\mathbf{s}_n\rangle\langle\mathbf{s}_n| \otimes |\mathbf{s}_{n'}\rangle\langle\mathbf{s}_{n'}|. \quad (2.30)$$

Die Beschränkung auf $n < n'$ bzw. der Faktor $1/2$ verhindern Doppelzählung. Mehrteilchensysteme mit Wechselwirkung lassen sich nur in sehr speziellen Fällen exakt lösen. Mit „exakter Lösung“ ist hier gemeint, dass die Eigenzustände und Eigenwerte von H in geschlossener Form angegeben werden können. Wir werden uns später mit genäherten Lösungen beschäftigen.

2.2 Ununterscheidbare Teilchen

Bei der Diskussion der Quantenmechanik für Mehrteilchensysteme in Abschnitt 2.1 sind wir nicht auf Hinweise dafür gestoßen, dass diese Beschreibung unvollständig sein könnte. Hier werden wir aber sehen, dass sie unvollständig ist, und dass die (historisch zunächst implizite) Annahme der *Unterscheidbarkeit* der Teilchen das Hauptproblem darstellt.

Es sei daran erinnert, dass die Konstruktion des N -Teilchen-Zustandsraums Postulatcharakter hat und daher einer experimentellen Überprüfung bedarf. Und dabei zeigen sich Schwierigkeiten:

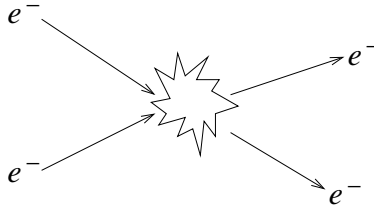
- Die Spektren – und überhaupt die meisten Eigenschaften – von Atomen und Ionen mit mehreren Elektronen lassen sich nur unter der *ad-hoc* Annahme verstehen, dass zwei Elektronen nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen können (Pauli-Prinzip), wobei eine zusätzliche zweiwertige Quantenzahl (der „Spin“, genauer eine Komponente des Spins) auftritt. Ein solches Verbot folgt nicht aus der bisher entwickelten Theorie.
- Elektronen in Metallen tragen für hinreichend niedrige Temperaturen (typischerweise für $T \lesssim 500$ K – die erforderlichen Temperaturen sind also nicht sehr niedrig!) vernachlässigbar wenig zur spezifischen Wärme bei. Das ist nicht zu verstehen, wenn Elektronen unterscheidbare Teilchen im Sinne des vorigen Abschnitts sind. Wieder ist das Pauli-Prinzip zur Erklärung notwendig.
- Das Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation, z. B. in kalten Gasen, lässt sich mit der bisherigen Theorie nicht verstehen.
- Die Mischungsentropie für zwei Stoffmengen stimmt nur mit der Vorhersage der klassischen Statistischen Physik überein, wenn sie aus unterschiedlichen Stoffen bestehen (z. B. Stickstoff und Sauerstoff). Handelt es sich dagegen um denselben Stoff, verschwindet die Mischungsentropie, im Widerspruch zur Vorhersage (*Gibbssches Paradoxon*).

Die Experimente zeigen, dass diese Probleme nur auftreten, wenn mehrere Teilchen vorhanden sind, die sich in keiner ihrer intrinsischen Eigenschaften unterscheiden. Das legt nahe, dass wir die implizite Annahme der *Unterscheidbarkeit* der Teilchen hinterfragen müssen.

In Umkehrung der Definition unterscheidbarer Teilchen nennen wir zwei Teilchen *ununterscheidbar*, wenn wir sie experimentell aus Prinzip nicht unterscheiden können. Das bedeutet, dass die Teilchen in allen *intrinsischen* Eigenschaften übereinstimmen. Intrinsische Eigenschaften sind solche, die sich nicht zeitlich ändern. Also sind Ort und Impuls eines Teilchens sicher keine intrinsischen Eigenschaften, Ruhemasse, Ladung und Gesamtspin dagegen schon. Dies zeigt aber, dass die Ununterscheidbarkeit von Teilchen nicht unabhängig von der experimentellen Situation ist: Zwei Atomkerne desselben Nuklids im Grundzustand sind ununterscheidbar. Wenn wir aber mit Gammastrahlung hinreichend hoher Energie einen der Kerne anregen, so dass er z. B. einen anderen Kernspin erhält, werden sie unterscheidbar. Elementare Teilchen wie Elektronen sind dagegen ununterscheidbar, solange sie überhaupt existieren.

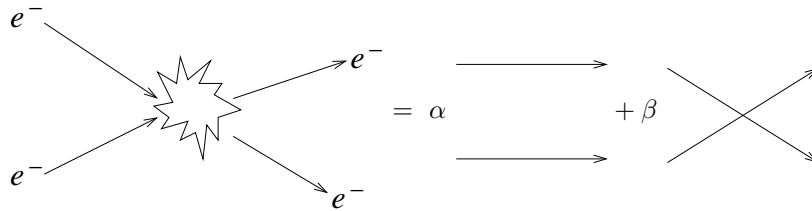
Ununterscheidbare Teilchen werden in der Physik gelegentlich auch als *identisch* bezeichnet. Dieser Begriff ist weniger gut geeignet, da er in der Philosophie mit strengerer Bedeutung verwendet wird: Ein Ding ist mit sich selbst identisch, aber nicht mit irgendeinem anderen Ding. In diesem Sinn würde Identität zweier Elektronen bedeuten, dass tatsächlich nur ein Elektron existiert. Das ist aber nicht, was mir meinen, denn ein Zwei-Elektronen-System hat eine Ladung von $-2e$ und nicht $-e$. Ununterscheidbare Teilchen sind also zumindest zählbar.

Man kann bei einem Streuexperiment mit zwei Elektronen aus Prinzip nicht entscheiden, welches herauskommende Elektron welchem ursprünglichen entspricht.



Das ist ähnlich zum Doppelspaltexperiment mit Elektronen (oder auch Photonen). Dort ergibt sich die Ein-Teilchen-Wellenfunktion hinter dem Doppelspalt durch die Interferenz der von den beiden Spalten ausgehenden Wellen. Das gilt aber nur, wenn wir nicht messen, durch welchen Spalt die Elektronen fliegen. Also: Wenn wir nicht zwischen den beiden Wegen unterscheiden (obwohl wir es hier könnten), ist die Lösung der Schrödinger-Gleichung die Superposition der Lösungen für die beiden Wege.

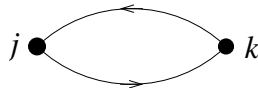
Per Analogieschluss vermuten wir, dass die Lösung für die Streuung zweier Elektronen aneinander, in welchem Fall wir aus Prinzip nicht zwischen den beiden „Wegen“ unterscheiden können, ebenfalls die Superposition der beiden Möglichkeiten ist:



Die Koeffizienten α , β mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ sind noch zu bestimmen.

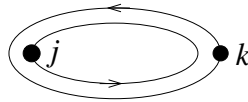
Welche Konsequenzen hat die Ununterscheidbarkeit für die Wellenfunktion? Wenn zwei Teilchen aus Prinzip nicht unterscheidbar sind, muss der Zwei-Teilchen-Zustand gleich bleiben, wenn die beiden Teilchen vertauscht werden. Damit ist hier gemeint, dass die Nummern (Label) der beiden Teilchen vertauscht werden: Teilchen 1 am Ort \mathbf{r}_1 und Teilchen 2 am Ort \mathbf{r}_2 ist derselbe Zustand wie Teilchen 2 am Ort \mathbf{r}_1 und Teilchen 1 am Ort \mathbf{r}_2 . Die Wellenfunktion darf sich bei dieser Vertauschung also nur um einen Zahlenfaktor $\lambda \in \mathbb{C}$ ändern:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.31)$$



Zweimalige Vertauschung ist die Identitätsoperation, also gilt

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda^2 \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.32)$$



Damit ergeben sich

$$\lambda^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm 1 \quad (2.33)$$

als einzige Möglichkeiten. Die N -Teilchen-Wellenfunktion muss demnach entweder symmetrisch in allen Paaren von Argumenten (*total symmetrisch*) oder antisymmetrisch in allen Paaren von Argumenten (*total antisymmetrisch*) sein. Für $\lambda = +1$ (symmetrischer Fall) nennen wir die Teilchen *Bosonen*, für $\lambda = -1$ (antisymmetrischer Fall) *Fermionen*. Beachte, dass diese Definition keinen Bezug auf den Spin der Teilchen nimmt.

Das eben angegebene Argument nimmt auch keinen Bezug auf die Dimensionalität des Raumes und gilt insbesondere auch in zwei Dimensionen. Es gibt aber noch eine andere Art, zwei Teilchen zu vertauschen, nämlich sie tatsächlich umeinander herum zu bewegen, so dass am Ende ein Teilchen am Startpunkt des anderen ist. Für

diesen Prozess unterscheiden sich drei (oder mehr) Raumdimensionen von ein oder zwei Dimensionen. Bei der zweimaligen tatsächlichen Vertauschung bewegt sich eines der Teilchen genau einmal um das andere herum. In zwei Dimensionen kann man die Bahnen, die die beiden Teilchen beschreiben, nicht stetig so verformen, dass sie nicht mehr umeinander herum laufen. Dazu müsste man eine Bahn durch das andere Teilchen hindurch schieben, was eine qualitative Änderung der Bahnen darstellt. Daher ist in zwei Dimensionen die Anzahl der zweifachen Vertauschungen eine topologische Invariante – sie kann durch stetige Verformung der Bahnen nicht geändert werden. Das ist in drei (und mehr) Dimensionen anders, hier kann man die Bahnen immer zu einem Punkt zusammenziehen. Daher muss in zwei Dimensionen der Zustand, der durch zweifache tatsächliche Vertauschung entsteht, nicht mit dem ursprünglichen Zustand identisch sein. Dann folgt, dass der entsprechende Faktor λ zwar aufgrund der Normiertheit der Zustände den Betrag eins haben muss, aber eine beliebige Phase haben kann. Man spricht von *Anyonen*.

In einer Dimension kann man ebenfalls keine Einschränkungen an den Faktor λ herleiten, außer die aus der Normiertheit folgende Bedingung $|\lambda| = 1$. Um hier die Phase bei tatsächlicher Vertauschung diskutieren und messen zu können, muss man verhindern, dass sich die Teilchen durchdringen müssen, um die Plätze zu tauschen. Man muss also einen komplizierteren „Rangierbahnhof“ für die Teilchen konstruieren. Anyonen treten in Randzuständen beim fraktionellen Quanten-Hall-Effekt auf.

Das wichtige *Spin-Statistik-Theorem*, das wir hier nicht beweisen, zeigt, dass die Symmetrie oder Antisymmetrie der Wellenfunktion in drei Raumdimensionen mit dem Spin der Teilchen zusammenhängt:

- Bosonen ($\lambda = +1$): ganzzahliger Spin $S = 0, 1, 2, \dots$,
- Fermionen ($\lambda = -1$): halbzahliger Spin $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

Lorentz-Invarianz ist eine der Voraussetzungen des Spin-Statistik-Theorems, es kann schon deshalb nicht im Rahmen der bisher entwickelten nicht relativistischen Quantenmechanik bewiesen werden.

Elementare Materieteilchen sind Fermionen: Quarks und Leptonen. Elementare Bosonen vermitteln Wechselwirkungen (Photonen, W^\pm und Z^0 , Gluonen, hypothetische Gravitonen) und treten als Anregungen des Higgs-Feldes auf, das für die elektroschwache Symmetriebrechung wichtig ist. Zusammengesetzte Materieteilchen können Fermionen (z. B. Baryonen) oder Bosonen (z. B. Mesonen) sein, je nach ihrem Gesamtspin, der sich nach den üblichen Regeln der Zusammensetzung von Drehimpulsen ergibt. Effektive Anregungen in kondensierter Materie haben oft, aber nicht immer, bosonischen Charakter (Phononen, Magnonen).

2.2.1 Symmetrisierte und antisymmetrisierte Zustände

Die oben gefundene Darstellung der Vielteilchen-Wellenfunktion,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} \langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N), \quad (2.34)$$

ist für ununterscheidbare Teilchen problematisch. Diese Wellenfunktion erfüllt i. A. weder die fermionische noch die bosonische Relation für Vertauschungen der \mathbf{r}_j . Diese Relationen führen auf Nebenbedingungen für die Koeffizienten $\langle \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N | \psi \rangle$. Es ist wünschenswert, diese Bedingungen gleich in die Basis einzubauen, so dass alle daraus superponierten Zustände die Bedingungen erfüllen. Das kann man durch (Anti-) Symmetrisierung erreichen: Wir definieren

$$\hat{S}_\pm u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) := \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \cdots}} \begin{vmatrix} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) & u_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & u_{\nu_1}(\mathbf{r}_N) \\ u_{\nu_2}(\mathbf{r}_1) & u_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & u_{\nu_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{\nu_N}(\mathbf{r}_1) & u_{\nu_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}_\pm, \quad (2.35)$$

wobei $(N! n_1! n_2! \cdots)^{-1/2}$ ein Normierungsfaktor ist (dazu gleich mehr) und $|\dots|_\pm$ die Determinante:

$$\hat{S}_- u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \cdots}} \sum_{p \in S_N} \text{sgn}(p) u_{\nu_1}(\mathbf{r}_{p_1}) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_{p_N}). \quad (2.36)$$

Hier ist S_N die Gruppe aller Permutationen (p_1, p_2, \dots, p_N) der N Elemente $(1, 2, \dots, N)$ – die sogenannte *Symmetrische Gruppe* – und $\text{sgn}(p)$ das Vorzeichen der Permutation p . [Beispiel: $\text{sgn}(2, 1, 3) = -1$, da eine Vertauschung nötig ist und eins ungerade ist. Man schreibt auch $(-1)^p$.] Der Ausdruck in Gl. (2.36) heißt *Slater-Determinante*. Die Determinante einer Matrix ist bekanntlich antisymmetrisch unter Vertauschung zweier Spalten der Matrix, wie auch Gl. (2.36) zeigt. Daher ist die Funktion $\hat{S}_- u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N)$ total antisymmetrisch. Das untere Vorzeichen $(-)$ ist demnach für Fermionen zu wählen.

Wir sehen sofort, dass für zwei Fermionen in gleichen Einteilchenzuständen, z. B. $\nu_j = \nu_k$, die j -te und k -te Zeile der Determinante gleich sind. Die Zeilen sind also linear abhängig. Die Determinante verschwindet in diesem Fall, $|\dots|_- = 0$. Null ist aber kein Zustand. Es gibt also keine Zustände mit $\nu_j = \nu_k$ für $j \neq k$. Das ist die übliche Formulierung des *Pauli-Prinzips*. Sie folgt also aus der fundamentalen Bedingung der Antisymmetrie der Wellenfunktion.

Außerdem erkennen wir, dass für zwei Fermionen am gleichen Ort, z. B. $\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_k$, die j -te und k -te Spalte der Determinante gleich sind, so dass die Determinante ebenfalls verschwindet. Also finden wir, dass sich zwei ununterscheidbare Fermionen nicht an demselben Ort befinden können. Diese Folgerung gilt aber nur, wenn die Fermionen keine inneren Freiheitsgrade haben, also insbesondere keinen Spin. Wir werden noch sehen, dass sich zwei Fermionen mit unterschiedlichen Spins (genauer: unterschiedlichen S^z -Quantenzahlen) durchaus an demselben Ort aufhalten können.

Andererseits ist $|\dots|_+$ die sogenannte *Permanente*:

$$\hat{S}_+ u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \cdots}} \sum_{p \in S_N} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_{p_1}) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_{p_N}), \quad (2.37)$$

d. h. die „vorzeichenlose Determinante“. Man bezeichnet sie gelegentlich als *Slater-Permanente*. Die Gleichung zeigt, dass die Funktion $\hat{S}_+ u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N)$ total symmetrisch ist. Sie gilt also für Bosonen.

Wir haben die (anti-) symmetrisierten Zustände in der Ortsdarstellung eingeführt, da die Bedeutung von Symmetrie bzw. Antisymmetrie unter Vertauschung hier am anschaulichsten ist. Die Argumente übertragen sich aber praktisch unverändert auf beliebige Einteilchenbasen: Zunächst muss für jeden Zustand $|\psi\rangle$ ununterscheidbarer Teilchen gelten

$$\langle \nu_1, \dots, \nu_k, \dots, \nu_j, \dots, \nu_N | \psi \rangle = \lambda \langle \nu_1, \dots, \nu_j, \dots, \nu_k, \dots, \nu_N | \psi \rangle \quad (2.38)$$

und daher $\lambda^2 = 1$. Zu einer beliebigen Einteilchenbasis $\{|\nu\rangle\}$ definieren wir (anti-) symmetrisierte (N -Teilchen-) Basiszustände

$$\hat{S}_\pm |\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle := \frac{1}{\sqrt{N! n_1! n_2! \cdots}} \begin{vmatrix} |\nu_1\rangle^{(1)} & |\nu_1\rangle^{(2)} & \cdots & |\nu_1\rangle^{(N)} \\ |\nu_2\rangle^{(1)} & |\nu_2\rangle^{(2)} & \cdots & |\nu_2\rangle^{(N)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\nu_N\rangle^{(1)} & |\nu_N\rangle^{(2)} & \cdots & |\nu_N\rangle^{(N)} \end{vmatrix}_\pm, \quad (2.39)$$

wobei hier der Superskript (j) die Teilchen numeriert. Dieser Superskript ist redundant, wenn wir die Reihenfolge der Faktoren in $|\nu_{p_1}\rangle |\nu_{p_2}\rangle \cdots |\nu_{p_N}\rangle$ nicht verändern. Existieren z. B. nur zwei Einteilchenzustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$, so ist

$$\hat{S}_\pm |\uparrow, \downarrow\rangle = \frac{|\uparrow\rangle^{(1)} |\downarrow\rangle^{(2)} \pm |\downarrow\rangle^{(1)} |\uparrow\rangle^{(2)}}{\sqrt{2}}. \quad (2.40)$$

Wir begründen jetzt den Normierungsfaktor $(N! n_1! n_2! \cdots)^{-1/2}$ der (anti-) symmetrisierten Zustände. Hier ist n_ν die Besetzungszahl des Einteilchenzustands $|\nu\rangle$, d. h., n_ν gibt an, wie oft ν in (ν_1, ν_2, \dots) vorkommt. Für Fermionen kann das natürlich nur gar nicht oder einmal sein, so dass sich der Vorfaktor zu $1/\sqrt{N!}$ vereinfacht (beachte $0! = 1! = 1$). ν_1, ν_2, \dots sind hier jeweils vollständige Sätze von kompatiblen Einteilchenquantenzahlen. Natürlich müssen nicht alle erlaubten Einteilchenzustände tatsächlich realisiert sein. Falls keine zwei ν_i übereinstimmen (dies wird für Fermionen durch das Pauli-Prinzip erzwungen), ist die Determinante bzw. Permanente in Gl. (2.39) eine Superposition von $N!$ orthonormalen Zustandsvektoren, da es $N!$ Permutationen von N Objekten gibt. Daher ergibt sich für diesen Fall sofort ein Normierungsfaktor von $1/\sqrt{N!}$.

Jedoch können für Bosonen Quantenzahlen mehrfach vorkommen. Die Vertauschung von Teilchen mit identischen Quantenzahlen lässt den Zustandsvektor aber unverändert. Kommt ν_i z. B. n_{ν_i} -mal vor, so bilden die Terme

in der Permanente Gruppen von $n_{\nu_i}!$ identischen Vektoren, die durch solche Vertauschungen verknüpft sind. Diese werden alle mit positivem Vorzeichen addiert. Also besteht die Permanente aus $N!/(n_1!n_2!\dots)$ orthogonalen Vektoren der Länge $n_1!n_2!\dots$. Deren Summe hat die Norm

$$\sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!\dots} (n_1!n_2!\dots)^2} = \sqrt{N!n_1!n_2!\dots}, \quad (2.41)$$

was den Normierungsfaktor erklärt.

Da die (Anti-) Symmetrisierung eines (anti-) symmetrischen Zustands diesen nicht ändert, kann sich $\hat{S}_{\pm}^2 |\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle$ von $\hat{S}_{\pm} |\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle$ nur durch einen Zahlenfaktor unterscheiden. Man prüft leicht nach, dass dieser gleich eins ist. Da diese Eigenschaft für alle Basisvektoren $|\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N\rangle$ gilt, folgt sie für alle $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_N$. Also sind die Operatoren \hat{S}_{\pm} *idempotent*:

$$\hat{S}_{\pm}^2 = \hat{S}_{\pm}. \quad (2.42)$$

Man prüft auch leicht nach, dass die \hat{S}_{\pm} hermitesch sind. Damit sind \hat{S}_{\pm} *Projektionsoperatoren*.

Da für $N \geq 2$ ein nicht verschwindender Vektor nicht zugleich total symmetrisch und total antisymmetrisch sein kann, gilt

$$\hat{S}_+\hat{S}_- = \hat{S}_-\hat{S}_+ = 0, \quad (2.43)$$

die beiden Operatoren projizieren also auf orthogonale Unterräume. Dabei ist $\hat{S}_+\mathcal{H}_N$ ($\hat{S}_-\mathcal{H}_N$) der Unterraum der total symmetrischen (antisymmetrischen) Zustände, d. h. der für ununterscheidbare Bosonen (Fermionen) möglichen Zustände. Hat der Einteilchen-Hilbertraum \mathcal{H} endliche Dimension d , so sind die Dimensionen der Vielteilchen-Hilberträume (wir geben auch die entsprechende kombinatorische Problemstellung an):

- $\dim(\mathcal{H}_N) = d^N$ (N unterscheidbare Kugeln in d Urnen),
- $\dim(\hat{S}_+\mathcal{H}_N) = \binom{N+d-1}{N}$ (N ununterscheidbare Kugeln in d Urnen),
- $\dim(\hat{S}_-\mathcal{H}_N) = \binom{d}{N}$ (N ununterscheidbare Kugeln in d Urnen, wobei jede Urne höchstens eine Kugel enthalten kann).

Für $N = 2$ gilt

$$\dim(\hat{S}_+\mathcal{H}_2) + \dim(\hat{S}_-\mathcal{H}_2) = \binom{d+1}{2} + \binom{d}{2} = \frac{(d+1)!}{2(d-1)!} + \frac{d!}{2(d-2)!} = \frac{d(d+1) + d(d-1)}{2} = d^2 = \dim(\mathcal{H}_2), \quad (2.44)$$

daher spannen $\hat{S}_+\mathcal{H}_2$ und $\hat{S}_-\mathcal{H}_2$ den gesamten Raum \mathcal{H}_2 auf. Für $N \geq 3$ gilt das nicht, z. B. ist

$$\dim(\hat{S}_+\mathcal{H}_3) + \dim(\hat{S}_-\mathcal{H}_3) = \frac{d^3}{3} + \frac{2d}{3} < d^3 = \dim(\mathcal{H}_3). \quad (2.45)$$

Für große Teilchenzahlen N wird \mathcal{H}_N exponentiell größer (hinsichtlich der Dimension) als $\hat{S}_+\mathcal{H}_N$ und dieser als $\hat{S}_-\mathcal{H}_N$.

Wir können jetzt nach den (anti-) symmetrisierten Basiszuständen entwickeln:

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} C_{\nu_1, \dots, \nu_N} \hat{S}_{\pm} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle. \quad (2.46)$$

In Ortsdarstellung erhalten wir entsprechend

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} C_{\nu_1, \dots, \nu_N} \hat{S}_{\pm} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \cdots u_{\nu_N}(\mathbf{r}_N). \quad (2.47)$$

Diese Darstellungen sind zwar korrekt, aber irreführend, da die Zustände $\hat{S}_{\pm} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle$ nicht linear unabhängig sind. Das ist klar, weil der projizierte Hilbertraum $\hat{S}_{\pm}\mathcal{H}_N$ geringere Dimension als \mathcal{H}_N hat. Daher sind die

Koeffizienten C_{ν_1, \dots, ν_N} nicht eindeutig – verschiedene Sätzen von Koeffizienten beschreiben denselben Vektor in $\hat{S}_{\pm} \mathcal{H}_N$. Man könnte eine Basis von $\hat{S}_{\pm} \mathcal{H}_N$ durch Weglassen der überzähligen Elemente erzeugen. Das ist ziemlich kompliziert.

Mit einer solchen Beschränkung erhalten wir eine Basis von $\hat{S}_{\pm} \mathcal{H}_N$. Es ist wichtig, sich klarzumachen, dass nicht alle (anti-) symmetrischen Vielteilchenzustände (anti-) symmetrisierte Produktzustände der in Gl. (2.35) bzw. (2.39) gegebenen Form sind. Vielmehr sind allgemeine Zustände Superpositionen solcher Basiszustände. Für *unterscheidbare* Teilchen hatten wir Superpositionen von Produktzuständen als *verschränkt* bezeichnet. Das Konzept der Verschränkung *ununterscheidbarer* Teilchen ist problematisch und die geeignete Definition ist umstritten. Man erkennt an einem einfachen Beispiel, dass für ununterscheidbare Teilchen neue Überlegungen erforderlich sind: Die (einzig mögliche) Wellenfunktion für zwei ununterscheidbare Bosonen in den Einteilchenzuständen $|u\rangle$ und $|v\rangle$ lautet

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{u(\mathbf{r}_1)v(\mathbf{r}_2) + v(\mathbf{r}_1)u(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}}. \quad (2.48)$$

Wären die Teilchen unterscheidbar, so würden wir diesen Zustand als verschränkt bezeichnen. Aber hier entsteht er einfach durch die Symmetrisierung – die beiden ununterscheidbaren Bosonen „können nicht anders“. Würden wir das Ergebnis der (Anti-) Symmetrisierung als verschränkt bezeichnen, so wären *alle* Zustände mit $N \geq 2$ ununterscheidbaren Teilchen verschränkt und der Begriff wäre inhaltsleer und nutzlos. Ein naheliegender Ausweg ist, nur die darüber hinaus gehende Superposition von (anti-) symmetrisierten Produktzuständen als Verschränkung zu verstehen, so z. B. in J. Schliemann *et al.*, Phys. Rev. **64**, 022303 (2001). Eine restriktivere Sichtweise ist, bei ununterscheidbaren Teilchen das Konzept der Verschränkung auf fundamentalem Niveau abzulehnen. Verschränkung kann demnach nur für unterscheidbare Teilchen sinnvoll definiert werden. Aber ununterscheidbare Teilchen können *effektiv* als unterscheidbar beschrieben werden, wenn sie sich durch gewisse (nicht intrinsische) Quantenzahlen unterscheiden, z. B. wenn sie an makroskopisch verschiedenen Orten lokalisiert sind. Dann kann man über verschränkte Zustände sprechen, z. B. der Spins von zwei räumlich getrennten Photonen oder Elektronen. Wir können diese Debatte hier nicht weiter besprechen.

2.2.2 Das Pauli-Prinzip

Wir kommen nochmals auf das Pauli-Prinzip zurück und betrachten speziell Spin-1/2-Teilchen, z. B. Elektronen. Ihr Einteilchen-Hilbertraum lässt sich als Produkt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Ort}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Spin}} \quad (2.49)$$

schreiben, wobei \mathcal{H}_{Ort} den Ort des Teilchens und $\mathcal{H}_{\text{Spin}}$ seinen Spin betrifft. Der Faktorraum

$$\mathcal{H}_{\text{Spin}} = \text{span}(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle) \quad (2.50)$$

ist für einen Spin der Länge 1/2 zweidimensional. Ist $\{|\nu\rangle\}$ eine Einteilchenbasis von \mathcal{H}_{Ort} , so ist die Produktbasis

$$\{|\nu, \uparrow\rangle, |\nu, \downarrow\rangle\} \quad (2.51)$$

eine Einteilchenbasis von \mathcal{H} . Den räumlichen Anteil können wir in der Ortsdarstellung schreiben:

$$\langle \mathbf{r} | \nu, \sigma \rangle =: u_{\nu}(\mathbf{r}) | \sigma \rangle \quad \text{mit} \quad \sigma = \uparrow, \downarrow. \quad (2.52)$$

Aus der Einteilchenbasis können wir wie beschrieben eine Vielteilchenbasis als Produktbasis konstruieren.

Nun muss zusätzlich jeder Zustand ununterscheidbarer Fermionen total antisymmetrisch sein. Daraus folgt für die Koeffizienten in der Entwicklung nach der Produktbasis

$$\langle \dots, \nu_k, \sigma_k, \dots, \nu_j, \sigma_j, \dots | \psi \rangle = - \langle \dots, \nu_j, \sigma_j, \dots, \nu_k, \sigma_k, \dots | \psi \rangle. \quad (2.53)$$

Wir betrachten nun speziell *zwei* ununterscheidbare Spin-1/2-Teilchen,

$$\langle \nu_2, \sigma_2, \nu_1, \sigma_1 | \psi \rangle = - \langle \nu_1, \sigma_1, \nu_2, \sigma_2 | \psi \rangle. \quad (2.54)$$

Oft haben wir es mit Situationen zu tun, in denen der Vielteilchenzustand eine bestimmte Parität (symmetrisch oder antisymmetrisch) bezüglich Vertauschung beschränkt auf die räumlichen Freiheitsgrade besitzt. Das ist z. B. der Fall, wenn die räumlichen Wellenfunktionen der beiden Teilchen übereinstimmen. Allgemein gibt es zwei Möglichkeiten:

- Der räumliche Zustand ist symmetrisch,

$$\langle \nu_2, \sigma_2, \nu_1, \sigma_1 | \psi \rangle = \langle \nu_1, \sigma_2, \nu_2, \sigma_1 | \psi \rangle. \quad (2.55)$$

Da der Gesamtzustand antisymmetrisch sein muss, siehe Gl. (2.54), folgt

$$\langle \nu_1, \sigma_2, \nu_2, \sigma_1 | \psi \rangle = -\langle \nu_1, \sigma_1, \nu_2, \sigma_2 | \psi \rangle, \quad (2.56)$$

der Spin-Zustand ist also antisymmetrisch. Beispiele sind, in Ortsdarstellung für den räumlichen Anteil,

$$\left. \begin{array}{l} u(\mathbf{r}_1)u(\mathbf{r}_2) \\ \frac{u(\mathbf{r}_1)v(\mathbf{r}_2) + v(\mathbf{r}_1)u(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}} \\ v(\mathbf{r}_1)v(\mathbf{r}_2) \end{array} \right\} \times \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.57)$$

wobei u und v orthonormale Wellenfunktionen sind. Diese Zustände sind alle symmetrisch im Ortsraum und antisymmetrisch im Spin. Der Gesamt-Spin ist 0. Die antisymmetrische Kombination zweier Spins $1/2$ nennt man *Singulett*-Zustand, weil es nur *eine* solche Kombination gibt. Der erste (oder dritte) Fall in (2.57) beschreibt offenbar die Situation, dass sich zwei Elektronen in demselben Orbital befinden, z. B. im $1s$ -Orbital für den 1^1S -Grundzustand von Helium. Hier haben die beiden Elektronen offensichtlich eine nicht verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte an demselben Ort, wie oben in 2.2.1 angekündigt.

- Der räumliche Zustand ist antisymmetrisch,

$$\langle \nu_2, \sigma_2, \nu_1, \sigma_1 | \psi \rangle = -\langle \nu_1, \sigma_2, \nu_2, \sigma_1 | \psi \rangle. \quad (2.58)$$

Dann folgt analog

$$\langle \nu_1, \sigma_2, \nu_2, \sigma_1 | \psi \rangle = \langle \nu_1, \sigma_1, \nu_2, \sigma_2 | \psi \rangle, \quad (2.59)$$

der Spin-Zustand ist also symmetrisch. Beispiele sind

$$\frac{u(\mathbf{r}_1)v(\mathbf{r}_2) - v(\mathbf{r}_1)u(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}} \times \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right. . \quad (2.60)$$

Diese Zustände sind alle antisymmetrisch im Ortsraum und symmetrisch im Spin. Der Gesamt-Spin ist 1. Die symmetrischen Kombinationen zweier Spins $1/2$ nennt man *Triplet*-Zustände, weil es *drei* davon gibt.

Allgemein gilt: der Singulett- (Triplet-) Zustand zweier Elektronen hat eine symmetrische (antisymmetrische) räumliche Wellenfunktion. Es folgt die aus der Schule und den Einführungsvorlesungen bekannte Formulierung des Pauli-Prinzips: Zwei Elektronen können nicht zugleich in demselben Spin- und Ortszustand sein.

Es sei angemerkt, dass ein Mehrteilchenzustand keine definierte Parität unter Vertauschungen ausschließlich im Ortsraum oder im Spin haben *muss*. Zum Beispiel ist

$$\frac{u(\mathbf{r}_1)v(\mathbf{r}_2) |\uparrow\downarrow\rangle - v(\mathbf{r}_1)u(\mathbf{r}_2) |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.61)$$

ein erlaubter, weil antisymmetrischer, Zustand für zwei ununterscheidbare Elektronen. Er ist aber weder symmetrisch noch antisymmetrisch unter Vertauschung der Ortskoordinaten. Das entsprechende gilt für die Spins, insbesondere handelt es sich nicht um einen Singulett-Zustand, obwohl der Gesamt-Spin verschwindet. Da dieser Zustand kein Produkt eines räumlichen und eines Spin-Zustands der beiden Elektronen ist, kann man sagen, dass der räumliche und der Spin-Zustand verschränkt sind.

2.2.3 Observable

Als nächstes wollen wir Observable betrachten, insbesondere den Hamiltonian. Die Diskussion von Observablen für unterscheidbare Teilchen ist auch für ununterscheidbare Teilchen gültig, nur müssen sie mit der Ununterscheidbarkeit der Teilchen vereinbar sein. Observable dürfen natürlich nicht gestatten, ununterscheidbare Teilchen zu unterscheiden. Wir betrachten konkret Hamiltonians von der Form

$$H = T + V = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2.62)$$

mit $\mathbf{p}_i = -i\hbar\nabla_i \equiv -i\hbar\partial/\partial\mathbf{r}_i$ in Ortsdarstellung. Wir haben hier angenommen, dass kein Vektorpotential vorliegt. Ununterscheidbare Teilchen müssen natürlich identische Massen haben, so dass T *symmetrisch* unter Vertauschung von Teilchen ist. Analog muss V symmetrisch unter Vertauschung sein, sonst wären die Teilchen experimentell unterscheidbar. Damit ist der gesamte Hamiltonian symmetrisch. Beachte, dass diese Aussage für Bosonen und für Fermionen gilt.

V kann i. A. Beiträge enthalten, die von 1, 2, 3, ... Einteilchenzuständen abhängen. Wir zerlegen V nach diesen Beiträgen,

$$V = V_1 + V_2 + V_3 + \dots \quad (2.63)$$

Physikalisch ist V_1 das äußere Potential, V_2 ist die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung, V_3 die Drei-Teilchen-Wechselwirkung usw. Wir betrachten die diagonalen Matrixelemente in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &:= \langle \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N | V | \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N \rangle \\ &= \sum_i V_1(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \frac{1}{3!} \sum_{\substack{ijk \\ i \neq j \neq k \neq i}} V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots, \end{aligned} \quad (2.64)$$

was explizit symmetrisch ist. Die Faktoren $1/n!$ korrigieren die Mehrfachzählung derselben Wechselwirkung. Beachte, dass wir z. B. Terme der Art $V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i)$ ausschließen. Solche Terme sind bereits in V_1 enthalten. Wir nehmen an, dass V keine plötzlichen Sprünge von Teilchen von einem Ort zu einem anderen beschreibt, d. h., dass nicht diagonale Matrixelemente in der Ortsbasis verschwinden.

Beispiel: Die Coulomb-Wechselwirkung lautet für Teilchen mit der Ladung $\pm e$,

$$V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = V_C(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.65)$$

In der Praxis werden wir es nicht mit n -Teilchen-Wechselwirkungen für $n > 2$ zu tun haben.

Einteilchenobservable

Wir wollen Observable, insbesondere den Hamiltonian, bezüglich einer beliebigen Einteilchenbasis $\{|\nu\rangle\}$ ausdrücken können. Für das Potential finden wir

$$V_1 \equiv \sum_i V_i^{(1)} = \sum_i \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \langle \nu_1, \dots, \nu_N | V_i^{(1)} \sum_{\nu'_1, \dots, \nu'_N} |\nu'_1, \dots, \nu'_N\rangle \langle \nu'_1, \dots, \nu'_N|. \quad (2.66)$$

(Für Fermionen sollen die Summen über Einteilchenzustände nur mit dem Pauli-Prinzip vereinbare Kombinationen enthalten, d. h. $\nu_i \neq \nu_j$ und $\nu'_i \neq \nu'_j$ für $i \neq j$.) $V_i^{(1)}$ wirkt in Gl. (2.66) nur auf den Zustand des i -ten Teilchens, also auf $|\nu_i\rangle, |\nu'_i\rangle$. Die anderen Summen können daher ausgeführt werden, z. B.

$$\sum_{\nu_j \nu'_j} |\nu_j\rangle \langle \nu_j | \nu'_j\rangle \langle \nu'_j| = \sum_{\nu_j} |\nu_j\rangle \langle \nu_j| = \mathbb{1}. \quad (2.67)$$

Sie ergeben also Faktoren $\mathbb{1}$ in den Unterräumen zu $j \neq i$, die wie üblich nicht mit aufgeschrieben werden:

$$V_1 = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} |\nu_i\rangle \langle \nu_i | V_i^{(1)} |\nu'_i\rangle \langle \nu'_i|. \quad (2.68)$$

Wie oben fassen wir $V_i^{(1)}$, eigentlich ein Operator auf \mathcal{H} , jetzt als Operator auf \mathcal{H}_N auf. Wir schreiben dies als

$$V_1 = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} V_{\nu_i \nu'_i}^{(1)} |\nu_i\rangle \langle \nu'_i| \quad (2.69)$$

mit

$$V_{\nu_i \nu'_i}^{(1)} := \langle \nu_i | V_i^{(1)} | \nu'_i \rangle = \int d^3 r u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) V_1(\mathbf{r}) u_{\nu'_i}(\mathbf{r}). \quad (2.70)$$

Wir haben verwendet, dass $V_i^{(1)}$ diagonal ist, sonst stünde hier allgemeiner $\int d^3 r d^3 r' u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) V_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_{\nu'_i}(\mathbf{r}')$. Wählt man die Ortsbasis $\{|\mathbf{r}\rangle\}$, so erhält man entsprechend

$$V_1 = \sum_i \int d^3 r_i d^3 r'_i V^{(1)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_i) |\mathbf{r}_i\rangle \langle \mathbf{r}'_i| \quad (2.71)$$

mit

$$V^{(1)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_i) = \int d^3 r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) V_1(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i) = \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) V_1(\mathbf{r}_i), \quad (2.72)$$

da die Eigenfunktionen des Ortsoperators δ -Funktionen sind. Eingesetzt ergibt sich

$$V_1 = \sum_i \int d^3 r_i V_1(\mathbf{r}_i) |\mathbf{r}_i\rangle \langle \mathbf{r}_i|. \quad (2.73)$$

Diese Herleitung funktioniert für alle Einteilchenobservablen $A^{(i)}$, man erhält entsprechende Ausdrücke. Die kinetische Energie T_i des Teilchens i ist sicherlich eine solche Observable. Für die gesamte kinetische Energie erhalten wir also

$$T = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} |\nu_i\rangle \langle \nu_i | T_i | \nu'_i \rangle \langle \nu'_i| = \sum_i \sum_{\nu_i \nu'_i} T_{\nu_i \nu'_i} |\nu_i\rangle \langle \nu'_i| \quad (2.74)$$

mit

$$T_{\nu_i \nu'_i} := \langle \nu_i | T_i | \nu'_i \rangle = \int d^3 r u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) T(\mathbf{r}, \mathbf{p} = -i\hbar\nabla) u_{\nu'_i}(\mathbf{r}). \quad (2.75)$$

In Abwesenheit eines Vektorpotentials gilt einfach $T(\mathbf{r}, \mathbf{p} = -i\hbar\nabla) = -\hbar^2 \nabla^2 / 2m$, also

$$T_{\nu_i \nu'_i} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 r u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) \nabla^2 u_{\nu'_i}(\mathbf{r}) = +\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 r \nabla u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) \cdot \nabla u_{\nu'_i}(\mathbf{r}), \quad (2.76)$$

wobei wir im letzten Schritt eine partielle Integration ausgeführt haben, um einen symmetrischeren Ausdruck zu erhalten, der außerdem nur erste Ableitungen enthält. In der Ortsbasis erhalten wir

$$T = \sum_i \int d^3 r_i d^3 r'_i T(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_i) |\mathbf{r}_i\rangle \langle \mathbf{r}'_i| \quad (2.77)$$

mit

$$\begin{aligned} T(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}'_i) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \nabla^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) (\nabla'_i)^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_i) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla'_i)^2 \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) \end{aligned} \quad (2.78)$$

(wir schreiben $\nabla_i \equiv \partial/\partial \mathbf{r}_i$ und $\nabla'_i \equiv \partial/\partial \mathbf{r}'_i$) und schließlich

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \int d^3 r_i d^3 r'_i [(\nabla'_i)^2 \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i)] |\mathbf{r}_i\rangle \langle \mathbf{r}'_i|$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \int d^3 r_i d^3 r'_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) (\nabla'_i)^2 |\mathbf{r}_i\rangle \langle \mathbf{r}'_i| \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \int d^3 r_i d^3 r'_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) |\mathbf{r}_i\rangle (\nabla'_i)^2 \langle \mathbf{r}'_i| \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \int d^3 r_i |\mathbf{r}_i\rangle \nabla_i^2 \langle \mathbf{r}_i| \\
&= +\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \int d^3 r_i \nabla_i |\mathbf{r}_i\rangle \cdot \nabla_i \langle \mathbf{r}_i|, \tag{2.79}
\end{aligned}$$

wobei wir mehrfach partiell integriert haben. Diese Ortsdarstellung ist für die kinetische Energie i. A. nicht sehr nützlich.

Wechselwirkungsterme

Die 2, 3, ...-Teilchen-Terme enthalten 2, 3, ... Bra- und Ket-Vektoren. Zum Beispiel ist

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} \sum_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j} |\nu_i\rangle |\nu_j\rangle \langle \nu_j| \langle \nu_i| V_{ij}^{(2)} |\nu'_i\rangle |\nu'_j\rangle \langle \nu'_j| \langle \nu'_i| = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} \sum_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j} V_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j}^{(2)} |\nu_i\rangle |\nu_j\rangle \langle \nu'_j| \langle \nu'_i| \tag{2.80}$$

mit

$$V_{\nu_i \nu_j \nu'_i \nu'_j}^{(2)} := \langle \nu_j | \langle \nu_i | V_{ij}^{(2)} | \nu'_i \rangle | \nu'_j \rangle = \int d^3 r_i d^3 r_j u_{\nu_j}^*(\mathbf{r}_j) u_{\nu_i}^*(\mathbf{r}_i) V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) u_{\nu'_i}(\mathbf{r}_i) u_{\nu'_j}(\mathbf{r}_j). \tag{2.81}$$

Der Faktor 1/2 ist die schon erwähnte Korrektur der Doppelzählung. Wir haben angenommen, dass V_2 lokal in *zwei* Orten ist, z. B. eine Dichte-Dichte-Wechselwirkung. Das bedeutet, dass V_2 nicht instantan den Ort von Teilchen ändert, siehe oben. Beachte die Reihenfolge der Indizes ν_i, ν_j (Konvention). In der Ortsbasis erhalten wir

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d^3 r_i d^3 r'_i d^3 r_j d^3 r'_j V^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j) |\mathbf{r}_i\rangle |\mathbf{r}_j\rangle \langle \mathbf{r}'_j| \langle \mathbf{r}'_i| \tag{2.82}$$

mit

$$\begin{aligned}
V^{(2)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{r}'_i, \mathbf{r}'_j) &= \int d^3 R_i d^3 R_j \delta(\mathbf{R}_j - \mathbf{r}_j) \delta(\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_i) V_2(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) \delta(\mathbf{R}_i - \mathbf{r}'_i) \delta(\mathbf{R}_j - \mathbf{r}'_j) \\
&= \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}'_j) V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)
\end{aligned} \tag{2.83}$$

und schließlich

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d^3 r_i d^3 r_j V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) |\mathbf{r}_i\rangle |\mathbf{r}_j\rangle \langle \mathbf{r}_j| \langle \mathbf{r}_i|. \tag{2.84}$$

Für die Coulomb-Wechselwirkung aus Gl. (2.65) erhalten wir speziell

$$V_C = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \int d^3 r_i d^3 r_j \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} |\mathbf{r}_i\rangle |\mathbf{r}_j\rangle \langle \mathbf{r}_j| \langle \mathbf{r}_i|, \tag{2.85}$$

was mit Gl. (2.30) übereinstimmt.

Wie gesagt müssen alle Terme im Hamiltonian H symmetrisch unter Vertauschung ununterscheidbarer Teilchen sein. Man kann zeigen, dass H daher die Symmetrie oder Antisymmetrie von Zuständen erhält, d. h. $H \hat{S}_{\pm} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle$ ist (anti-) symmetrisch. Es folgt

$$\hat{S}_{\pm} H \hat{S}_{\pm} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle = H \hat{S}_{\pm} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle = H \hat{S}_{\pm} \hat{S}_{\pm} |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \tag{2.86}$$

für alle Basiszustände und daher für alle Zustände aus $\hat{S}_{\pm} \mathcal{H}_N$. Damit gilt auf dem Raum erlaubter Zustände die Operatoridentität

$$\hat{S}_{\pm} H = H \hat{S}_{\pm} \quad \Rightarrow \quad [\hat{S}_{\pm}, H] = 0. \tag{2.87}$$

Beachte, dass wir die Observablen, z. B. H , durch Einteilchen-Bras und -Kets ausgedrückt haben, nicht in einer Basis explizit (anti-) symmetrischer Vielteilchenzustände, was das eigentliche Ziel war. Das macht die Auswertung von z. B. $H \hat{S}_\pm |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle$ für einen konkreten Fall mühsam. Wir werden im Folgenden H durch (anti-) symmetrisierte Zustände ausdrücken, verwenden dafür aber eine günstigere Darstellung dieser Zustände, die wir im nächsten Abschnitt einführen.

2.3 Zweite Quantisierung

In diesem Abschnitt wird eine alternative Beschreibung der Mehrteilchenzustände und in der Folge auch der Operatoren eingeführt, die sogenannte zweite Quantisierung. Wir beschreiben immernoch dieselben Zustände und Observablen, am physikalischen Gehalt der Theorie ändert sich also zunächst nichts. Die neue Beschreibung ist aber günstiger für praktische Herleitungen und Rechnungen. Sie hat den zusätzlichen Vorteil, dass in ihrem Rahmen auch Teilchenerzeugung und -vernichtung behandelt werden können.

Die bisher entwickelte Verallgemeinerung der Quantenmechanik auf N -Teilchen-Systeme ist aus mehreren Gründen ungünstig:

- Praktische Rechnungen mit den (anti-) symmetrisierten Zuständen sind mühsam.
- Die Zustände enthalten eine feste Teilchenzahl N . Teilchenerzeugung und -vernichtung können nicht beschrieben werden.
- Ebenfalls wegen der festen Teilchenzahl N ist der Formalismus auch nicht ideal, wenn die Teilchenzahl zwar erhalten ist, wir aber mehr als einen möglichen Wert betrachten wollen, z. B. für statistische Aussagen über großkanonische Ensembles.

Diese Mängel werden vom Formalismus der *Zweiten Quantisierung* behoben. Dabei wird im Übrigen gar nichts zweimal quantisiert. Es handelt sich um eine irreführende historische Bezeichnung; wir werden auf ihren Ursprung später zurückkommen.

Wir müssen zunächst einen Zustandsraum konstruieren, der Zustände mit Teilchenzahlen $N = 0, 1, \dots$ enthält. \mathcal{H}_N für festes N reicht also nicht. Wir führen den *Fock-Raum* ein:

$$\mathcal{F} := \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \quad (2.88)$$

Der Fock-Raum ist die *direkte Summe* der \mathcal{H}_N , d. h. die Basis von \mathcal{F} ist die Vereinigungsmenge der Basen der \mathcal{H}_N , $\bigcup_{N=0}^{\infty} (\text{Basis von } \mathcal{H}_N)$. \mathcal{F} enthält $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1, \dots$ als Unterräume. Die Unterräume \mathcal{H}_N sollen nur die korrekten (anti-) symmetrischen Zustände enthalten.

Der Null-Teilchen-Hilbertraum \mathcal{H}_0 ist besonders einfach: Er enthält nur den *einen* Zustand ohne Teilchen. Dieser wird *Vakuumzustand* (oder *Vakuum*) genannt und oft mit $|0\rangle$ bezeichnet. Für Teilchen, die gar nicht oder repulsiv wechselwirken, ist $|0\rangle$ der Grundzustand des Vielteilchensystems. \mathcal{H}_0 ist ein *eindimensionaler* Hilbertraum, aufgespannt durch $|0\rangle$. (Der normierbare Zustandsvektor $|0\rangle$ darf nicht mit dem Nullvektor 0 im Hilbertraum verwechselt werden.)

2.3.1 Besetzungszahldarstellung

Bei der zweiten Quantisierung beschreiben wir Vielteilchenzustände durch Angabe der Zahl von Teilchen in allen möglichen Einteilchenzuständen. Wir definieren die Besetzungszahloperatoren \hat{n}_ν durch ihre Darstellung in der Basis der bekannten (anti-) symmetrisierten Vielteilchenzustände. Diese Zustände sollen sämtlich Eigenzustände von \hat{n}_ν sein und die folgende Eigenwertgleichung erfüllen:

$$\hat{n}_\nu \hat{S}_\pm |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle = n_\nu \hat{S}_\pm |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle, \quad (2.89)$$

wobei n_ν die Anzahl des Auftretens von ν im N -Tupel (ν_1, \dots, ν_N) ist. Mit anderen Worten, n_ν gibt an, wieviele Teilchen im Einteilchenzustand $|\nu\rangle$ sind. Die entscheidende Erkenntnis ist nun, dass der Vielteilchenzustand allein durch die Angabe der Besetzungszahlen für alle möglichen Einteilchenzustände eindeutig bestimmt ist.

Dies beruht auf der (Anti-) Symmetrisierung: Die einzige Information außer den Besetzungszahlen, die im N -Tupel (ν_1, \dots, ν_N) enthalten ist, betrifft nämlich die Anordnung der ν_i . Diese sagt aus, *welche* der Teilchen in den vorkommenden Einteilchenzuständen sind. Die Anordnung ist aber irrelevant, da bei der (Anti-) Symmetrisierung über alle Permutationen der ν_i summiert wird. Der Operator \hat{S}_\pm sorgt also dafür, dass es auf die Reihenfolge der Elemente in (ν_1, \dots, ν_N) nicht ankommt. Ein Phasen- oder allgemeiner ein Normierungsfaktor ist dadurch nicht festgelegt, ändert aber nicht den Zustand.

Die vorige Überlegung erlaubt uns, für die (normierten) Basiszustände zu schreiben

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \quad \text{mit } n_1 + n_2 + \dots = N. \quad (2.90)$$

Diese nennt man *Besetzungszahlzustände* und die Darstellung von Operatoren usw. in dieser Basis *Besetzungszahldarstellung*. Es ist wichtig, sich klarzumachen, dass es *dieselben* (anti-) symmetrisierten Basiszustände sind wie im vorigen Abschnitt; die expliziten Vektoren unterscheiden sich höchstens um einen Zahlenfaktor. Sie werden nur anders bezeichnet. Die lineare Unabhängigkeit ist nun aber dadurch gewährleistet, dass jeder erlaubte Satz n_1, n_2, \dots genau einmal vorkommt.

Die Eigenwertgleichung (2.89) lautet nun einfach

$$\hat{n}_\nu |n_1, n_2, \dots\rangle = n_\nu |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (2.91)$$

Es ist sinnvoll, auch Operatoren einzuführen, die die Teilchenzahlen ändern, nicht zuletzt, um Teilchenerzeugung und -vernichtung beschreiben zu können. Wir diskutieren zunächst Bosonen und anschließend Fermionen.

Bosonen

Wir definieren den *Erzeugungsoperator* b_ν^\dagger für den Einteilchenzustand $|\nu\rangle$ durch

$$b_\nu^\dagger |\dots, n_\nu, \dots\rangle = B_{n_\nu+1}^* |\dots, n_\nu + 1, \dots\rangle, \quad (2.92)$$

wobei wir den Zahlenfaktor $B_{n_\nu+1}^* \in \mathbb{C}$ später festlegen werden. b_ν^\dagger erhöht offensichtlich die Besetzungszahl n_ν um eins. Wir definieren außerdem den *Vernichtungsoperator* durch $b_\nu := (b_\nu^\dagger)^\dagger$.

Die Matrixelemente des Erzeugungsoperators lauten

$$\langle \dots, n'_\nu, \dots | b_\nu^\dagger | \dots, n_\nu, \dots \rangle = B_{n_\nu+1}^* \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.93)$$

$$\Rightarrow \langle \dots, n_\nu, \dots | b_\nu | \dots, n'_\nu, \dots \rangle = B_{n_\nu+1} \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.94)$$

$$\Rightarrow b_\nu |\dots, n_\nu + 1, \dots\rangle = B_{n_\nu+1} |\dots, n_\nu, \dots\rangle. \quad (2.95)$$

b_ν verringert also die Besetzungszahl n_ν (bzw. $n_\nu + 1$) um eins. Weiter folgt

$$b_\nu^\dagger b_\nu |\dots, n_\nu, \dots\rangle = b_\nu^\dagger B_{n_\nu} |\dots, n_\nu - 1, \dots\rangle = B_{n_\nu}^* B_{n_\nu} |\dots, n_\nu, \dots\rangle. \quad (2.96)$$

$|\dots, n_\nu, \dots\rangle$ ist also ein Eigenzustand von $b_\nu^\dagger b_\nu$ mit dem Eigenwert $B_{n_\nu}^* B_{n_\nu}$.

b_ν muss den Zustand zerstören, wenn kein Teilchen im Einteilchenzustand $|\nu\rangle$ ist, weil negative Teilchenzahlen keinen Sinn haben:

$$b_\nu |\dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = 0. \quad (2.97)$$

(b_ν ist ein Operator auf dem Fock-Raum \mathcal{F} , also muss ein Element aus \mathcal{F} herauskommen. Aber der Nullvektor ist das einzige Element, das keinen Zustand repräsentiert.) Es folgt

$$B_0 = 0. \quad (2.98)$$

Über B_n , $n \geq 1$, können wir noch verfügen. Es ist nützlich, $B_n = \sqrt{n}$ zu definieren. (Dies ist als Bestandteil der Definition von b_ν^\dagger und b_ν zu verstehen.) Dann folgt

$$b_\nu^\dagger |\dots, n_\nu, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu + 1} |\dots, n_\nu + 1, \dots\rangle, \quad (2.99)$$

$$b_\nu |\dots, n_\nu, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu} |\dots, n_\nu - 1, \dots\rangle, \quad (2.100)$$

$$b_\nu^\dagger b_\nu |\dots, n_\nu, \dots\rangle = n_\nu |\dots, n_\nu, \dots\rangle. \quad (2.101)$$

$b_\nu^\dagger b_\nu$ ist demnach der Besetzungszahloperator:

$$b_\nu^\dagger b_\nu = \hat{n}_\nu. \quad (2.102)$$

Weiter folgt

$$[b_\nu, b_\nu^\dagger] | \dots, n_\nu, \dots \rangle \equiv (b_\nu b_\nu^\dagger - b_\nu^\dagger b_\nu) | \dots, n_\nu, \dots \rangle = [(n_\nu + 1) - n_\nu] | \dots, n_\nu, \dots \rangle = | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.103)$$

Da dies für alle Basiszustände gilt, folgt

$$[b_\nu, b_\nu^\dagger] = 1. \quad (2.104)$$

Rechts steht eigentlich der Identitätsoperator $\mathbb{1}$, aber man schreibt dafür fast immer einfach 1. Das werden wir hier auch tun. Weiterhin gilt trivial

$$[b_\nu, b_\nu] = [b_\nu^\dagger, b_\nu^\dagger] = 0, \quad (2.105)$$

da jeder Operator mit sich selbst kommutiert.

Soweit haben wir Vertauschungsrelationen für Erzeuger und Vernichter desselben Einteilchenzustandes betrachtet. Operatoren für verschiedene Einteilchenzustände $|\nu\rangle$, $|\nu'\rangle$ kommutieren. Wir zeigen dies am Beispiel von b_ν^\dagger und $b_{\nu'}^\dagger$ für $\nu' \neq \nu$. Es gilt

$$\begin{aligned} [b_\nu^\dagger, b_{\nu'}^\dagger] | \dots, n_\nu, \dots, n_{\nu'}, \dots \rangle &\equiv (b_\nu^\dagger b_{\nu'}^\dagger - b_{\nu'}^\dagger b_\nu^\dagger) | \dots, n_\nu, \dots, n_{\nu'}, \dots \rangle \\ &= b_\nu^\dagger \sqrt{n_{\nu'} + 1} | \dots, n_\nu, \dots, n_{\nu'} + 1, \dots \rangle - b_{\nu'}^\dagger \sqrt{n_\nu + 1} | \dots, n_\nu + 1, \dots, n_{\nu'}, \dots \rangle \\ &= \sqrt{n_{\nu'} + 1} \sqrt{n_\nu + 1} | \dots, n_\nu + 1, \dots, n_{\nu'} + 1, \dots \rangle - \sqrt{n_\nu + 1} \sqrt{n_{\nu'} + 1} | \dots, n_\nu + 1, \dots, n_{\nu'} + 1, \dots \rangle \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.106)$$

Es folgt $[b_\nu^\dagger, b_{\nu'}^\dagger] = 0$. Entsprechende Ergebnisse finden wir für $[b_\nu, b_{\nu'}]$ und $[b_\nu, b_{\nu'}^\dagger]$.

Wir erhalten schließlich die fundamentalen Vertauschungsrelationen für Bosonen:

$$[b_\nu, b_{\nu'}^\dagger] = \delta_{\nu\nu'}, \quad (2.107)$$

$$[b_\nu, b_{\nu'}] = 0, \quad (2.108)$$

$$[b_\nu^\dagger, b_{\nu'}^\dagger] = 0. \quad (2.109)$$

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für *unterscheidbare* Bosonen vertauschen natürlich in jedem Fall.

Fermionen

Für Fermionen hatten wir gesehen, dass jeder Einteilchenzustand ν höchstens einfach besetzt sein kann. Also gilt

$$n_\nu = 0, 1 \quad \forall \nu. \quad (2.110)$$

Wir definieren zunächst analog zu Bosonen den Erzeugungsoperator c_ν^\dagger durch

$$c_\nu^\dagger | \dots, n_\nu, \dots \rangle = C_{n_\nu+1}^* | \dots, n_\nu + 1, \dots \rangle \quad (2.111)$$

und den Vernichtungsoperator durch $c_\nu := (c_\nu^\dagger)^\dagger$. Es folgt

$$\langle \dots, n'_\nu, \dots | c_\nu^\dagger | \dots, n_\nu, \dots \rangle = C_{n_\nu+1}^* \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.112)$$

$$\Rightarrow \langle \dots, n_\nu, \dots | c_\nu | \dots, n'_\nu, \dots \rangle = C_{n_\nu+1} \delta_{n'_\nu, n_\nu+1} \quad (2.113)$$

$$\Rightarrow c_\nu | \dots, n_\nu + 1, \dots \rangle = C_{n_\nu+1} | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.114)$$

Weiter folgt

$$c_\nu^\dagger c_\nu | \dots, n_\nu, \dots \rangle = C_{n_\nu}^* C_{n_\nu} | \dots, n_\nu, \dots \rangle. \quad (2.115)$$

Analog zu Bosonen muss $C_0 = 0$ gelten. Für Fermionen gilt aber außerdem, wegen des Pauli-Prinzips,

$$c_\nu^\dagger | \dots, n_\nu = 1, \dots \rangle = 0 \quad (2.116)$$

$$\Rightarrow C_2^* = 0. \quad (2.117)$$

Der Parameter C_1 ist noch unbestimmt. Wir werden später sehen, dass wir nicht einfach, wie für Bosonen, $C_1 = 1$ fordern können (dies wird im Buch von Bruus und Flensberg inkorrekt dargestellt). Einfache Ergebnisse erhalten wir aber, wenn wir $C_1 = \pm 1$ erlauben:

$$c_\nu^\dagger |\dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = \pm |\dots, n_\nu = 1, \dots\rangle, \quad (2.118)$$

$$c_\nu^\dagger |\dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = 0, \quad (2.119)$$

$$c_\nu |\dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = 0, \quad (2.120)$$

$$c_\nu |\dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = \pm |\dots, n_\nu = 0, \dots\rangle \quad (2.121)$$

und

$$c_\nu^\dagger c_\nu |\dots, n_\nu = 0, \dots\rangle = 0, \quad (2.122)$$

$$c_\nu^\dagger c_\nu |\dots, n_\nu = 1, \dots\rangle = + |\dots, n_\nu = 1, \dots\rangle. \quad (2.123)$$

Also ist

$$c_\nu^\dagger c_\nu = \hat{n}_\nu \quad (2.124)$$

der Besetzungszahloperator, wie für Bosonen.

Für den Kommutator erhalten wir

$$[c_\nu, c_\nu^\dagger] |\dots, n_\nu, \dots\rangle \equiv (c_\nu c_\nu^\dagger - c_\nu^\dagger c_\nu) |\dots, n_\nu, \dots\rangle = (-1)^{n_\nu} |\dots, n_\nu, \dots\rangle = (-1)^{\hat{n}_\nu} |\dots, n_\nu, \dots\rangle. \quad (2.125)$$

Der Kommutator ist also nicht so einfach wie für Bosonen, sondern selbst wieder ein nichttrivialer Operator. Es ist fundamental für die Physik von Fermionen, dass wir stattdessen ein einfaches Ergebnis für den *Antikommutator*

$$\{c_\nu, c_\nu^\dagger\} := c_\nu c_\nu^\dagger + c_\nu^\dagger c_\nu \quad (2.126)$$

erhalten:

$$\{c_\nu, c_\nu^\dagger\} |\dots, n_\nu, \dots\rangle \equiv (c_\nu c_\nu^\dagger + c_\nu^\dagger c_\nu) |\dots, n_\nu, \dots\rangle = |\dots, n_\nu, \dots\rangle \quad \forall |\dots, n_\nu, \dots\rangle. \quad (2.127)$$

Hier haben wir ausgenutzt, dass immer einer der beiden Terme eins und der andere Null ergibt. Es folgt

$$\{c_\nu, c_\nu^\dagger\} = 1. \quad (2.128)$$

Für den Antikommutator schreibt man auch $[A, B]_+ \equiv \{A, B\} := AB + BA$.

Aus Glg. (2.118)–(2.121) folgt sofort

$$\{c_\nu, c_\nu\} \equiv 2c_\nu c_\nu = 0, \quad (2.129)$$

$$\{c_\nu^\dagger, c_\nu^\dagger\} \equiv 2c_\nu^\dagger c_\nu^\dagger = 0. \quad (2.130)$$

Die letzte Gleichung enthält das Pauli-Prinzip: Man kann keine zwei Fermionen in demselben Zustand $|\nu\rangle$ erzeugen.

Wie lauten die Antikommutatoren für verschiedene Einteilchenzustände? Für Fermionen können wir nicht analog zum Fall von Bosonen argumentieren, da wir über das Vorzeichen von C_1 noch nicht verfügt haben. Wir verwenden stattdessen die Antisymmetrie des Vielteilchenzustands. Für Fermionen macht es demnach einen Unterschied, welches Teilchen zuerst erzeugt wird. Es gilt

$$\langle \dots, \nu_j, \dots, \nu_k, \dots | \psi \rangle = -\langle \dots, \nu_k, \dots, \nu_j, \dots | \psi \rangle, \quad (2.131)$$

also speziell

$$\langle \nu, \nu', \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle = -\langle \nu', \nu, \nu_1, \dots, \nu_N | \psi \rangle \quad \forall |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad \forall |\psi\rangle. \quad (2.132)$$

Da dies für alle $|\psi\rangle$ gilt, folgt

$$|\nu, \nu', \nu_1, \dots, \nu_N\rangle = -|\nu', \nu, \nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad \forall |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad (2.133)$$

Diese Gleichung schreiben wir, im Vorgriff auf die weiter unten diskutierte Konstruktion der Zustände, als

$$c_\nu^\dagger c_{\nu'}^\dagger |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle = -c_{\nu'}^\dagger c_\nu^\dagger |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad \forall |\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \quad (2.134)$$

$$\Rightarrow c_\nu^\dagger c_{\nu'}^\dagger = -c_{\nu'}^\dagger c_\nu^\dagger \quad (2.135)$$

$$\Rightarrow \{c_\nu^\dagger, c_{\nu'}^\dagger\} = 0. \quad (2.136)$$

Analoge Ergebnisse folgen für $\{c_\nu, c_{\nu'}\}$ und, für $\nu' \neq \nu$, für $\{c_\nu, c_{\nu'}^\dagger\}$. Insgesamt erhalten wir die *Anti*-Vertauschungsrelationen

$$\{c_\nu, c_{\nu'}^\dagger\} = \delta_{\nu\nu'}, \quad (2.137)$$

$$\{c_\nu, c_{\nu'}\} = 0, \quad (2.138)$$

$$\{c_\nu^\dagger, c_{\nu'}^\dagger\} = 0. \quad (2.139)$$

Dies bedeutet z. B. $c_\nu c_{\nu'} = -c_{\nu'} c_\nu$.

Wie sehen die (Anti-) Vertauschungsrelationen für *unterscheidbare* Fermionen aus? Man kann zeigen, dass es immer *möglich* ist, die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren so zu konstruieren, dass sie antivertauschen: $\{c_\nu, d_\mu^\dagger\} = 0$ usw. Wenn Superpositionen der Teilchen möglich sind, *müssen* die Operatoren antivertauschen. Zum Beispiel sind Elektronen- und Myonen-Neutrinos durch Reaktionen wie $\nu_e + n \rightarrow e^- + p$ und $\nu_\mu + n \rightarrow \mu^- + p$ unterscheidbar, wandeln sich aber bei der freien Propagation ineinander um (Neutrino-Oszillation). Die entsprechenden Operatoren müssen antivertauschen. Superpositionen von Teilchen mit unterschiedlichen (elektrischen oder anderen) Ladungen werden hingegen nicht beobachtet. In solchen Fällen hat es keine beobachtbaren Konsequenzen, ob die Operatoren für unterschiedliche Fermionarten vertauschen oder antivertauschen. Operatoren für Fermionen und Bosonen, die offensichtlich immer voneinander unterscheidbar sind, kommutieren.

Basiswechsel

Die weitere Diskussion bezieht sich soweit möglich sowohl auf Bosonen als auch auf Fermionen. Für Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für beide Fälle schreiben wir a_ν^\dagger, a_ν .

Es ist wichtig zu prüfen, wie sich die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren unter einem Wechsel der Einteilchenbasis transformieren. Die Einteilchenbasiszustände selbst transformieren sich gemäß

$$|\tilde{\mu}\rangle = \sum_\nu |\nu\rangle \langle \nu | \tilde{\mu}\rangle = \sum_\nu \langle \nu | \tilde{\mu}\rangle |\nu\rangle. \quad (2.140)$$

Nun soll a_ν^\dagger ein Teilchen im Zustand $|\nu\rangle$ erzeugen und \tilde{a}_μ^\dagger ein Teilchen im Zustand $|\tilde{\mu}\rangle$,

$$|\nu\rangle = a_\nu^\dagger |0\rangle, \quad (2.141)$$

$$|\tilde{\mu}\rangle = \tilde{a}_\mu^\dagger |0\rangle. \quad (2.142)$$

Dies wird erreicht, wenn die Transformationsvorschrift für die Erzeugungsoperatoren lautet

$$\tilde{a}_\mu^\dagger = \sum_\nu \langle \nu | \tilde{\mu}\rangle a_\nu^\dagger, \quad (2.143)$$

denn dann ist

$$|\tilde{\mu}\rangle = \tilde{a}_\mu^\dagger |0\rangle = \sum_\nu \langle \nu | \tilde{\mu}\rangle a_\nu^\dagger |0\rangle = \sum_\nu \langle \nu | \tilde{\mu}\rangle |\nu\rangle. \quad (2.144)$$

Diese Konstruktion bezieht sich zunächst nur auf Einteilchenzustände. Um die Korrektheit der Transformationsvorschrift allgemein zu zeigen, muss man von den (anti-) symmetrisierten Zuständen in erster Quantisierung ausgehen, und zeigen, dass deren Transformation bei Basiswechsel mit der durch Gl. (2.143) induzierten übereinstimmt. Wir führen das hier nicht durch.

Aus Gl. (2.143) folgt sofort

$$\tilde{a}_\mu = \sum_\nu \langle \tilde{\mu} | \nu\rangle a_\nu \quad (2.145)$$

für die Vernichtungsoperatoren. Die Kommutatorrelationen für Bosonen transformieren sich dann wie

$$[\tilde{b}_\mu, \tilde{b}_{\mu'}^\dagger] = \sum_{\nu\nu'} \langle \tilde{\mu} | \nu\rangle \langle \nu' | \tilde{\mu}'\rangle \underbrace{[b_\nu, b_{\nu'}^\dagger]}_{\delta_{\nu\nu'}} = \sum_\nu \langle \tilde{\mu} | \nu\rangle \langle \nu | \tilde{\mu}'\rangle = \langle \tilde{\mu} | \tilde{\mu}'\rangle = \delta_{\mu\mu'} \quad (2.146)$$

usw. und die Antikommutatorrelationen für Fermionen wie

$$\{\tilde{c}_\mu, \tilde{c}_{\mu'}^\dagger\} = \sum_{\nu\nu'} \langle \tilde{\mu} | \nu \rangle \langle \nu' | \tilde{\mu}' \rangle \underbrace{\{c_\nu, c_{\nu'}^\dagger\}}_{\delta_{\nu\nu'}} = \sum_{\nu} \langle \tilde{\mu} | \nu \rangle \langle \nu | \tilde{\mu}' \rangle = \langle \tilde{\mu} | \tilde{\mu}' \rangle = \delta_{\mu\mu'}. \quad (2.147)$$

Die (Anti-) Kommutatoreigenschaften der Operatoren sind also invariant unter Wechsel der Einteilchenbasis. Die (Anti-) Kommutatoreigenschaften sind somit basisunabhängig, was sehr wünschenswert ist.

Die Gesamtteilchenzahl transformiert sich gemäß

$$\sum_{\mu} \tilde{a}_{\mu}^\dagger \tilde{a}_{\mu} = \sum_{\nu\nu'\mu} \langle \nu | \tilde{\mu} \rangle \langle \tilde{\mu} | \nu' \rangle a_{\nu}^\dagger a_{\nu'} = \sum_{\nu\nu'} \langle \nu | \nu' \rangle a_{\nu}^\dagger a_{\nu'} = \sum_{\nu} a_{\nu}^\dagger a_{\nu} = \hat{N}. \quad (2.148)$$

Die Gesamtteilchenzahl ist also ebenfalls invariant, was der intuitiven Bedeutung einer Teilchenzahl entspricht.

Konstruktion der Zustände

Der Vakuum-Zustand $|0\rangle$ ist nach Definition der Zustand ohne Teilchen. Er wird daher von allen a_{ν} zerstört:

$$a_{\nu} |0\rangle = 0 \quad \forall \nu. \quad (2.149)$$

Beliebige Besetzungszustände schreiben wir nun ausgehend vom Vakuum-Zustand als

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \sim (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle, \quad (2.150)$$

wobei wir uns gleich um die Normierung kümmern werden. Für Fermionen kommt es auf die Reihenfolge an, wir müssen eine Ordnung von Einteilchenzuständen festlegen und dann konsistent verwenden, ansonsten können sich Vorzeichenfehler einschleichen.

Der wohl wichtigste Grund für den großen Nutzen der zweiten Quantisierung ist, dass die (Anti-) Vertauschungsrelationen der Erzeugungsoperatoren a_{ν}^\dagger und Vernichtungsoperatoren a_{ν} nun sicherstellen, dass die Vielteilchenzustände die korrekten (Anti-) Symmetrie-Eigenschaften haben. Man sagt auch, dass die *Algebra* dieser Operatoren die korrekte (Anti-) Symmetrie garantiert. Zum Beispiel gilt für die fermionischen Zweiteilchen-Zustände unter Vertauschung der Einteilchen-Quantenzahlen

$$c_{\nu_1}^\dagger c_{\nu_2}^\dagger |0\rangle = -c_{\nu_2}^\dagger c_{\nu_1}^\dagger |0\rangle. \quad (2.151)$$

Für zwei Bosonen erhält man offensichtlich keinen Vorzeichenwechsel.

Die fermionischen Zustände sind bereits normiert: Wir betrachten $\langle 0 | \dots c_2^{n_2} c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle$. Hierin ist

$$c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1} = \begin{cases} 1 & \text{für } n_1 = 0, \\ 1 - c_1^\dagger c_1 & \text{für } n_1 = 1. \end{cases} \quad (2.152)$$

Im Fall $n_1 = 1$ wirkt dieser Operator auf den Zustand $(c_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle$, der keine Teilchen im Zustand $|1\rangle$ enthält. Daher kann der Besetzungszahloperator $c_1^\dagger c_1$ durch Null ersetzt werden und der Operator $c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1}$ kann durch eins ersetzt werden. Dasselbe Argument lässt sich für die Zustände $|2\rangle, |3\rangle$, etc. wiederholen, so dass sich am Ende

$$\langle 0 | \dots c_2^{n_2} c_1^{n_1} (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle = 1 \quad (2.153)$$

ergibt.

Wir kommen nun auf die Definition der fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zurück, siehe Gl. (2.111). Wir hatten das Vorzeichen von C_1 noch nicht festgelegt. Nun finden wir

$$c_{\nu}^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_{\nu} = 0, \dots\rangle = c_{\nu}^\dagger (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots (c_{\nu-1}^\dagger)^{n_{\nu-1}} (c_{\nu+1}^\dagger)^{n_{\nu+1}} \dots |0\rangle. \quad (2.154)$$

Der Operator c_{ν}^\dagger antikommutiert mit allen Erzeugungsoperatoren $c_{\nu'}^\dagger$ mit $\nu' \neq \nu$. Wenn wir c_{ν}^\dagger an die „richtige“ Position verschieben, ändert sich das Vorzeichen immer dann, wenn ein $n_{\nu'}$ für $\nu' < \nu$ gleich eins ist, da wir dann c_{ν}^\dagger mit $c_{\nu'}^\dagger$ vertauschen müssen. Insgesamt sammeln wir also einen Faktor $(-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{\nu-1}}$ auf:

$$c_{\nu}^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_{\nu} = 0, \dots\rangle = (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{\nu-1}} (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots (c_{\nu-1}^\dagger)^{n_{\nu-1}} c_{\nu}^\dagger (c_{\nu+1}^\dagger)^{n_{\nu+1}} \dots |0\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{\nu-1}} |n_1, n_2, \dots, n_{\nu} = 1, \dots\rangle \\
&\stackrel{!}{=} C_1^* |n_1, n_2, \dots, n_{\nu} = 1, \dots\rangle.
\end{aligned} \tag{2.155}$$

Damit folgt

$$C_1^* = C_1 = (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{\nu-1}} \quad \text{für den Zustand } \nu. \tag{2.156}$$

Also hängt C_1 von der Ordnungsnummer des Zustands ab, genauer von der gesamten Besetzungszahl aller Zustände mit geringerer Ordnungsnummer. Dies zeigt wieder, dass eine Reihenfolge der Zustände festgelegt werden muss. Wie oben erwähnt, können wir nicht einfach $C_1 = 1$ fordern, dies stünde im Widerspruch zur Antisymmetrie fermionischer Zustände.

Zum Schluss betrachten wir noch die Normierung der bosonischen Zustände. Dazu untersuchen wir $\langle 0 | \dots b_2^{n_2} b_1^{n_1} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle$. Es gilt

$$b_\nu^{n_\nu} (b_\nu^\dagger)^{n_\nu} = b_\nu^{n_\nu-1} (1 + b_\nu^\dagger b_\nu) (b_\nu^\dagger)^{n_\nu-1}. \tag{2.157}$$

Der Besetzungszahloperator $b_\nu^\dagger b_\nu$ wirkt auf einen Zustand, der $n_\nu - 1$ Teilchen enthält und kann daher durch $n_\nu - 1$ ersetzt werden. Damit kann im obigen Skalarprodukt $b_\nu^{n_\nu} (b_\nu^\dagger)^{n_\nu}$ durch $n_\nu b_\nu^{n_\nu-1} (b_\nu^\dagger)^{n_\nu-1}$ ersetzt werden. Iteration ergibt den Faktor $n_\nu!$. Dies wird erst für Zustand $|1\rangle$, dann für $|2\rangle$ usw. ausgeführt und ergibt schließlich

$$\langle 0 | \dots b_2^{n_2} b_1^{n_1} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0 \rangle = n_1! n_2! \dots \tag{2.158}$$

Damit erhalten wir für die normierten Besetzungszahlzustände

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \quad \text{für Bosonen,} \tag{2.159}$$

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \quad \text{für Fermionen.} \tag{2.160}$$

Der Ausdruck für Bosonen gilt auch für Fermionen, da $0! = 1! = 1$.

2.3.2 Operatoren in zweiter Quantisierung

Wir wollen Observable, insbesondere wieder den Hamiltonian, durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken.

Einteilchenobservable

Für Einteilchen-Terme, z. B. T und V_1 , hatten wir, siehe Gl. (2.69),

$$V_1 = \sum_i \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'} \underbrace{|\nu\rangle\langle\nu'|}_{\text{wirkt auf Teilchen } i}. \tag{2.161}$$

Offenbar trägt der Operator unter der Summe nur bei, wenn Teilchen i im Einteilchenzustand $|\nu'\rangle$ ist, der Operator verschiebt es dann in den Zustand $|\nu\rangle$. Wenn wir V_1 auf den – zunächst bosonischen – Vielteilchenzustand $|\nu_1, \dots, \nu_N\rangle \equiv b_{\nu_1}^\dagger \dots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ anwenden, erhalten wir demnach

$$V_1 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \dots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle = \sum_i \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'} \delta_{\nu'\nu_i} b_{\nu_1}^\dagger \dots \underbrace{b_\nu^\dagger}_{i\text{-tes Teilchen}} \dots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \tag{2.162}$$

Das nächste Ziel ist, die rechte Seite als Operator, ausgedrückt durch die b, b^\dagger , angewandt auf den Zustand $b_{\nu_1}^\dagger \dots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ zu schreiben. Also soll $b_{\nu_1}^\dagger \dots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ ganz rechts stehen. Um das zu erreichen, betrachten wir den Einteilchenzustand $|\nu'\rangle$ genauer. In $b_{\nu_1}^\dagger \dots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ sei dieser n' -mal besetzt ($n' = 1, 2, 3, \dots$; $n' = 0$ ergibt Null). Dieser Zustand enthält also $(b_{\nu'}^\dagger)^{n'}$, angewandt auf das Vakuum. Um die Erzeuger so zusammenzufassen, nutzen

wir aus, dass bosonische Erzeugungsoperatoren miteinander kommutieren. Der Summand in Gl. (2.162) enthält stattdessen $b_\nu^\dagger (b_{\nu'}^\dagger)^{n'-1}$. Dies wollen wir in eine ähnliche Form bringen:

$$b_\nu^\dagger (b_{\nu'}^\dagger)^{n'-1} = b_\nu^\dagger \underbrace{\frac{b_{\nu'}^\dagger b_{\nu'}^\dagger}{n'}}_{=1} (b_{\nu'}^\dagger)^{n'-1} = \frac{1}{n'} b_\nu^\dagger b_{\nu'} (b_{\nu'}^\dagger)^{n'} \quad (2.163)$$

$$\Rightarrow V_1 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle = \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'} \sum_i \delta_{\nu'\nu_i} \frac{1}{n'} b_\nu^\dagger b_{\nu'} b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.164)$$

Da der Einteilchenzustand $|\nu'\rangle$ in $b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ nun n' -fach besetzt ist, sind n' der Indizes ν_i gleich ν' . Daher enthält die i -Summe n' identische, nicht verschwindende Terme, wodurch sich der Faktor $1/n'$ weghebt. Also ist, nach Ausführung der Summe über i ,

$$\dots = \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'} b_\nu^\dagger b_{\nu'} b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.165)$$

Dies gilt für alle Basiszustände $b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ und daher folgt die Operatoridentität

$$V_1 = \sum_{\nu\nu'} V_{\nu\nu'} b_\nu^\dagger b_{\nu'}. \quad (2.166)$$

Das ist plausibel angesichts der Interpretation von Gl. (2.161): Ein Teilchen im Zustand $|\nu'\rangle$ wird in den Zustand $|\nu\rangle$ gestreut. Die Amplitude dieses Prozesses ist $V_{\nu\nu'}$. Ebenso erhält man

$$T = \sum_{\nu\nu'} T_{\nu\nu'} b_\nu^\dagger b_{\nu'}. \quad (2.167)$$

Einteilchenobservable sind also *bilinear* in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

Zur Klasse der Einteilchenobservable gehören natürlich auch die Besetzungszahloperatoren $\hat{n}_\nu = b_\nu^\dagger b_\nu$ der Einteilchenzustände. Wie gesehen ist der Gesamtteilchenzahloperator ebenfalls bilinear:

$$\hat{N} = \sum_\nu b_\nu^\dagger b_\nu. \quad (2.168)$$

Harmonischer Oszillator

Es sei an die algebraische Lösung des harmonischen Oszillators aus der Quantentheorie 1 erinnert: Der Hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 \quad (2.169)$$

lässt sich durch Einführung neuer Operatoren

$$b = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} p, \quad (2.170)$$

$$b^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} p \quad (2.171)$$

mit der Umkehrtransformation

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (b + b^\dagger), \quad (2.172)$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}} (b - b^\dagger) \quad (2.173)$$

auf die Form

$$H = \hbar\omega_0 \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} \right) \quad (2.174)$$

bringen.

Die neuen Operatoren erfüllen

$$[b, b^\dagger] = \frac{1}{2\hbar} \left[\sqrt{m\omega_0} x + \frac{i}{\sqrt{m\omega_0}} p, \sqrt{m\omega_0} x - \frac{i}{\sqrt{m\omega_0}} p \right] = \frac{i}{2\hbar} \left(-\underbrace{[x, p]}_{=i\hbar} + \underbrace{[p, x]}_{=-i\hbar} \right) = \frac{i}{2\hbar} (-2i\hbar) = 1 \quad (2.175)$$

und trivialerweise $[b, b] = [b^\dagger, b^\dagger] = 0$. b^\dagger und b verhalten sich also wie bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Außerdem ist der Hamiltonian H , bis auf eine Konstante, bilinear in diesen Operatoren. Bosonen sind also im Wesentlichen dasselbe wie Anregungen von harmonischen Oszillatoren. Wir werden auf diese Erkenntnis bei der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes in Abschnitt 5.3.2 zurückkommen.

Wechselwirkungsterme

Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen lassen sich gemäß Gl. (2.80) schreiben als

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} V_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} \underbrace{|\mu_i\rangle |\mu_j\rangle \langle \mu'_i| \langle \mu'_j|}_{\text{wirkt auf Teilchen } i, j}. \quad (2.176)$$

Für Bosonen finden wir, analog zur obigen Herleitung,

$$V_2 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} V_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} \delta_{\mu'_i \nu_i} \delta_{\mu'_j \nu_j} b_{\nu_1}^\dagger \cdots b_{\mu_i}^\dagger \cdots b_{\mu_j}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.177)$$

Nun müssen wir die Fälle $\mu'_i \neq \mu'_j$ und $\mu'_i = \mu'_j$ unterscheiden. Ob $\mu_i \neq \mu_j$ oder $\mu_i = \mu_j$ ist, spielt, wie wir sehen werden, an dieser Stelle keine Rolle.

- Für $\mu'_i \neq \mu'_j$ haben wir

$$\begin{aligned} b_{\mu_i}^\dagger b_{\mu_j}^\dagger (b_{\mu'_i}^\dagger)^{n_{\mu'_i}-1} (b_{\mu'_j}^\dagger)^{n_{\mu'_j}-1} &= b_{\mu_i}^\dagger b_{\mu_j}^\dagger \frac{b_{\mu'_j}^\dagger b_{\mu'_j}^\dagger}{n_{\mu'_j}} \frac{b_{\mu'_i}^\dagger b_{\mu'_i}^\dagger}{n_{\mu'_i}} (b_{\mu'_i}^\dagger)^{n_{\mu'_i}-1} (b_{\mu'_j}^\dagger)^{n_{\mu'_j}-1} \\ &= \frac{1}{n_{\mu'_i} n_{\mu'_j}} b_{\mu_i}^\dagger b_{\mu_j}^\dagger b_{\mu'_j}^\dagger b_{\mu'_i}^\dagger (b_{\mu'_i}^\dagger)^{n_{\mu'_i}} (b_{\mu'_j}^\dagger)^{n_{\mu'_j}}. \end{aligned} \quad (2.178)$$

Das gilt unabhängig davon, ob $\mu_i \neq \mu_j$ oder $\mu_i = \mu_j$ ist. Der entsprechende Anteil an der Summe in Gl. (2.177) ist

$$\begin{aligned} V_2 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle \Big|_{\mu'_i \neq \mu'_j} &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu_i, \mu_j, \mu'_i \neq \mu'_j} V_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} \delta_{\mu'_i \nu_i} \delta_{\mu'_j \nu_j} \frac{1}{n_{\mu'_i} n_{\mu'_j}} b_{\mu_i}^\dagger b_{\mu_j}^\dagger b_{\mu'_j}^\dagger b_{\mu'_i}^\dagger b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_a, \mu_b, \mu'_a \neq \mu'_b} V_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_b} \sum_{i \neq j} \delta_{\mu'_a \nu_i} \delta_{\mu'_b \nu_j} \frac{1}{n_{\mu'_a} n_{\mu'_b}} b_{\mu_a}^\dagger b_{\mu_b}^\dagger b_{\mu'_b}^\dagger b_{\mu'_a}^\dagger b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.179)$$

Da $|\mu'_a\rangle$ und $|\mu'_b\rangle$ in $b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle$ nun $n_{\mu'_a}$ - bzw. $n_{\mu'_b}$ -fach besetzt sind, enthält die i, j -Summe $n_{\mu'_a} n_{\mu'_b}$ identische, nicht verschwindende Terme. Also ist

$$\dots = \frac{1}{2} \sum_{\mu_a, \mu_b, \mu'_a \neq \mu'_b} V_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_b} b_{\mu_a}^\dagger b_{\mu_b}^\dagger b_{\mu'_b}^\dagger b_{\mu'_a}^\dagger b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.180)$$

- Für $\mu'_i = \mu'_j$ haben wir stattdessen

$$b_{\mu'_i}^\dagger b_{\mu'_j}^\dagger (b_{\mu'_i}^\dagger)^{n_{\mu'_i}-2} = b_{\mu'_i}^\dagger b_{\mu'_j}^\dagger \frac{b_{\mu'_i} b_{\mu'_i} b_{\mu'_i}^\dagger b_{\mu'_i}^\dagger}{n_{\mu'_i}(n_{\mu'_i}-1)} (b_{\mu'_i}^\dagger)^{n_{\mu'_i}-2} = \frac{1}{n_{\mu'_i}(n_{\mu'_i}-1)} b_{\mu'_i}^\dagger b_{\mu'_j}^\dagger b_{\mu'_i} b_{\mu'_i} (b_{\mu'_i}^\dagger)^{n_{\mu'_i}}. \quad (2.181)$$

Wieder gilt dies für $\mu_i \neq \mu_j$ und für $\mu_i = \mu_j$. Der entsprechende Anteil in Gl. (2.177) ist

$$\begin{aligned} V_2 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle|_{\mu'_i=\mu'_j} &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu_i, \mu_j, \mu'_i} V_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_i} \delta_{\mu'_i \nu_i} \delta_{\mu'_i \nu_j} \frac{1}{n_{\mu'_i}(n_{\mu'_i}-1)} b_{\mu_i}^\dagger b_{\mu_j}^\dagger b_{\mu'_i} b_{\mu'_i} b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_a, \mu_b, \mu'_a} V_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_a} \sum_{i \neq j} \delta_{\mu'_a \nu_i} \delta_{\mu'_a \nu_j} \frac{1}{n_{\mu'_a}(n_{\mu'_a}-1)} b_{\mu_a}^\dagger b_{\mu_b}^\dagger b_{\mu'_a} b_{\mu'_a} b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.182)$$

$|\mu'_a\rangle$ tritt $n_{\mu'_a}$ -mal auf. Wir erhalten immer denselben Term, wenn Teilchen i und Teilchen j ($j \neq i$) im Zustand $|\mu'_a\rangle$ sind. Das ist ein Problem des Ziehens von zwei Zahlen aus $\{1, 2, \dots, N\}$ ohne Zurücklegen. Dafür gibt es $n_{\mu'_a}(n_{\mu'_a}-1)$ Möglichkeiten. Der Faktor $1/n_{\mu'_a}(n_{\mu'_a}-1)$ hebt sich also weg,

$$\cdots = \frac{1}{2} \sum_{\mu_a, \mu_b, \mu'_a} V_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_a} b_{\mu_a}^\dagger b_{\mu_b}^\dagger b_{\mu'_a} b_{\mu'_a} b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.183)$$

Zusammenfassung der beiden Fälle ergibt

$$V_2 b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_b} V_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_b} b_{\mu_a}^\dagger b_{\mu_b}^\dagger b_{\mu'_a} b_{\mu'_b} b_{\nu_1}^\dagger b_{\nu_2}^\dagger \cdots b_{\nu_N}^\dagger |0\rangle, \quad (2.184)$$

so als hätten wir den Fall $\mu'_i = \mu'_j$ einfach so behandelt als sei $\mu'_i \neq \mu'_j$. Da das Ergebnis für alle Zustände gilt, folgt

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_b} V_{\mu_a \mu_b \mu'_a \mu'_b} b_{\mu_a}^\dagger b_{\mu_b}^\dagger b_{\mu'_a} b_{\mu'_b}. \quad (2.185)$$

Die Ordnung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist die konventionelle Form. Beachte die Reihenfolge der Subskripte.

Dieselben Darstellungen (mit b_ν durch c_ν ersetzt) ergeben sich für Fermionen. Um dies zu zeigen, muss man die Antikommutatoren korrekt behandeln; die dabei aufgesammelten Vorzeichen heben sich immer weg. Für den Beweis sei auf Lehrbücher verwiesen.

2.3.3 Quantenfeldoperatoren

Das bisher Gesagte gilt im Wesentlichen für jede beliebige Einteilchenbasis $\{|\nu\rangle\}$. Ein wichtiger Spezialfall ist die Ortsbasis $\{|\mathbf{r}\rangle\}$. Wir definieren für Bosonen und für Fermionen, zunächst unter Vernachlässigung des Spins, den *Quantenfeldoperator*

$$\Psi(\mathbf{r}) := \sum_{\nu} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle a_{\nu} = \sum_{\nu} u_{\nu}(\mathbf{r}) a_{\nu}. \quad (2.186)$$

Diese Gleichung hat die normale Form eines Basiswechsels, siehe Gl. (2.145). $\Psi(\mathbf{r})$ ist offenbar der Vernichtungsoperator in der Ortsdarstellung. Beachte die übliche Schreibung mit einem Großbuchstaben Ψ zur Unterscheidung von einer Einteilchenwellenfunktion.

Der hermitesch konjugierte Operator ist der Erzeugungsoperator

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle^* a_{\nu}^\dagger = \sum_{\nu} u_{\nu}^*(\mathbf{r}) a_{\nu}^\dagger. \quad (2.187)$$

Wir finden speziell für Bosonen

$$[\Psi(\mathbf{r}_1), \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2)] = \sum_{\nu_1 \nu_2} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}^*(\mathbf{r}_2) \underbrace{[b_{\nu_1}, b_{\nu_2}^\dagger]}_{=\delta_{\nu_1 \nu_2}} = \sum_{\nu_1} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_1}^*(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2.188)$$

unter Verwendung der Vollständigkeitsrelation. Für Fermionen ergibt sich analog

$$\{\Psi(\mathbf{r}_1), \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2)\} = \sum_{\nu_1 \nu_2} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_2}^*(\mathbf{r}_2) \underbrace{\{c_{\nu_1}, c_{\nu_2}^\dagger\}}_{=\delta_{\nu_1 \nu_2}} = \sum_{\nu_1} u_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) u_{\nu_1}^*(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (2.189)$$

Für Bosonen und für Fermionen finden wir

$$\int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = \int d^3r \sum_{\nu \nu'} u_\nu^*(\mathbf{r}) u_{\nu'}(\mathbf{r}) a_\nu^\dagger a_{\nu'} = \sum_{\nu \nu'} \delta_{\nu \nu'} a_\nu^\dagger a_{\nu'} = \sum_\nu a_\nu^\dagger a_\nu = \hat{N}, \quad (2.190)$$

also den Gesamtteilchenzahloperator. Es liegt nahe, $\Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$ als *Operator der Teilchendichtedichte* aufzufassen.

Das oben für die Darstellung von Operatoren durch Erzeuger und Vernichter gesagte gilt entsprechend auch für die Ortsdarstellung. Der Operator der kinetischen Energie

$$T = \sum_{\nu \nu'} T_{\nu \nu'} a_\nu^\dagger a_{\nu'} \quad \text{mit} \quad T_{\nu \nu'} = \langle \nu | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \nu' \rangle \quad (2.191)$$

lautet z. B.

$$T = \int d^3r d^3r' T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \quad \text{mit} \quad T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.192)$$

Die kinetische Einteilchenenergie in Ortsdarstellung lautet gemäß Gl. (2.78)

$$T(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla')^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.193)$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} T &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r d^3r' [(\nabla')^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}') \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi^\dagger(\mathbf{r}) (\nabla')^2 \Psi(\mathbf{r}') \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.194)$$

Mittels partieller Integration können wir dies auch in symmetrischer Form mit nur ersten Ableitungen schreiben:

$$T = +\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \nabla \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.195)$$

Analog gilt

$$V_1 = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) V_1(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.196)$$

$$V_2 = \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2) V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1). \quad (2.197)$$

Zumindest die Gleichungen (2.194) und (2.196) für die bilinearen Operatoren T bzw. V_1 sehen so aus wie die Erwartungswerte der entsprechenden Energiebeiträge für ein Einteilchensystem in erster Quantisierung,

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}), \quad (2.198)$$

$$\langle V_1 \rangle = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) V_1(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (2.199)$$

$\Psi(\mathbf{r})$ ist aber ein *Operator*, keine Wellenfunktion wie $\psi(\mathbf{r})$. Es scheint so, als ob wir die Einteilchenwellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ zu $\Psi(\mathbf{r})$ „quantisiert“ hätten. Daher die Bezeichnung „Zweite Quantisierung“. Wir haben aber nur

einmal quantisiert, nämlich als wir $[x, p] = i\hbar$ postuliert haben, der Rest folgt mittels linearer Algebra aus der Konstruktion des Fock-Raums.

Die Ähnlichkeit mit Einteilchenerwartungswerten kann zu einem weiteren Missverständnis führen, das hier ausgeräumt werden soll: Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ charakterisiert den *Zustand* eines (Einteilchen-) Systems, nämlich in der Ortsdarstellung. Der Quantenfeldoperator $\Psi(\mathbf{r})$ charakterisiert dagegen *nicht* den Zustand eines Systems, sondern ist ein Operator, der auf (Vielteilchen-) Zustände wirkt. Genauer ist $\Psi(\mathbf{r})$ ein Vernichtungsoperator, der versucht, ein Teilchen am Ort \mathbf{r} zu vernichten. Analog ist $\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ eine Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte, aber $\Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$ ein Operator, der prüft, ob am Ort \mathbf{r} ein Teilchen vorhanden ist.

Unter Beachtung des Spins lautet der Quantenfeldoperator für Bosonen mit Spin und für Fermionen

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}) := \sum_\nu \langle \mathbf{r}, \sigma | \nu \rangle a_\nu = \sum_\nu u_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) a_\nu. \quad (2.200)$$

Beachte, dass die Einteilchenquantenzahlen ν hier den gesamten Einteilchen-Hilbertraum abdecken, einschließlich des Spins. Falls alternativ ν nur den räumlichen Zustand beschreibt, aber nicht den Spin, schreiben wir

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}) := \sum_\nu \langle \mathbf{r} | \nu \rangle a_{\nu\sigma} = \sum_\nu u_\nu(\mathbf{r}) a_{\nu\sigma}. \quad (2.201)$$

Man zeigt leicht

$$[\Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1), \Psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2)] = \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad \text{für Bosonen,} \quad (2.202)$$

$$\{\Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1), \Psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2)\} = \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad \text{für Fermionen.} \quad (2.203)$$

2.4 Festkörperelektronen

Eine wichtige Anwendung der Vielteilchen-Quantentheorie und der zweiten Quantisierung ist die Festkörperphysik. In diesem Abschnitt soll daher der Anschluss an Vorlesungen zur Festkörperphysik und Festkörpertheorie hergestellt werden. Wir betrachten aus Zeitgründen nur Elektronen in Festkörpern. Eine quantenmechanische Beschreibung z. B. von Gitterschwingungen – die auf Phononen als Quanten führt – oder von magnetischen Anregungen ist ebenfalls möglich und wichtig. Im Zusammenhang mit der relativistischen Dirac-Theorie kommen wir später nochmals auf ein Festkörpersystem zurück.

Wir betrachten Elektronen im periodischen Potential eines Festkörpers in zweiter Quantisierung. Die Annahme eines periodischen Potentials bedeutet, dass wir die Kerne als unbeweglich und perfekt periodisch angeordnet annähern. Darüber hinaus vernachlässigen wir zunächst die (Coulomb-) Wechselwirkung zwischen den Elektronen. (Wieso diese Vernachlässigung oft qualitativ richtige Resultate ergibt, wird in der Vorlesung Vielteilchentheorie diskutiert.) Wir vernachlässigen hier auch die Spin-Bahn-Kopplung, die für ein grundlegendes Verständnis nicht erforderlich ist. Sie wird in Abschnitt 3.4.2 betrachtet. Dann lautet der Einteilchen-Hamiltonian in erster Quantisierung

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.204)$$

und der Hamiltonian auf dem Fock-Raum, in zweiter Quantisierung, ist

$$\tilde{H} = \sum_{\nu\nu'} (T_{\nu\nu'} + V_{\nu\nu'}) c_\nu^\dagger c_{\nu'} \quad (2.205)$$

mit einer beliebigen Einteilchenbasis $\{|\nu\rangle\}$. Daher sind die Vielteilchenzustände einfach alle möglichen Kombinationen von besetzten und unbesetzten Einteilchenzuständen $|n\mathbf{k}\sigma\rangle$. Da H gar nichts mit dem Spin tut, ist der Spin-Anteil an den Matrixelementen einfach $\langle \sigma | \sigma' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'}$.

Wir hatten gesehen, dass gilt

$$T_{\nu\nu'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r u_\nu^*(\mathbf{r}) \nabla^2 u_{\nu'}(\mathbf{r}), \quad (2.206)$$

$$V_{\nu\nu'} = \int d^3r u_\nu^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) u_{\nu'}(\mathbf{r}), \quad (2.207)$$

wobei

$$u_\nu(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | \nu \rangle. \quad (2.208)$$

Es ist günstig, als Basis die Eigenzustände (die Eigenbasis) von H zu verwenden. Da das Potential $V(\mathbf{r})$ gitterperiodisch sein soll, sind dies *Bloch-Zustände* (vgl. die Vorlesungen zur Festkörperphysik, Festkörpertheorie und Vielteilchentheorie), multipliziert mit Spin-Zuständen. Die Bloch-Zustände werden durch einen Kristallimpuls \mathbf{k} aus der ersten Brillouin-Zone und einen Bandindex n abgezählt. In der Ortsdarstellung lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$H \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) |\sigma\rangle = \epsilon_{n\mathbf{k}} \varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) |\sigma\rangle, \quad (2.209)$$

wobei nach dem *Bloch-Theorem* gilt

$$\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.210)$$

worin $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gitterperiodisch ist. Beachte, dass wir für diesen Abschnitt die Notation geändert haben: $\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle$ sind hier die Einteilchen-Eigenfunktionen. $|\sigma\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ bilden die Standardbasis des Spin-Hilbertraums.

In der Basis der Bloch-Zustände sind die Matrixelemente $T_{\nu\nu'}$ und $V_{\nu\nu'}$ diagonal im Spin und unabhängig vom Spin, da sie zu $\langle \sigma | \sigma' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'}$ proportional sind. Wir können die Spin-Indizes also weglassen. Es bleiben

$$T_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \varphi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \varphi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}), \quad (2.211)$$

$$V_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} = \int d^3r \varphi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \varphi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (2.212)$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} H_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} &:= T_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} + V_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \\ &= \int d^3r \varphi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right)}_H \varphi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \varphi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \epsilon_{n'\mathbf{k}'} \varphi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \epsilon_{n\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.213)$$

und schließlich

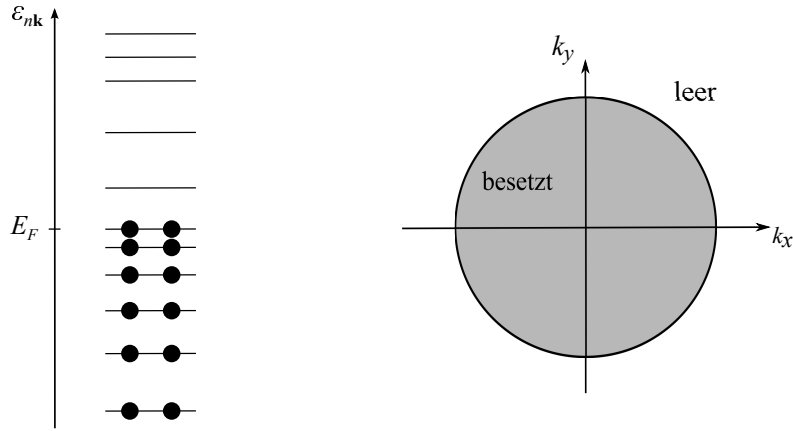
$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \sum_{\sigma} H_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n'\mathbf{k}'\sigma} \\ &= \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} \equiv \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{n\mathbf{k}} \hat{n}_{n\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (2.214)$$

In der Basis der Bloch-Zustände wird \tilde{H} also diagonal in den Quantenzahlen n, \mathbf{k}, σ . \tilde{H} ist dann einfach eine Summe von Besetzungszahloperatoren, gewichtet mit den Bandenergien $\epsilon_{n\mathbf{k}}$. Daher sind die Eigenzustände des Vielteilchen-Hamiltonians \tilde{H} alle möglichen Kombinationen von besetzten und unbesetzten Einteilchenzuständen $|n, \mathbf{k}, \sigma\rangle$.

Wir haben gesehen, dass die Diagonalisierung eines *bilinearen* Hamiltonians nur die Lösung einer Einteilchen-Schrödinger-Gleichung erfordert. Sobald Wechselwirkungen nicht vernachlässigt werden können, wird das Problem viel schwieriger; i. A. muss der Hamiltonian auf dem $\binom{d}{N}$ -dimensionalen N -Teilchen-Hilbertraum \mathcal{H}_N diagonalisiert werden. Meist ist man auf Näherungslösungen angewiesen (siehe Abschnitt 2.5 und Vorlesung Vielteilchentheorie).

2.4.1 Der Fermi-See

Im Grundzustand für N nicht wechselwirkende Elektronen werden die Einteilchenzustände der Reihe nach mit wachsender Energie $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ aufgefüllt. Die höchste dabei erreichte Energie ist bekanntlich die Fermi-Energie.



Diesen Grundzustand nennt man den *Fermi-See*.

Bisher hatten wir als Vakuum den Zustand ohne Teilchen definiert. In

- der Festkörperphysik und
- der Dirac-Theorie (siehe Abschnitt 3.3)

ist es aber oft sinnvoll, den Fermi-See als neues „Vakuum“ zu betrachten. Dies führt auf die neue Definition von $|0\rangle \equiv |\text{Fermi-See}\rangle$ durch

$$c_{n\mathbf{k}\sigma} |0\rangle = 0 \quad \forall n, \mathbf{k}, \sigma \text{ mit } \epsilon_{n\mathbf{k}} > E_F, \quad (2.215)$$

$$c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle = 0 \quad \forall n, \mathbf{k}, \sigma \text{ mit } \epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F. \quad (2.216)$$

Der Fermi-See enthält also kein Fermion mit $\epsilon_{n\mathbf{k}} > E_F$ und alle Zustände mit $\epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F$ sind besetzt.

2.4.2 Teilchen und Löcher

Wir gewinnen die vorherige Formulierung (das Vakuum wird von allen Vernichtungsoperatoren zerstört) zurück, indem wir neue Operatoren einführen:

$$h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger := c_{n\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.217)$$

dann ist natürlich

$$h_{n\mathbf{k}\sigma} = c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger. \quad (2.218)$$

Wir sagen, h^\dagger erzeugt ein *Loch*. Offensichtlich ist

$$\{h_{n\mathbf{k}\sigma}, h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger\} = \{c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{n\mathbf{k}\sigma}\} = \{c_{n\mathbf{k}\sigma}, c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger\} = 1 \quad (2.219)$$

usw. Die Löcher sind ebenfalls Fermionen. Weiter ist der Besetzungszahloperator der Löcher

$$h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger h_{n\mathbf{k}\sigma} = c_{n\mathbf{k}\sigma} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger = 1 - c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.220)$$

Nun ist

$$c_{n\mathbf{k}\sigma} |0\rangle = 0 \quad \forall n, \mathbf{k}, \sigma \text{ mit } \epsilon_{n\mathbf{k}} > E_F, \quad (2.221)$$

$$h_{n\mathbf{k}\sigma} |0\rangle = 0 \quad \forall n, \mathbf{k}, \sigma \text{ mit } \epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F, \quad (2.222)$$

woraus folgt

$$c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} |0\rangle = 0 \quad \text{für } \epsilon_{n\mathbf{k}} > E_F, \quad (2.223)$$

$$h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger h_{n\mathbf{k}\sigma} |0\rangle = 0 \quad \text{für } \epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F. \quad (2.224)$$

Der Fermi-See enthält also keine Löcher.

Für nicht wechselwirkende Teilchen lautet der Hamiltonian nun

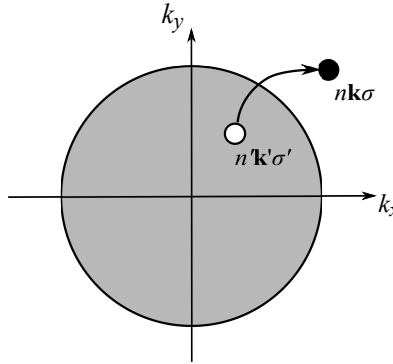
$$\begin{aligned}
\tilde{H} &= \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} \\
&= \sum_{\substack{n\mathbf{k}\sigma \\ \epsilon_{n\mathbf{k}} > E_F}} \epsilon_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\substack{n\mathbf{k}\sigma \\ \epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F}} \epsilon_{n\mathbf{k}} h_{n\mathbf{k}\sigma} h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger \\
&= \sum_{\epsilon_{n\mathbf{k}} > E_F} \epsilon_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F} \epsilon_{n\mathbf{k}} (1 - h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger h_{n\mathbf{k}\sigma}) \\
&= \underbrace{\sum_{\epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F} \epsilon_{n\mathbf{k}}}_{\text{Energie des Fermi-Sees}} + \underbrace{\sum_{\epsilon_{n\mathbf{k}} > E_F} \epsilon_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma}}_{\text{Teilchenanregungen}} + \underbrace{\sum_{\epsilon_{n\mathbf{k}} \leq E_F} (-\epsilon_{n\mathbf{k}}) h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger h_{n\mathbf{k}\sigma}}_{\text{Lochanregungen}}. \tag{2.225}
\end{aligned}$$

Wir können eine Konstante zum Einteilchen-Hamiltonian H addieren, so dass die Energien $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ relativ zu E_F gemessen werden. Dann schreibt man oft $\xi_{n\mathbf{k}} := \epsilon_{n\mathbf{k}} - E_F$ für die Energien. Es folgt

$$\tilde{H} = \text{const} + \sum_{\xi_{n\mathbf{k}} > 0} \xi_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\xi_{n\mathbf{k}} \leq 0} (-\xi_{n\mathbf{k}}) h_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger h_{n\mathbf{k}\sigma}. \tag{2.226}$$

Die Energien der Teilchen, $\xi_{n\mathbf{k}}$, sind nun positiv und ebenso die Energien der Löcher, $-\xi_{n\mathbf{k}}$ mit $\xi_{n\mathbf{k}} \leq 0$. Es *kostet* Energie, ein Teilchen außerhalb des Fermi-Sees zu erzeugen, wie auch, ein Loch innerhalb des Fermi-Sees zu erzeugen.

Beide Operationen ändern die Teilchenzahl. Bei festem N ist nur die Erzeugung eines Teilchen-Loch-Paares möglich. Diese kostet die Energie $\xi_{n\mathbf{k}} + (-\xi_{n'\mathbf{k}'}) > 0$. Das ist vernünftig, da der Fermi-See für feste Teilchenzahl N der Grundzustand ist.



2.5 Austausch-Wechselwirkung und Hartree-Fock-Näherung

Wir wissen aus der Einteilchen-Quantenmechanik, dass die Schrödinger-Gleichung nur für wenige Spezialfällen exakt lösbar ist. Für die noch komplexeren Mehrteilchensysteme wird die Situation nicht besser. Wir benötigen also Näherungsmethoden. In diesem Abschnitt besprechen wir eine wichtige Näherungsmethode der Vielteilchentheorie, nämlich die Hartree-Fock-Näherung. Anschließend betrachten wir verschiedene Näherungen für das Wasserstoffmolekül, um den Anschluss an die Vorlesung zur Atom- und Molekülphysik herzustellen.

Der exakte Grundzustand eines wechselwirkenden Mehr-Teilchen-Systems ist i. A. kein Produktzustand. Die *Hartree-Näherung* lässt sich als Variationsansatz verstehen, bei dem dieser Zustand durch einen optimalen Produktzustand angenähert wird,

$$|\psi\rangle \approx |\nu_1, \sigma_1\rangle |\nu_2, \sigma_2\rangle \cdots |\nu_N, \sigma_N\rangle. \tag{2.227}$$

„Optimal“ bedeutet hier *mit minimaler Energie*, es handelt sich also um eine Anwendung des Ritzschen Variationsverfahrens. Wir haben aber inzwischen erkannt, dass ein solcher Produktansatz für ununterscheidbare Teilchen

nicht die richtigen Symmetrieeigenschaften hat. Die Hartree-Naherung ist daher nicht gerechtfertigt. Wir sollten stattdessen den optimalen (*anti-*) *symmetrisierten* Produktzustand suchen. Das ist die Idee der *Hartree-Fock-Naherung*. Wir beschranken uns zunachst auf Fermionen, speziell auf Elektronen. Wir werden die Naherung zuerst in der Notation der ersten Quantisierung einfuhren und dann im Formalismus der zweiten Quantisierung wiederholen, die sich auch hier als eleganter und kompakter erweist.

2.5.1 Direkte und Austausch-Wechselwirkung

Fur Elektronen besteht die Hartree-Fock-Naherung darin, einen Satz von orthonormalen Einteilchenzustanden $\{|\nu_j, \sigma_j\rangle\}$ zu finden, so dass die Slater-Determinante

$$\hat{S}_- |\nu_1, \sigma_1, \dots, \nu_N, \sigma_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\nu_1, \sigma_1\rangle^{(1)} & \dots & |\nu_1, \sigma_1\rangle^{(N)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |\nu_N, \sigma_N\rangle^{(1)} & \dots & |\nu_N, \sigma_N\rangle^{(N)} \end{vmatrix} \quad (2.228)$$

den Erwartungswert der Energie, $\langle H \rangle$, minimiert. Der Satz von Zustanden $\{|\nu_j, \sigma_j\rangle\}$ kann durch Hinzufugen orthonormaler unbesetzter Zustande zu einer Einteilchenbasis vervollstandigt werden.

Wir betrachten konkret die Coulomb-Wechselwirkung. Der Hamiltonian lautet

$$H = \underbrace{T + V}_{= H_0} + V_C \quad (2.229)$$

mit der kinetischen Energie T , dem (spinunabhangigen) Einteilchenpotential V und der Coulomb-Wechselwirkung V_C , siehe Abschnitt 2.2.3. Wir hatten gesehen, dass gilt

$$T = \sum_j \sum_{\mu_j \mu'_j} \sum_{\sigma_j} T_{\mu_j \mu'_j} |\mu_j, \sigma_j\rangle \langle \mu'_j, \sigma_j|, \quad (2.230)$$

$$V = \sum_j \sum_{\mu_j \mu'_j} \sum_{\sigma_j} V_{\mu_j \mu'_j} |\mu_j, \sigma_j\rangle \langle \mu'_j, \sigma_j| \quad (2.231)$$

(Hier ist nur der Spin-Index hinzugekommen, von dem kinetische Energie und Potential nicht abhangen sollen). Damit ist

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{p, p'} \text{sgn}(p) \text{sgn}(p') \langle \nu_{p_N}, \sigma_{p_N} | \dots \langle \nu_{p_1}, \sigma_{p_1} | \sum_j \sum_{\mu_j \mu'_j} \sum_{\sigma_j} (T_{\mu_j \mu'_j} + V_{\mu_j \mu'_j}) \\ &\quad | \mu_j, \sigma_j \rangle \langle \mu'_j, \sigma_j | | \nu_{p'_1}, \sigma_{p'_1} \rangle \dots | \nu_{p'_N}, \sigma_{p'_N} \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{p, p'} \text{sgn}(p) \text{sgn}(p') \sum_j \sum_{\mu_j \mu'_j} \sum_{\sigma_j} (T_{\mu_j \mu'_j} + V_{\mu_j \mu'_j}) \langle \nu_{p_1}, \sigma_{p_1} | \nu_{p'_1}, \sigma_{p'_1} \rangle \dots \langle \nu_{p_{j-1}}, \sigma_{p_{j-1}} | \nu_{p'_{j-1}}, \sigma_{p'_{j-1}} \rangle \\ &\quad \times \langle \nu_{p_j}, \sigma_{p_j} | \mu_j, \sigma_j \rangle \langle \mu'_j, \sigma_j | \nu_{p'_j}, \sigma_{p'_j} \rangle \langle \nu_{p_{j+1}}, \sigma_{p_{j+1}} | \nu_{p'_{j+1}}, \sigma_{p'_{j+1}} \rangle \dots \langle \nu_{p_N}, \sigma_{p_N} | \nu_{p'_N}, \sigma_{p'_N} \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{p, p'} \text{sgn}(p) \text{sgn}(p') \sum_j \sum_{\mu_j \mu'_j} \sum_{\sigma_j} (T_{\mu_j \mu'_j} + V_{\mu_j \mu'_j}) \\ &\quad \times \delta_{p_1 p'_1} \dots \delta_{p_{j-1} p'_{j-1}} \delta_{\nu_{p_j} \mu_j} \delta_{\sigma_{p_j} \sigma_j} \delta_{\mu'_j \nu_{p'_j}} \delta_{\sigma_j \sigma_{p'_j}} \delta_{p_{j+1} p'_{j+1}} \dots \delta_{p_N p'_N}, \end{aligned} \quad (2.232)$$

wobei wir verwendet haben, dass jeder Satz ν_j, σ_j von Quantenzahlen hochstens einmal auftritt. Sind die beiden Permutationen p und p' nicht identisch, so unterscheiden sie sich an mindestens *zwei* Stellen, so dass mindestens ein Kronecker- δ verschwindet. Also ergibt sich

$$\dots = \frac{1}{N!} \sum_j \sum_p (T_{\nu_{p_j} \nu_{p_j}} + V_{\nu_{p_j} \nu_{p_j}}). \quad (2.233)$$

Die $(N - 1)!$ Permutationen, die den einen Index p_j unverändert lassen, führen einfach zu einem Zählerfaktor. Mit $k := p_j$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \dots &= \underbrace{\frac{(N-1)!}{N!}}_{1/N} \sum_{jk} (T_{\nu_k \nu_k} + V_{\nu_k \nu_k}) = \sum_{k=1}^N (T_{\nu_k \nu_k} + V_{\nu_k \nu_k}) \\ &= \sum_{k=1}^N \int d^3 r \varphi_{\nu_k}^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_{\nu_k}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.234)$$

Das Ergebnis ist nicht überraschend – es ist die Summe der Erwartungswerte des Einteilchen-Hamiltonians in den besetzten Zuständen $|\nu_k, \sigma_k\rangle$.

Für die Coulomb-Wechselwirkung

$$V_C = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} \sum_{\sigma_i \sigma_j} V_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j}^C |\mu_i, \sigma_i\rangle |\mu_j, \sigma_j\rangle \langle \mu'_j, \sigma_j| \langle \mu'_i, \sigma_i| \quad (2.235)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle V_C \rangle &= \frac{1}{2} \frac{1}{N!} \sum_{p, p'} \text{sgn}(p) \text{sgn}(p') \langle \nu_{p_N}, \sigma_{p_N} | \dots \langle \nu_{p_1}, \sigma_{p_1} | \sum_{i \neq j} \sum_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} \sum_{\sigma_i \sigma_j} V_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j}^C \\ &\quad |\mu_i, \sigma_i\rangle |\mu_j, \sigma_j\rangle \langle \mu'_j, \sigma_j| \langle \mu'_i, \sigma_i| |\nu_{p'_1}, \sigma_{p'_1}\rangle \dots |\nu_{p'_N}, \sigma_{p'_N}\rangle \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{N!} \sum_{p, p'} \text{sgn}(p) \text{sgn}(p') \sum_{i \neq j} \sum_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j} \sum_{\sigma_i \sigma_j} V_{\mu_i \mu_j \mu'_i \mu'_j}^C \underbrace{\delta_{p_1 p'_1} \dots \delta_{p_N p'_N}}_{\text{ohne Teilchen } i, j} \\ &\quad \times \langle \nu_{p_i}, \sigma_{p_i} | \mu_i, \sigma_i \rangle \langle \nu_{p_j}, \sigma_{p_j} | \mu_j, \sigma_j \rangle \langle \mu'_j, \sigma_j | \nu_{p'_j}, \sigma_{p'_j} \rangle \langle \mu'_i, \sigma_i | \nu_{p'_i}, \sigma_{p'_i} \rangle. \end{aligned} \quad (2.236)$$

Für eine gegebene Permutation p ist der Summand nun i. A. für zwei p' von Null verschieden: Für $p' = p$ und für $p' = (i, j) \times p$, d. h. für den Summanden mit einer zusätzlichen Permutation von i und j . In den beiden Fällen erhalten wir

$$\begin{aligned} &\sum_{\sigma_i \sigma_j} \langle \nu_{p_i}, \sigma_{p_i} | \mu_i, \sigma_i \rangle \langle \nu_{p_j}, \sigma_{p_j} | \mu_j, \sigma_j \rangle \langle \mu'_j, \sigma_j | \nu_{p'_j}, \sigma_{p'_j} \rangle \langle \mu'_i, \sigma_i | \nu_{p'_i}, \sigma_{p'_i} \rangle \Big|_{p'=p} \\ &= \sum_{\sigma_i} \delta_{\sigma_{p_i} \sigma_i} \delta_{\sigma_i \sigma_{p_i}} \sum_{\sigma_j} \delta_{\sigma_{p_j} \sigma_j} \delta_{\sigma_j \sigma_{p_j}} \delta_{\nu_{p_i} \mu_i} \delta_{\nu_{p_j} \mu_j} \delta_{\mu'_j \nu_{p_j}} \delta_{\mu'_i \nu_{p_i}} \\ &= \delta_{\nu_{p_i} \mu_i} \delta_{\nu_{p_j} \mu_j} \delta_{\mu'_j \nu_{p_j}} \delta_{\mu'_i \nu_{p_i}} \end{aligned} \quad (2.237)$$

bzw.

$$\begin{aligned} &\sum_{\sigma_i \sigma_j} \langle \nu_{p_i}, \sigma_{p_i} | \mu_i, \sigma_i \rangle \langle \nu_{p_j}, \sigma_{p_j} | \mu_j, \sigma_j \rangle \langle \mu'_j, \sigma_j | \nu_{p'_j}, \sigma_{p'_j} \rangle \langle \mu'_i, \sigma_i | \nu_{p'_i}, \sigma_{p'_i} \rangle \Big|_{p'=(i,j) \times p} \\ &= \sum_{\sigma_i \sigma_j} \langle \nu_{p_i}, \sigma_{p_i} | \mu_i, \sigma_i \rangle \langle \nu_{p_j}, \sigma_{p_j} | \mu_j, \sigma_j \rangle \langle \mu'_j, \sigma_j | \nu_{p_i}, \sigma_{p_i} \rangle \langle \mu'_i, \sigma_i | \nu_{p_j}, \sigma_{p_j} \rangle \\ &= \sum_{\sigma_i \sigma_j} \delta_{\sigma_{p_i} \sigma_i} \delta_{\sigma_i \sigma_{p_j}} \delta_{\sigma_{p_j} \sigma_j} \delta_{\sigma_j \sigma_{p_i}} \delta_{\nu_{p_i} \mu_i} \delta_{\nu_{p_j} \mu_j} \delta_{\mu'_j \nu_{p_i}} \delta_{\mu'_i \nu_{p_j}} \\ &= \delta_{\sigma_{p_i} \sigma_{p_j}} \delta_{\nu_{p_i} \mu_i} \delta_{\nu_{p_j} \mu_j} \delta_{\mu'_j \nu_{p_i}} \delta_{\mu'_i \nu_{p_j}}. \end{aligned} \quad (2.238)$$

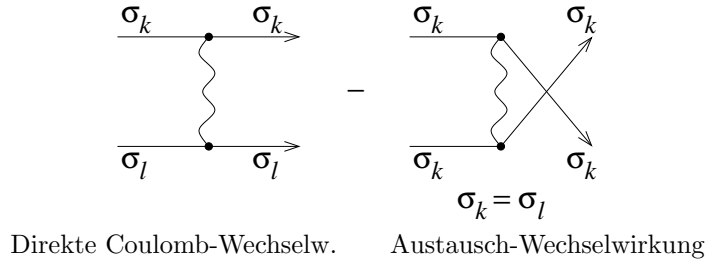
Offensichtlich ist $\text{sgn}((i, j) \times p) = -\text{sgn}(p)$. Wir erhalten

$$\langle V_C \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{N!} \sum_{i \neq j} \sum_p \left[\text{sgn}(p) \text{sgn}(p) V_{\nu_{p_i} \nu_{p_j} \nu_{p_i} \nu_{p_j}}^C + \text{sgn}(p) \text{sgn}((i, j) \times p) \delta_{\sigma_{p_i} \sigma_{p_j}} V_{\nu_{p_i} \nu_{p_j} \nu_{p_j} \nu_{p_i}}^C \right]$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \frac{1}{N!} \sum_{i \neq j} \sum_p \left(V_{\nu_{p_i} \nu_{p_j} \nu_{p_i} \nu_{p_j}}^C - \delta_{\sigma_{p_i} \sigma_{p_j}} V_{\nu_{p_i} \nu_{p_j} \nu_{p_j} \nu_{p_i}}^C \right) \quad \left| \quad k := p_i, l := p_j \right. \\
&= \frac{1}{2} \underbrace{\frac{(N-2)!}{N!}}_{\frac{1}{N(N-1)}} \sum_{i \neq j} \sum_{k \neq l} (V_{\nu_k \nu_l \nu_k \nu_l}^C - \delta_{\sigma_k \sigma_l} V_{\nu_k \nu_l \nu_l \nu_k}^C) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} (V_{\nu_k \nu_l \nu_k \nu_l}^C - \delta_{\sigma_k \sigma_l} V_{\nu_k \nu_l \nu_l \nu_k}^C) \\
&= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k \neq l} \int d^3r d^3r' \varphi_{\nu_l}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\nu_k}^*(\mathbf{r}) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [\varphi_{\nu_k}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_l}(\mathbf{r}') - \delta_{\sigma_k \sigma_l} \varphi_{\nu_l}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_k}(\mathbf{r}')]. \quad (2.239)
\end{aligned}$$

Den ersten Term hätten wir auch für unterscheidbare Teilchen bzw. Produktzustände gefunden. Dieser Term, genannt *direkte Coulomb-Wechselwirkung*, tritt auch in der Hartree-Näherung auf. Er kann als Dichte-Dichte-Wechselwirkung für die Ladungsdichte $-e|\varphi_{\nu}(\mathbf{r})|^2$ interpretiert werden.

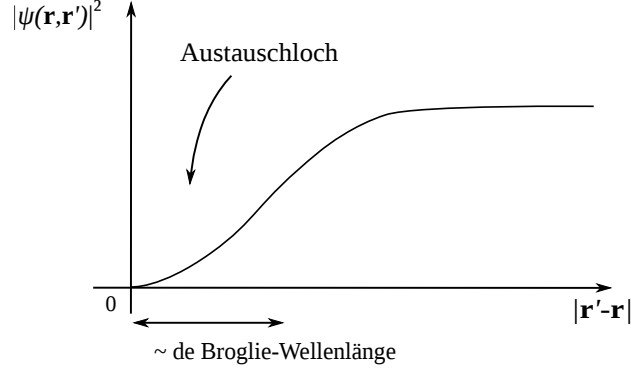
Der zweite Term beruht auf der Antisymmetrisierung, ist also ein rein quantenmechanischer Beitrag und tritt nur für ununterscheidbare Teilchen auf. Diesen Beitrag nennt man *Austausch-Wechselwirkung*, weil die Zustände ν_k, ν_l im letzten Faktor vertauscht auftreten. Dies erkennt man auch an den zugehörigen Diagrammen:



Beachte:

- Die Austausch-Wechselwirkung hat ein negatives Vorzeichen aufgrund der insgesamt ungeraden Anzahl von Permutationen in p und p' (wir hatten gesehen, dass sich p' von p um genau eine Vertauschung unterscheidet).
- Sie tritt nur zwischen Teilchen mit demselben Spin auf (beachte den Faktor $\delta_{\sigma_k \sigma_l}$).

In Gl. (2.239) hat die Austausch-Wechselwirkung ein negatives Vorzeichen, im Gegensatz zur direkten Coulomb-Wechselwirkung. Daher *schwächt* sie die Coulomb-Abstoßung aufgrund der direkten Wechselwirkung ab, aber nur für Elektronen mit demselben Spin. Zwei Elektronen mit demselben Spin befinden sich mit Sicherheit im Spin-Triplett-Zustand. Nach Abschnitt 2.2.2 ist ihre räumliche Wellenfunktion dann antisymmetrisch unter Vertauschung. Daher geht diese Wellenfunktion und damit die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2$ im Limes $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ gegen Null. Die Coulomb-Abstoßung ist daher weniger stark als für unterscheidbare Teilchen. Die Tatsache, dass die Austauschwechselwirkung vom Spin abhängt, bildet die Basis für fast alle magnetischen Effekte in Festkörpern, insbesondere für ferromagnetische und antiferromagnetische Ordnung.



2.5.2 Hartree-Fock-Gleichung

Die Aufgabe besteht nun darin, die Einteilchenzustände $|\nu_j, \sigma_j\rangle$ so zu variieren, dass der Erwartungswert

$$\langle H \rangle = \langle \nu_1, \sigma_1, \dots, \nu_N, \sigma_N | \hat{S}_-^\dagger (H_0 + V_C) \hat{S}_- | \nu_1, \sigma_1, \dots, \nu_N, \sigma_N \rangle \quad (2.240)$$

minimal wird. Dabei müssen die Nebenbedingungen der Orthonormierung erfüllt sein:

$$\langle \nu_i, \sigma_i | \nu_j, \sigma_j \rangle = \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{\sigma_i \sigma_j}. \quad (2.241)$$

Wir schreiben in der Ortsdarstellung

$$\langle \mathbf{r} | \nu_j, \sigma_j \rangle = \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) |\sigma_j\rangle, \quad (2.242)$$

wobei wir zugelassen haben, dass die Wellenfunktion vom Spin σ_j abhängt. Das ist für magnetische Systeme wichtig. Die Orthonormierungsbedingung lautet nun

$$\int d^3r \varphi_{\nu_i \sigma_i}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) \langle \sigma_i | \sigma_j \rangle = \delta_{\nu_i \nu_j} \delta_{\sigma_i \sigma_j}. \quad (2.243)$$

Der Spin-Anteil der Gleichung ist trivial erfüllt, wir müssen also nur

$$\int d^3r \varphi_{\nu_i \sigma_i}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu_i \nu_j} \quad (2.244)$$

gewährleisten. Diese Nebenbedingungen implementieren wir mit Hilfe von Lagrange-Multiplikatoren $\epsilon_{\nu_i \nu_j}$. Die Extremalbedingung lautet dann

$$\begin{aligned} \delta \left\{ \sum_j \int d^3r \varphi_{\nu_j \sigma_j}^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \int d^3r d^3r' \varphi_{\nu_j \sigma_j}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\nu_i \sigma_i}^*(\mathbf{r}) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [\varphi_{\nu_i \sigma_i}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}') - \delta_{\sigma_i \sigma_j} \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_i \sigma_i}(\mathbf{r}')] \right. \\ \left. - \sum_{ij} \epsilon_{\nu_i \nu_j} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \int d^3r \varphi_{\nu_i \sigma_i}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) \right\} = 0. \quad (2.245) \end{aligned}$$

Hier sind φ und φ^* linear unabhängig, da $\text{Re } \varphi$ und $\text{Im } \varphi$ linear unabhängig sind. (Die Komplexkonjugation $z \rightarrow z^*$ ist keine lineare Abbildung.) Die Extremalbedingung erfordert

$$0 = \frac{\delta}{\delta \varphi_{\nu_k \sigma_k}^*(\mathbf{s})} \left\{ \dots \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_j \int d^3r \delta_{jk} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{s}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \int d^3r d^3r' \left[\delta_{jk} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{s}) \varphi_{\nu_i \sigma_i}^*(\mathbf{r}) + \varphi_{\nu_j \sigma_j}^*(\mathbf{r}') \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{s}) \right] \\
&\quad \times \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left[\varphi_{\nu_i \sigma_i}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}') - \delta_{\sigma_i \sigma_j} \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu_i \sigma_i}(\mathbf{r}') \right] \\
&\quad - \sum_{ij} \epsilon_{\nu_i \nu_j} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \int d^3r \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{s}) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}) \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{s}}^2 + V(\mathbf{s}) \right) \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{s}) + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j (j \neq k)} \int d^3r' \varphi_{\nu_j \sigma_j}^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{s}|} \\
&\quad \times \left[\varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}') \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{s}) + \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{s}) \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}') - \delta_{\sigma_j \sigma_k} \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{r}') \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{s}) - \delta_{\sigma_j \sigma_k} \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{s}) \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{r}') \right] \\
&\quad - \sum_j \epsilon_{\nu_k \nu_j} \delta_{\sigma_k \sigma_j} \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{s}) \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{s}}^2 + V(\mathbf{s}) \right) \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{s}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j (j \neq k)} \int d^3r' \varphi_{\nu_j \sigma_j}^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{s}|} \\
&\quad \times \left[\varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{r}') \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{s}) - \delta_{\sigma_j \sigma_k} \varphi_{\nu_k \sigma_k}(\mathbf{r}') \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{s}) \right] - \sum_j \epsilon_{\nu_k \nu_j} \delta_{\sigma_k \sigma_j} \varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{s}). \tag{2.246}
\end{aligned}$$

Der letzte Term hat die Form einer Matrix $(\epsilon_{\nu_k \nu_j} \delta_{\sigma_k \sigma_j})$ multipliziert mit einem Vektor $(\varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{s}))$. Er vereinfacht sich, wenn wir für $(\varphi_{\nu_j \sigma_j}(\mathbf{s}))$ Eigenvektoren der Matrix wählen. Sei $(\psi_{\nu\sigma}(\mathbf{s}))$ Eigenvektor zum Eigenwert $\epsilon_{\nu\sigma} \equiv \epsilon_\nu$ (sie sind in unserem Fall unabhängig vom Spin). Die übrigen Terme behalten ihre Form, da sie ohnehin für eine beliebige Einteilchenbasis hergeleitet wurden. Mit den Umbenennungen $\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{r}$, $\nu_k \rightarrow \nu$, $\sigma_k \rightarrow \sigma$, $\nu_j \rightarrow \nu'$, $\sigma_j \rightarrow \sigma'$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
0 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu', \sigma' \\ [(\nu', \sigma') \neq (\nu, \sigma)]}} \int d^3r' \psi_{\nu' \sigma'}^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \psi_{\nu' \sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) \\
&\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu' \\ (\nu' \neq \nu)}} \int d^3r' \psi_{\nu' \sigma}^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}') \psi_{\nu' \sigma}(\mathbf{r}) - \epsilon_{\nu\sigma} \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}), \tag{2.247}
\end{aligned}$$

wobei die Summen nur über *besetzte* Einteilchenzustände zu bilden sind, weil nur diese in der angesetzten Slater-Determinante überhaupt vorkommen. Es folgt sofort die *Hartree-Fock-Gleichung*

$$\begin{aligned}
&\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu', \sigma' \\ [(\nu', \sigma') \neq (\nu, \sigma)]}} \int d^3r' \frac{|\psi_{\nu' \sigma'}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \right] \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) \\
&\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu' \\ (\nu' \neq \nu)}} \int d^3r' \frac{\psi_{\nu' \sigma}^*(\mathbf{r}') \psi_{\nu' \sigma}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\nu\sigma} \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}), \tag{2.248}
\end{aligned}$$

wobei die Summen weiterhin nur besetzte Einteilchenzustände umfassen. Der dritte (*Hartree-*) Term beschreibt die direkte Coulomb-Wechselwirkung mit den übrigen Elektronen. Er ist ohne Weiteres plausibel. Der vierte (*Austausch-* oder *Fock-*) Term ist nicht lokal, da $\psi_{\nu\sigma}$ am Ort \mathbf{r}' auftritt, und beschreibt den rein quantenmechanischen Austauscheffekt.

Die Hartree-Fock-Gleichung hat die Form einer nichtlinearen Verallgemeinerung der Einteilchen-Schrödinger-Gleichung mit Eigenenergien $\epsilon_{\nu\sigma}$. Es handelt sich formal um eine Integrodifferentialgleichung, die i. A. nicht analytisch lösbar ist. Die Lösung erfolgt daher numerisch, oft durch Iteration. Dazu nimmt man einen Satz von

orthonormalen Einteilchenwellenfunktionen an, z. B. die exakten Eigenfunktionen ohne Coulomb-Wechselwirkung, setzt diese in die nichtlinearen Terme ein, um sie linear zu machen, und löst die resultierende Gleichung vom Schrödinger-Typ numerisch. Dadurch erhält man neue Einteilchenfunktionen und die Eigenwerte $\epsilon_{\nu\sigma}$. Dieser Prozess wird mit den neuen Einteilchenfunktionen wiederholt, bis sich diese Funktionen und die Eigenwerte im Rahmen der gewünschten Genauigkeit nicht mehr ändern.

Hat man die Eigenfunktionen $\psi_{\nu\sigma}(\mathbf{k})$ bestimmt, so ergibt sich der minimale Wert der Energie, $\langle H \rangle_{\text{HF}}$, zu

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{\text{HF}} &= \sum_{\nu\sigma} \int d^3r \psi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu\nu'\sigma\sigma' \\ [(\nu,\sigma) \neq (\nu',\sigma')]} } \int d^3r d^3r' \frac{|\psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})|^2 |\psi_{\nu'\sigma'}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \\ &- \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu\nu'\sigma \\ [\nu \neq \nu']}} \int d^3r d^3r' \frac{\psi_{\nu'\sigma}^*(\mathbf{r}') \psi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}) \psi_{\nu'\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}. \end{aligned} \quad (2.249)$$

Mit der Hartree-Fock-Gleichung wird dies (beachte die Vorzeichenwechsel!)

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{\text{HF}} &= \sum_{\nu\sigma} \int d^3r \psi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}) \epsilon_{\nu\sigma} \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu\nu'\sigma\sigma' \\ [(\nu,\sigma) \neq (\nu',\sigma')]} } \int d^3r d^3r' \frac{|\psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})|^2 |\psi_{\nu'\sigma'}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \\ &+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu\nu'\sigma \\ [\nu \neq \nu']}} \int d^3r d^3r' \frac{\psi_{\nu'\sigma}^*(\mathbf{r}') \psi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}) \psi_{\nu'\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \\ &= \sum_{\nu\sigma} \epsilon_{\nu\sigma} - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu\nu'\sigma\sigma' \\ [(\nu,\sigma) \neq (\nu',\sigma')]} } \int d^3r d^3r' \frac{|\psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r})|^2 |\psi_{\nu'\sigma'}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \\ &+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu\nu'\sigma \\ [\nu \neq \nu']}} \int d^3r d^3r' \frac{\psi_{\nu'\sigma}^*(\mathbf{r}') \psi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}) \psi_{\nu'\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}, \end{aligned} \quad (2.250)$$

wobei die Summen wieder nur besetzte Zustände enthalten. Das erste Integral nennt man *Coulomb-Integral*, es beschreibt näherungsweise die direkte Coulomb-Wechselwirkung. Das zweite heißt *Austauschintegral*, es ist die Näherung für die Austauschwechselwirkung.

Beachte, dass die Summe der Hartree-Fock-Eigenenergien $\epsilon_{\nu\sigma}$ gemäß Gl. (2.248) das Coulomb-Integral zweifach mit positivem Vorzeichen und das Austauschintegral zweifach mit negativem Vorzeichen enthält. Insgesamt enthält $\langle H \rangle_{\text{HF}}$ also das Coulomb-Integral einfach positiv und das Austauschintegral einfach negativ. Das stimmt mit der vorherigen Beobachtung überein, wonach die Coulomb-Abstoßung die Energie erhöht, die Austauschwechselwirkung sie aber wieder absenkt.

Wie immer beim Ritz-Verfahren ist $\langle H \rangle_{\text{HF}}$ größer als oder gleich der exakten Grundzustandsenergie,

$$\langle H \rangle_{\text{HF}} \geq E_0 \quad (2.251)$$

Der exakte Grundzustand ist i. A. keine Slater-Determinante von Einteilchenzuständen. Der nächste Schritt zur Verbesserung der Näherung ist die sogenannte *configuration interaction (CI) approximation*. Dabei setzt man eine Superposition mehrerer Slater-Determinanten an.

Bisher haben wir die Hartree-Fock-Näherung für den Grundzustand besprochen. Die Methode lässt sich im Prinzip leicht auf allgemeine thermische Gleichgewichtszustände bei nicht verschwindenden Temperaturen verallgemeinern. Dazu werden die Erwartungswerte $\langle \dots \rangle_{\text{HF}}$ durch thermische Mittelwerte ersetzt. Diese lauten, für beliebige Observable A ,

$$\langle A \rangle_{\text{HF}} = \sum_{\nu\sigma} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\nu\sigma} - \mu)} + 1} \int d^3r \psi_{\nu\sigma}^*(\mathbf{r}) A \psi_{\nu\sigma}(\mathbf{r}). \quad (2.252)$$

Hier ist $\beta = 1/k_B T$ die inverse Temperatur und μ das chemische Potential. Der Gewichtungsfaktor $1/[e^{\beta(\epsilon_{\nu\sigma}-\mu)} + 1]$ ist natürlich die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion. Im folgenden Abschnitt werden wir die Hartree-Fock-Theorie gleich für allgemeine thermische Gleichgewichtszustände formulieren.

2.5.3 Hartree-Fock-Näherung in zweiter Quantisierung

Die Hartree-Fock-Näherung lässt sich kompakt mit Hilfe der zweiten Quantisierung formulieren. Wir suchen weiterhin einen optimalen Satz von Einteilchenzuständen $|\nu, \sigma\rangle$. Diese werden nun durch die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, $c_{\nu\sigma}^\dagger$ und $c_{\nu\sigma}$, repräsentiert. Der antisymmetrisierte Produktzustand aus den $|\nu, \sigma\rangle$ ist der Grundzustand eines gewissen *wechselwirkungsfreien* Hamiltonians. Wechselwirkungsfreie Hamiltonians sind im Formalismus der zweiten Quantisierung bilinear. Die Suche nach den optimalen Einteilchenzuständen, so dass deren antisymmetrisierter Produktzustand die Energie minimiert entspricht nun also der Suche nach dem *optimalen bilinearen Hamiltonian* zur näherungsweise Beschreibung des wechselwirkenden Systems. Der volle Hamiltonian lautet in zweiter Quantisierung

$$H = H_0 + V_C \quad (2.253)$$

mit

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.254)$$

$$V_C = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} \sum_{\sigma\sigma'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{k}''\mathbf{k}'''}^C c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}''\sigma''} c_{\mathbf{k}'''\sigma'''}, \quad (2.255)$$

wobei wir uns auf ein Band beschränkt und ausgenutzt haben, dass die Coulomb-Wechselwirkung nicht vom Spin abhängt. Die Wechselwirkung erhält darüber hinaus den Gesamtimpuls, also gilt

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{k}'' + \mathbf{k}'''. \quad (2.256)$$

Mit $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}'''$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}''$, $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'''$ können wir daher schreiben

$$V_C = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}} \sum_{\sigma_1\sigma_2} V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}}^C c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}. \quad (2.257)$$

Im Fall freier Elektronen (ohne Gitterpotential) hat $V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}}^C$ eine einfache Form:

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}}^C &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{\varphi_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_2) \varphi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2) \varphi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^{-i(\mathbf{k}_1+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{k}_2-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}_1}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} \quad \left| \Delta\mathbf{r} := \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \right. \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\mathcal{V}^2} \underbrace{\int d^3r_1}_{=\mathcal{V}} \int d^3\Delta\mathbf{r} \frac{1}{\Delta\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\cdot\Delta\mathbf{r}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{\mathbf{q}^2} =: \frac{1}{\mathcal{V}} V_C(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (2.258)$$

In diesem Fall hängt $V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{q}}^C = \frac{1}{\mathcal{V}} V_C(\mathbf{q})$ also nur vom Impulsübertrag \mathbf{q} ab.

Wir diskutieren die oft benötigte Fourier-Transformierte des Coulomb-Potentials etwas genauer. Wir schreiben \mathbf{r} anstelle von $\Delta\mathbf{r}$. Gesucht ist

$$V_C(\mathbf{q}) = \int d^3r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{r}. \quad (2.259)$$

Da dieses Integral bei großen r nicht konvergiert, regularisieren wir es durch Übergang zum *Yukawa-Potential*

$$V_Y(\mathbf{q}) = \int d^3r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} e^{-\kappa r}}{r}. \quad (2.260)$$

und lassen am Ende der Rechnung $\kappa \rightarrow 0$ gehen. Das Yukawa-Potential beschreibt eine abgeschirmte Coulomb-Wechselwirkung. Es gilt

$$\begin{aligned}
V_Y(\mathbf{q}) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int dr d\vartheta d\varphi r^2 \sin\vartheta \frac{e^{iqr \cos\vartheta} e^{-\kappa r}}{r} \\
&= \frac{e^2}{2\epsilon_0} \int_0^\infty dr r e^{-\kappa r} \underbrace{\int_{-1}^1 du e^{iqr u}}_{= \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} = 2 \frac{\sin qr}{qr}} \\
&= \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q} \underbrace{\int_0^\infty dr e^{-\kappa r} \sin qr}_{= \frac{q}{q^2 + \kappa^2}} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2 + \kappa^2}.
\end{aligned} \tag{2.261}$$

Im Limes $\kappa \rightarrow 0$ erhalten wir

$$V_C(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2}. \tag{2.262}$$

Dieses Ergebnis erhält man übrigens sofort aus der Poisson-Gleichung für eine Punktladung:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{e^2}{\epsilon_0} \delta(\mathbf{r}). \tag{2.263}$$

Mittels Fourier-Transformation folgt

$$-q^2 \phi(\mathbf{q}) = -\frac{e}{\epsilon_0} \tag{2.264}$$

$$\Rightarrow \phi(\mathbf{q}) = \frac{e}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2} \tag{2.265}$$

$$\Rightarrow V_C(\mathbf{q}) = e \phi(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2}. \tag{2.266}$$

Die Abhängigkeit $1/q^2$ ist unabhängig von der Dimension des Raumes und ist in gewissem Sinne fundamentaler als das Coulomb- $1/r$ -Gesetz, das speziell für drei Dimensionen gilt.

Nun wollen wir $H = H_0 + V_C$ durch einen bilinearen Ausdruck annähern. Im Wesentlichen machen wir eine *Mean-Field-Näherung*. Zur Wiederholung: Für zwei Observablen A, B schreiben wir

$$A = \langle A \rangle + \delta A, \tag{2.267}$$

$$B = \langle B \rangle + \delta B, \tag{2.268}$$

wobei $\langle A \rangle$ und $\langle B \rangle$ die thermischen Mittelwerte von A und B sind (im Grenzfall $T \rightarrow 0$ werden daraus die Erwartungswerte im Grundzustand). Damit sind δA und δB die Operatoren der Abweichungen von diesen Mittelwerten. Man kann daher sagen, dass δA und δB die Fluktuationen der Observablen repräsentieren. Damit wird

$$AB = \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \delta B + \delta A \langle B \rangle + \delta A \delta B \tag{2.269}$$

und die Mean-Field-Näherung besteht im Weglassen der „von höherer Ordnung kleinen“ Terme $\delta A \delta B$:

$$\begin{aligned}
AB &\cong \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \delta B + \delta A \langle B \rangle \\
&= \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle (B - \langle B \rangle) + (A - \langle A \rangle) \langle B \rangle \\
&= \langle A \rangle B + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle.
\end{aligned} \tag{2.270}$$

Wenn wir dieses Schema naiv auf V_C anwenden, erhalten wir

$$A = c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}, \tag{2.271}$$

$$B = c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}, \quad (2.272)$$

also

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} &\cong \langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} + c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle \\ &- \langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle \langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle. \end{aligned} \quad (2.273)$$

Das ist die Hartree-Naherung. Jedoch ist unsere Wahl der Operatoren A, B nicht die einzig mogliche. Ebenso gut ist

$$A' = c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}, \quad (2.274)$$

$$B' = c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}. \quad (2.275)$$

Um auf die Form $A'B'$ zu kommen, bedarf es einer ungeraden Zahl von Vertauschungen, daher erhalt der gesamte Term ein zusatzliches Minuszeichen. Die Hartree-Fock-Naherung besteht nun darin, die beiden Moglichkeiten zu addieren. Dazu zwei Bemerkungen:

- Warum das vernunftig ist und insbesondere keine Faktoren von $1/2$ auftreten, wird in der Vielteilchentheorie diskutiert. Stichwort: Wick-Theorem.
- Es gibt drei Moglichkeiten, aus vier Objekten zwei Paare zu bilden. Die dritte ergibt die Definitionen $A'' = c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger, B'' = c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}$. Diese Operatoren erhalten nicht die Teilchenzahl. Ihre Mittelwerte verschwinden daher im Allgemeinen. In der Theorie der Supraleitung sind sie jedoch entscheidend. In der Bardeen-Cooper-Schrieffer- (BCS-) Theorie der Supraleitung wird gerade diese dritte Entkopplung gewahlt.

In der Hartree-Fock-Naherung erhalten wir

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} &\cong \langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} + c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle \\ &- \langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle \langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle \\ &- \langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} - c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle \\ &+ \langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle \langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle. \end{aligned} \quad (2.276)$$

Die letzten drei sind hier die Austausch- (Fock-) Terme. Unter der Annahme, dass die Wechselwirkung weder die Translations- noch die Spin-Rotations-Symmetrie bricht, konnen wir schreiben

$$\langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle = \delta_{\mathbf{q}0} \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}_1}}{2}, \quad (2.277)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle = \delta_{\mathbf{q}0} \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}_2}}{2}, \quad (2.278)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}_2}}{2}, \quad (2.279)$$

$$\langle c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \rangle = \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}_1}}{2}. \quad (2.280)$$

Hier ist $\bar{n}_{\mathbf{k}} := \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \in [0, 2]$ der thermische Mittelwert der Teilchenzahl fur den Impuls \mathbf{k} und beliebige Spin-Einstellung. Damit ist

$$\begin{aligned} H \cong H_{\text{HF}} &:= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\xi_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, 0}^C \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}'}}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', 0}^C \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}'}}{2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k}}^C \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}'}}{2} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{k}'}^C \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}'}}{2} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{const} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\xi_{\mathbf{k}} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, 0}^C \bar{n}_{\mathbf{k}'}}_{\text{Hartree-Term}} - \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{k}'}^C \bar{n}_{\mathbf{k}'}}_{\text{Fock-Term}} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{const}. \end{aligned} \quad (2.281)$$

Beachte, dass der Hartree-Term einen Faktor 2 von der Summe über σ' enthält, der Fock-Term aber nicht. Außerdem haben wir die Symmetrie $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',-\mathbf{q}}^C = V_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}^C$ ausgenutzt (ohne Beweis; für freie Elektronen, $V_C \sim 1/q^2$, gilt dies offensichtlich).

Der Hartree-Term enthält das Matrixelement $V_{\mathbf{k}',\mathbf{k},0}^C$ für den Impulsübertrag 0. Wie die Form für freie Elektronen zeigt, siehe Gl. (2.258), ist dieses Matrixelement divergent. Jedoch ergibt die Wechselwirkung der Elektronen mit dem mittleren Potential der Kerne einen betragsmäßig gleichen, aber negativen Term, der den Hartree-Beitrag gerade weghebt.

Im nächsten Schritt müssten wir

$$\bar{n}_{\mathbf{k}} = \sum_{\sigma} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \quad (2.282)$$

selbstkonsistent mit Hilfe des *genäherten* (Hartree-Fock-) Hamiltonians H_{HF} bestimmen und das Ergebnis in H_{HF} einsetzen. Da H_{HF} bereits diagonal ist (ansonsten müssten wir noch einen Diagonalisierungsschritt einschieben), lauten die mittleren thermischen Besetzungszahlen einfach

$$\bar{n}_{\mathbf{k}} = \sum_{\sigma} \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \mu)} + 1} = \frac{2}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} - \mu)} + 1} \quad (2.283)$$

mit $\beta = 1/k_B T$ und

$$E_{\mathbf{k}}^{\text{HF}} = \xi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k},0}^C \bar{n}_{\mathbf{k}'} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^C \bar{n}_{\mathbf{k}'}. \quad (2.284)$$

Das chemische Potential μ ist so zu bestimmen, dass

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{k}} \quad (2.285)$$

die korrekte Elektronenzahl ergibt. Die praktische Rechnung erfolgt wieder durch Iteration. Man kann zeigen, dass dieses Verfahren zum oben für die erste Quantisierung diskutierten äquivalent ist.

Ein scheinbares Problem haben wir bisher ignoriert: Der Hartree-Term lautet für freie Elektronen (ohne periodisches Potential)

$$\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}',\mathbf{k},0}^C \bar{n}_{\mathbf{k}'} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{0} \bar{n}_{\mathbf{k}'}, \quad (2.286)$$

ist also divergent. Diese divergente Energie repräsentiert die direkte Coulomb-Wechselwirkung des betrachteten Elektrons mit der mittleren Dichte aller übrigen. Sie wäre für Elektronen im Vakuum tatsächlich divergent – das Ergebnis ist korrekt. Im Festkörper wird die Divergenz aber von der anziehenden Wechselwirkung mit dem mittleren Kernpotential kompensiert.

2.5.4 Das Wasserstoffmolekül

Zur Illustration des Pauli-Prinzips und der Austauschwechselwirkung betrachten wir das H_2 -Molekül aus zwei Protonen und zwei Elektronen. Die Protonen bewegen sich aufgrund ihrer großen Masse viel langsamer als die Elektronen und können im Folgenden als ruhend betrachtet werden. Dann lautet der Hamiltonian in erster Quantisierung

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{iA}} + \frac{1}{r_{iB}} \right) \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{AB}} \right) \quad (2.287)$$

mit den Abständen der Elektronen von den Protonen,

$$r_{iJ} := |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_J|, \quad i = 1, 2, \quad J = A, B, \quad (2.288)$$

dem Abstand der Elektronen voneinander,

$$r_{12} := |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, \quad (2.289)$$

und dem Abstand der Protonen voneinander,

$$r_{AB} := |\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|. \quad (2.290)$$

H kommutiert mit dem Gesamtspin $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ der Elektronen. Daher können wir die Eigenzustände von H zugleich als Eigenzustände $|s, m\rangle$ von \mathbf{S}^2 und S_z wählen.

Diese Spin-Zustände sind bekannt: Es gibt einen Singulett-Zustand

$$|0, 0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.291)$$

sowie drei Triplett-Zustände

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (2.292)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.293)$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (2.294)$$

Wir wissen aus Abschnitt 2.2.1, dass die räumliche Wellenfunktion für das Singulett (Triplett) symmetrisch (antisymmetrisch) sein muss. Sie lässt sich aber nicht exakt bestimmen; das Problem ist die Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{12}}. \quad (2.295)$$

Man könnte nun die Hartree-Fock-Näherung auf das Zwei-Elektronen-Problem anwenden. Wir gehen hier einen anderen Weg: Als grobe Näherung, die aber die Diskussion der wesentlichen Effekte gestattet, nehmen wir an, dass die Wellenfunktion allein durch die Grundzustandswellenfunktionen

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_B^{3/2}} e^{-r/a_B} \quad (2.296)$$

der beiden H-Atome approximiert werden kann (a_B ist der Bohr-Radius). Der räumliche *Einteilchen*-Hilbertraum ist also zweidimensional und wird von

$$|\psi_0^A\rangle, \quad |\psi_0^B\rangle \quad (2.297)$$

aufgespannt, wobei gilt

$$\langle \mathbf{r} | \psi_0^A \rangle = \psi_0^A(\mathbf{r}) = \psi_{100}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A), \quad (2.298)$$

$$\langle \mathbf{r} | \psi_0^B \rangle = \psi_0^B(\mathbf{r}) = \psi_{100}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B). \quad (2.299)$$

Da $|\psi_0^A\rangle$ und $|\psi_0^B\rangle$ zu verschiedenen Atomen gehören, sind sie nicht orthogonal. Ihr *Überlappintegral* ist

$$I_{AB} = \langle \psi_0^A | \psi_0^B \rangle = \frac{1}{\pi a_B^3} \int d^3r e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_A|}{a_B}} e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_B|}{a_B}} = \left(1 + \frac{r_{AB}}{a_B} + \frac{r_{AB}^2}{3a_B^2}\right) e^{-r_{AB}/a_B} \quad (2.300)$$

mit $r_{AB} = |\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|$. Es ist offensichtlich ungleich Null, wird aber für große Kernabstände r_{AB} exponentiell klein.

Für den Singulett-Zustand finden wir die (symmetrischen) Wellenfunktionen

$$\psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_2), \quad (2.301)$$

$$\frac{\psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) + \psi_0^B(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}\sqrt{1+I_{AB}^2}}, \quad (2.302)$$

$$\psi_0^B(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2). \quad (2.303)$$

Diese sind linear unabhängig, aber nicht orthogonal, und spannen einen dreidimensionalen Zweiteilchen-Hilbertraum auf. Das Problem ist jetzt im Prinzip ohne weitere Näherungen lösbar, da es auf die Diagonalisierung einer 3×3 -Matrix hinausläuft.

Wir nähern aber noch weiter. In den Zuständen

$$\psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_2), \quad \psi_0^B(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \quad (2.304)$$

befinden sich beide Elektronen bevorzugt in der Nähe *desselben* Protons. Ihre Coulomb-Abstoßung ist daher besonders groß. Die *Heitler-London-Näherung* besteht darin, diese Zustände zu vernachlässigen. Dann ist die Wellenfunktion im Singulett-Zustand

$$\varphi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) + \psi_0^B(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}\sqrt{1+I_{AB}^2}}. \quad (2.305)$$

Im Triplett-Zustand kann die (antisymmetrische) Wellenfunktion nur lauten

$$\varphi_t(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) - \psi_0^B(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}\sqrt{1-I_{AB}^2}}. \quad (2.306)$$

Die entsprechenden Dichten

$$n_{s,t}(\mathbf{r}) := \int d^3r' |\varphi_{s,t}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \equiv \int d^3r' |\varphi_{s,t}(\mathbf{r}', \mathbf{r})|^2 \quad (2.307)$$

sind hier skizziert:



Die Aufgabe ist nun festzustellen, welcher der beiden Zustände bei welchem Kernabstand r_{AB} den Energieerwartungswert $\langle H \rangle$ minimiert. Wir müssen also die Erwartungswerte $\langle \phi_s | H | \phi_s \rangle$ und $\langle \phi_t | H | \phi_t \rangle$ ausrechnen. Dafür benötigen wir einige Integrale. Zunächst berechnen wir, mit dem exakten Hamiltonian H des Wasserstoffmoleküls,

$$\begin{aligned} & \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) H \psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \\ &= \int d^3r_1 \psi_0^A(\mathbf{r}_1) \left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{1A}} \right) \psi_0^A(\mathbf{r}_1) \int d^3r_2 \psi_0^B(\mathbf{r}_2)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \\ & \quad + \int d^3r_1 \psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_1) \int d^3r_2 \psi_0^B(\mathbf{r}_2) \left(\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{2B}} \right) \psi_0^B(\mathbf{r}_2) \\ & \quad - \int d^3r_1 \psi_0^A(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{1B}} \psi_0^A(\mathbf{r}_1) \int d^3r_2 \psi_0^B(\mathbf{r}_2)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \\ & \quad - \int d^3r_1 \psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_1) \int d^3r_2 \psi_0^B(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{2A}} \psi_0^B(\mathbf{r}_2) \\ & \quad + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{AB}} \int d^3r_1 \psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^A(\mathbf{r}_1) \int d^3r_2 \psi_0^B(\mathbf{r}_2)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \\ & \quad + \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{12}} \psi_0^A(\mathbf{r}_1)\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \\ &= 2E_0 + C_{AB}. \end{aligned} \quad (2.308)$$

Hier ist $E_0 = -1$ Ry die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms aus der Schrödinger-Gleichung

$$\left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{iA}} \right) \psi_0^A(\mathbf{r}_i) = E_0 \psi_0^A(\mathbf{r}_i) \quad (2.309)$$

und C_{AB} ist das (verallgemeinerte) Coulomb-Integral

$$C_{AB} := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{r_{AB}} - \int d^3r_1 \frac{|\psi_0^A(\mathbf{r}_1)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_B|} - \int d^3r_2 \frac{|\psi_0^B(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_A|} + \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\psi_0^A(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_0^B(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\}. \quad (2.310)$$

Analog gilt

$$\int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^B(\mathbf{r}_1) \psi_0^A(\mathbf{r}_2) H \psi_0^B(\mathbf{r}_1) \psi_0^A(\mathbf{r}_2) = 2E_0 + C_{AB}. \quad (2.311)$$

Andererseits ist

$$\int d^3r_1 d^3r_2 \psi_0^A(\mathbf{r}_1) \psi_0^B(\mathbf{r}_2) H \psi_0^B(\mathbf{r}_1) \psi_0^A(\mathbf{r}_2) = 2E_0 I_{AB}^2 + J_{AB} \quad (2.312)$$

mit dem (verallgemeinerten) Austauschintegral

$$J_{AB} := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{r_{AB}} I_{AB}^2 - \int d^3r_1 \frac{\psi_0^A(\mathbf{r}_1) \psi_0^B(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_B|} I_{AB} - \int d^3r_2 \frac{\psi_0^B(\mathbf{r}_2) \psi_0^A(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_A|} I_{AB} + \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{\psi_0^A(\mathbf{r}_1) \psi_0^B(\mathbf{r}_2) \psi_0^B(\mathbf{r}_1) \psi_0^A(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\}. \quad (2.313)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} E_s := \langle \varphi_s | H | \varphi_s \rangle &= \frac{1}{2(1 + I_{AB}^2)} (4E_0 + 2C_{AB} + 4E_0 I_{AB}^2 + 2J_{AB}) \\ &= 2E_0 + \frac{C_{AB} + J_{AB}}{1 + I_{AB}^2}, \end{aligned} \quad (2.314)$$

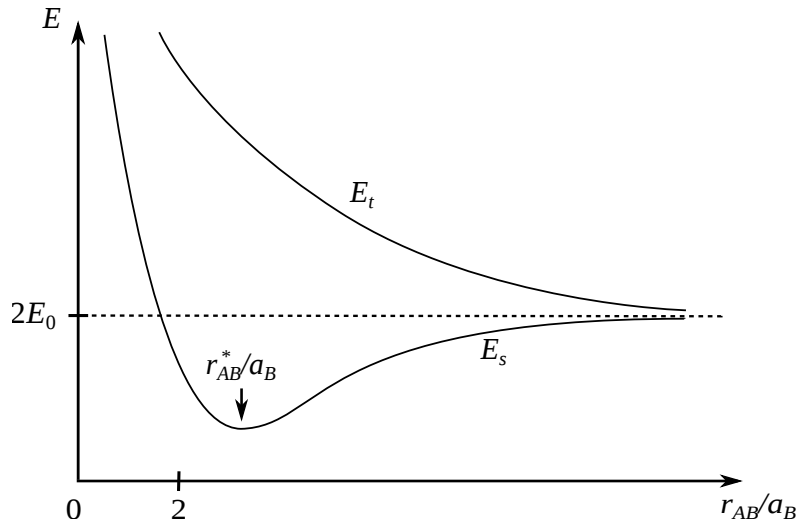
$$\begin{aligned} E_t := \langle \varphi_t | H | \varphi_t \rangle &= \frac{1}{2(1 - I_{AB}^2)} (4E_0 + 2C_{AB} - 4E_0 I_{AB}^2 - 2J_{AB}) \\ &= 2E_0 + \frac{C_{AB} - J_{AB}}{1 - I_{AB}^2}. \end{aligned} \quad (2.315)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} E_t - E_s &= \frac{C_{AB} - J_{AB}}{1 - I_{AB}^2} - \frac{C_{AB} + J_{AB}}{1 + I_{AB}^2} \\ &= \frac{(C_{AB} - J_{AB})(1 + I_{AB}^2) - (C_{AB} + J_{AB})(1 - I_{AB}^2)}{1 - I_{AB}^4} \\ &= 2 \frac{C_{AB} I_{AB}^2 - J_{AB}}{1 - I_{AB}^4}. \end{aligned} \quad (2.316)$$

Die Integrale C_{AB} und J_{AB} lassen sich numerisch berechnen. Sie hängen von dem einzigen Parameter r_{AB}/a_B ab. Man findet, dass $J_{AB} < 0$ ist, aber C_{AB} das Vorzeichen wechselt. Insgesamt ist jedoch $E_t - E_s > 0$ für alle r_{AB} . Der Grundzustand des H_2 -Moleküls ist also in jedem Fall ein Singulett. Beachte, dass sich hier eine *magnetische* Wechselwirkung – antiparallele Spins sind energetisch günstiger als parallele – aus der rein elektrischen Coulomb-Wechselwirkung und dem Pauli-Prinzip ergibt. Dies – und nicht etwa die magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung – ist auch der wesentliche Ursprung von Magnetismus in Festkörpern.

Weiter findet man, dass E_s , aber nicht E_t , ein Minimum als Funktion von r_{AB} hat:



Damit gibt es einen *gebundenen Zustand* mit dem Kernabstand r_{AB}^* , wobei

$$\left. \frac{dE}{dr_{AB}} \right|_{r_{AB}=r_{AB}^*} = 0. \quad (2.317)$$

Die Austauschwechselwirkung, und damit der Term J_{AB} , ist ein quantenmechanischer Effekt. Die Austauschwechselwirkung ist notwendig für eine korrekte Beschreibung der kovalenten Bindung im H_2 -Molekül und auch ganz allgemein. Trotz der groben Näherungen liegen die quantitativen Ergebnisse für H_2 in der richtigen Größenordnung:

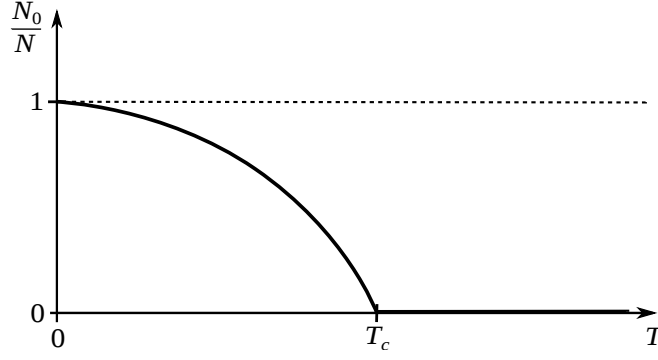
	r_{AB}^*	$E_s(r_{AB}^*) - 2E_0$
Heitler-London	0,869 Å	-3,14 eV
Hartree-Fock (zum Vergleich)	0,73 Å	-3,63 eV
experimentell	0,74 Å	-4,73 eV

2.6 Bosonen

In den letzten beiden Abschnitten haben wir uns mit Fermionen, insbesondere Elektronen, befasst. In diesem sehr kurzen Abschnitt am Ende des Kapitels zur Mehrteilchen-Quantentheorie wenden wir uns Bosonen zu. Wir diskutieren den Grundzustand eines freien Bose-Gases und die Hartree-Fock-Näherung für Bosonen.

Der Grundzustand eines Systems von wechselwirkungsfreien, ununterscheidbaren Fermionen ist der Fermi-See. Was ist der Grundzustand von wechselwirkungsfreien, ununterscheidbaren Bosonen? Die Antwort hängt davon ab, ob die Teilchenzahl erhalten ist:

- Teilchenzahl nicht erhalten (Photonen, Phononen, ...): Der Grundzustand enthält keine Teilchen (Vakuum).
- Teilchenzahl erhalten (^4He -Atome, ^{87}Rb -Atome): Im Grundzustand befinden sich alle N Teilchen im *Einteilchen*-Grundzustand. Wir nehmen hier an, dass dieser nicht entartet ist. Wir wissen aus der Quantenstatistik, dass in $d \geq 3$ Dimensionen auch für endliche Temperaturen $0 < T < T_c$ eine *makroskopische* (extensive) Zahl N_0 von Teilchen im Einteilchengrundzustand bleibt. Dies ist das Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation.



Für wechselwirkende, geladene Bosonen verläuft die Berechnung der Wechselwirkung analog zu den Fermionen, mit einem wichtigen Unterschied: Die Austausch-Wechselwirkung hat für Bosonen *dasselbe* Vorzeichen wie die direkte Coulomb-Wechselwirkung, *verstärkt* also die Abstoßung. Das Vorzeichen beruht darauf, dass bosonische Operatoren in zweiter Quantisierung vertauschen, während fermionische Operatoren antivertauschen. Physikalisch ist die Ursache, dass sich Bosonen mit größerer Wahrscheinlichkeit nahe beieinander aufhalten als unterscheidbare Teilchen und sich daher stärker abstoßen.

Die Hartree-Fock-Näherung ist ebenfalls analog, bis auf das relative Plus-Zeichen von Hartree- und Fock-Term. Die Näherung lautet also in zweiter Quantisierung

$$\begin{aligned}
b_{\nu'_1}^\dagger b_{\nu'_2}^\dagger b_{\nu_2} b_{\nu_1} &\cong \langle b_{\nu'_1}^\dagger b_{\nu_1} \rangle b_{\nu'_2}^\dagger b_{\nu_2} + b_{\nu'_1}^\dagger b_{\nu_1} \langle b_{\nu'_2}^\dagger b_{\nu_2} \rangle - \langle b_{\nu'_1}^\dagger b_{\nu_1} \rangle \langle b_{\nu'_2}^\dagger b_{\nu_2} \rangle \\
&\quad + \langle b_{\nu'_1}^\dagger b_{\nu_2} \rangle b_{\nu'_2}^\dagger b_{\nu_1} + b_{\nu'_1}^\dagger b_{\nu_2} \langle b_{\nu'_2}^\dagger b_{\nu_1} \rangle - \langle b_{\nu'_1}^\dagger b_{\nu_2} \rangle \langle b_{\nu'_2}^\dagger b_{\nu_1} \rangle
\end{aligned} \tag{2.318}$$

und in der Impulsraumbasis für spinlose Bosonen

$$\begin{aligned}
b_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_1} &\cong \langle b_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_1} \rangle b_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2} + b_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_1} \langle b_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2} \rangle - \langle b_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_1} \rangle \langle b_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2} \rangle \\
&\quad + \langle b_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2} \rangle b_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_1} + b_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2} \langle b_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_1} \rangle - \langle b_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_2} \rangle \langle b_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{k}_1} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.319}$$

Kapitel 3

Relativistische Quantentheorie

Dieses zweite große Kapitel der Vorlesung beschäftigt sich mit Versuchen, eine Einteilchen-Quantentheorie zu entwickeln, die gleichzeitig kovariant ist, d. h. im Einklang mit der Speziellen Relativitätstheorie steht. Wir werden sehen, dass es dabei entscheidend auf den Boson- oder Fermion-Charakter und damit auf den Spin der Teilchen ankommt – die relativistische Quantentheorien für Bosonen und für Fermionen sind strukturell verschieden. Der Versuch wird sich als nur teilweise erfolgreich erweisen; es zeigen sich Schwierigkeiten, die nur im Rahmen einer Mehrteilchen-Quantentheorie bzw. Feldtheorie überwunden werden können.

Die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.1)$$

ist sicherlich nicht relativistisch kovariant, da sie den Ort \mathbf{r} und die Zeit t nicht gleichartig behandelt: Sie enthält eine erste Ableitung nach t , aber eine zweite nach \mathbf{r} . Tatsächlich beruht die Schrödinger-Gleichung auf der nicht-relativistischen kinetischen Energie $\mathbf{p}^2/2m$. Genauer ergibt sich für ein Wellenpaket

$$\langle H \rangle \equiv \langle \psi | H | \psi \rangle = \frac{\langle \mathbf{p}^2 \rangle}{2m}, \quad (3.2)$$

also finden wir als klassischen Grenzfall

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (3.3)$$

im Widerspruch zur Speziellen Relativitätstheorie. Wir erwarten also, dass die Voraussagen der Schrödinger-Gleichung nicht stimmen, wenn typische Geschwindigkeiten nicht $v \ll c$, mit der Lichtgeschwindigkeit c , erfüllen. Dann sollte nämlich im klassischen Grenzfall für das freie Teilchen die relativistische Beziehung

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \quad (3.4)$$

herauskommen. In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit der relativistischen, d. h. kovarianten, Quantentheorie für Einteilchensysteme.

3.1 Spezielle Relativitätstheorie

Zur Vorbereitung auf die relativistische Quantentheorie beginnen wir in diesem Abschnitt mit einer Wiederholung von Konzepten und Schreibweisen der Speziellen Relativitätstheorie. Wir besprechen zunächst die relevanten Definitionen und die relativistische Kinematik und Mechanik. Dann kommen wir zur kovarianten Formulierung der Elektrodynamik.

Zentral ist der Begriff des *Inertialsystems*. Ein Inertialsystem ist ein Bezugssystem, d. h. ein Koordinatensystem in der $(3+1)$ -dimensionalen Raumzeit, dem *Minkowski-Raum*, in dem sich ein kräftefreier Körper geradlinig und gleichförmig bewegt. Die Existenz von Inertialsystemen wird von Newtons 1. Axiom postuliert, das weiterhin gültig bleibt. Einstein formulierte nun folgende Postulate:

1. *Äquivalenzpostulat*: Die physikalischen Gesetze sind in allen Inertialsystemen identisch (das ist noch nicht beschränkt auf die relativistische Physik).
2. *Konstanz der Lichtgeschwindigkeit*: Die Lichtgeschwindigkeit c im Vakuum ist zu allen Zeiten, an allen Orten und in jeder Raumrichtung gleich groß und insbesondere unabhängig von den Bewegungen der Quelle und des Detektors. Damit ist $c = \text{const}$ ein physikalisches Gesetz im Sinne des Äquivalenzpostulats. Das 2. Postulat geht sogar darüber hinaus, da es $c = \text{const}$ auch für beschleunigte Bezugssysteme fordert.

3.1.1 Viererschreibweise und relativistische Mechanik

Die Transformation zwischen verschiedenen Inertialsystemen wird durch *allgemeine Lorentz-Transformationen* vermittelt. Diese bilden die *Lorentz-Gruppe* mit 6 Generatoren:

- Lorentz-Boosts für die Relativgeschwindigkeit \mathbf{v} in 3 unabhängigen Richtungen (bilden die *speziellen Lorentz-Transformationen*),
- räumliche Drehungen in 3 unabhängigen Ebenen.

Für Koordinaten \mathbf{r}, t im Inertialsystem \mathcal{S} und $\underline{\mathbf{r}}, \underline{t}$ im Inertialsystem $\underline{\mathcal{S}}$ lautet die spezielle Lorentz-Transformation für einen Boost in x -Richtung (o. B. d. A.), also für die Relativgeschwindigkeit $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{x}}$,

$$\underline{x} = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (3.5) \qquad x = \frac{\underline{x} + v\underline{t}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (3.6)$$

$$\underline{t} = \frac{t - \frac{v}{c^2}x}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (3.7) \qquad t = \frac{\underline{t} + \frac{v}{c^2}\underline{x}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (3.8)$$

$$\underline{y} = y, \quad \underline{z} = z. \quad (3.9)$$

Die Lorentz-Transformationen lassen sich als verallgemeinerte Rotationen von *Vierervektoren* auffassen. Den *Vierervektor* schreiben wir als

$$(x^\mu) = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) = (ct, \mathbf{r}). \quad (3.10)$$

Wir verwenden hier die Schreibweise (x^μ) , wenn wir den Vektor meinen, und x^μ für die μ -te Komponente. Damit lautet die spezielle Lorentz-Transformation für den Boost in die Richtung $x = x^1$,

$$\underline{x}^\mu = L^\mu_\nu x^\nu \quad (3.11)$$

(mit Einsteinscher Summenkonvention: über identische obere und untere Indizes wird summiert, hier über $\nu = 0, 1, 2, 3$), wobei

$$(L^\mu_\nu) = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

mit

$$\beta := \frac{v}{c}, \quad (3.13)$$

$$\gamma := \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (3.14)$$

Da die Transformation linear ist, finden wir

$$\frac{\partial \underline{x}^\mu}{\partial x^\nu} = L^\mu_\nu. \quad (3.15)$$

Definitionen:

- *Kontravarianter Vektor* $(a^\mu) = (a^0, a^1, a^2, a^3)$: Transformiert sich wie (x^μ) , also

$$\underline{a}^\mu = \frac{\partial \underline{x}^\mu}{\partial x^\nu} a^\nu \equiv L^\mu{}_\nu a^\nu. \quad (3.16)$$

- *Kovarianter Vektor* $(a_\mu) = (a_0, a_1, a_2, a_3)$: Transformiert sich gemäß

$$\underline{a}_\mu = \frac{\partial x^\nu}{\partial \underline{x}^\mu} a_\nu =: L_\mu{}^\nu a_\nu. \quad (3.17)$$

Es folgt mit Hilfe der Kettenregel

$$L^\mu{}_\nu L_\lambda{}^\nu = \frac{\partial \underline{x}^\mu}{\partial x^\nu} \frac{\partial x^\nu}{\partial \underline{x}^\lambda} = \frac{\partial \underline{x}^\mu}{\partial \underline{x}^\lambda} = \delta_\lambda^\mu, \quad (3.18)$$

wobei δ_λ^μ bis auf die Stellung der Indizes das gewöhnliche Kronecker-Symbol ist. $(L_\mu{}^\nu)$ ist also die inverse Matrix zu $(L^\mu{}_\nu)$.

- Allgemeiner definiert man Tensoren 2., 3., usw. Stufe, wobei jeder Index kontra- oder kovariant sein kann. Z. B. transformiert sich $(A^{\mu\nu})$ gemäß

$$\underline{A}^{\mu\nu} = \frac{\partial \underline{x}^\mu}{\partial x^\rho} \frac{\partial \underline{x}^\nu}{\partial x^\sigma} A^{\rho\sigma} \equiv L^\mu{}_\rho L^\nu{}_\sigma A^{\rho\sigma} \quad (3.19)$$

und analog

$$\underline{A}_{\mu\nu} = L_\mu{}^\rho L_\nu{}^\sigma A_{\rho\sigma}, \quad (3.20)$$

$$\underline{A}^\mu{}_\nu = L^\mu{}_\rho L_\nu{}^\sigma A^\rho{}_\sigma, \quad (3.21)$$

$$\underline{A}_\mu{}^\nu = L_\mu{}^\rho L^\nu{}_\sigma A_\rho{}^\sigma. \quad (3.22)$$

Die Reihenfolge der Indizes ist wesentlich. Für Tensoren höherer Stufe funktioniert die Transformation analog, z. B.

$$\underline{B}^{\lambda\mu\nu} = L^\lambda{}_\rho L^\mu{}_\sigma L^\nu{}_\tau B^{\rho\sigma\tau}. \quad (3.23)$$

Zu jedem kontravarianten Vektor existiert ein kovarianter Vektor und umgekehrt. Allgemeiner kann man alle Indizes von Tensoren zwischen kontravariant und kovariant umwandeln („heben“ oder „senken“). Dies erfolgt mit Hilfe des *metrischen Tensors* $(g_{\mu\nu})$:

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu, \quad (3.24)$$

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu, \quad (3.25)$$

$$A_{\mu\nu} = g_{\mu\rho} A^\rho{}_\nu = g_{\mu\rho} g_{\nu\sigma} A^{\rho\sigma} = g_{\nu\sigma} A_\mu{}^\sigma \quad (3.26)$$

usw. In der Speziellen Relativitätstheorie ist

$$(g^{\mu\nu}) = (g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

In der Allgemeinen Relativitätstheorie ist $(g^{\mu\nu}(x^\lambda))$ hingegen ein dynamisches Feld, dessen Bewegungsgleichung die Einsteinsche Feldgleichung ist.

Aus $(x^\mu) = (ct, \mathbf{r})$ folgt also

$$(x_\mu) = (ct, -\mathbf{r}). \quad (3.28)$$

- Das (verallgemeinerte) *Skalarprodukt* ist definiert durch

$$a^\mu b_\mu = g_{\mu\nu} a^\mu b^\nu = g_{\nu\mu} a^\mu b^\nu = a_\nu b^\nu. \quad (3.29)$$

Man findet

$$\begin{aligned} \underline{a}^\mu \underline{b}_\mu &= L^\mu{}_\nu L_\mu{}^\lambda a^\nu b_\lambda \equiv \frac{\partial x^\mu}{\partial x^\nu} \frac{\partial x^\lambda}{\partial x^\mu} a^\nu b_\lambda \\ &= \frac{\partial x^\lambda}{\partial x^\nu} a^\nu b_\lambda \quad \left| \text{Kettenregel} \right. \\ &= a^\nu b_\nu. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Das Skalarprodukt ist also invariant unter Lorentz-Transformationen (*Lorentz-invariant*).

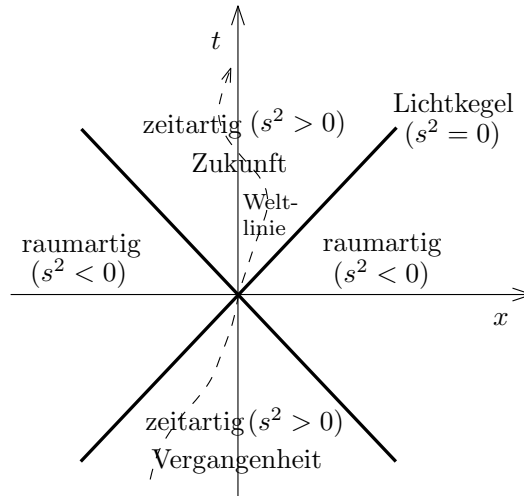
- *Lorentz-Skalare* sind Größen, die sich unter Lorentz-Transformationen nicht ändern, z. B. Skalarprodukte.
- *Betragsquadrat*:

$$a^\mu a_\mu = g_{\mu\nu} a^\mu a^\nu = (a^0)^2 - (a^1)^2 - (a^2)^2 - (a^3)^2, \quad (3.31)$$

z. B. $x^\mu x_\mu = c^2 t^2 - \mathbf{r}^2$. Beachte, dass dieses (verallgemeinerte) Betragsquadrat negativ werden kann. Wir nennen einen Vierervektor (a^μ)

- *zeitartig*, wenn $a^\mu a_\mu > 0$ ist (die nullte, zeitartige Komponente dominiert),
- *lichtartig*, wenn $a^\mu a_\mu = 0$ ist,
- *raumartig*, wenn $a^\mu a_\mu < 0$ ist (die drei raumartigen Komponenten dominieren).

Für $s^2 := x^\mu x_\mu$ wird der Minkowski-Raum vom Lichtkegel in zeitartige und raumartige Bereiche geteilt:



- *Vierergradient*:

$$\left(\frac{\partial}{\partial a^\mu} \right), \quad (3.32)$$

transformiert sich gemäß

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \underline{a}^\mu} &= \frac{\partial a^\nu}{\partial \underline{a}^\mu} \frac{\partial}{\partial a^\nu} \quad \left| \text{Kettenregel} \right. \\ &= \frac{\partial x^\nu}{\partial \underline{x}^\mu} \frac{\partial}{\partial a^\nu} \equiv L_\mu{}^\nu \frac{\partial}{\partial a^\nu}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Vergleich mit Gl. (3.17) zeigt, dass sich die Ableitung nach einem *kontravarianten* Vektor wie ein *kovarianter* Vektor transformiert. Daher ist $(\partial/\partial a^\mu) a^\mu$ ein wohlgeformtes Skalarprodukt (kovarianter Vektor multipliziert mit kontravariantem Vektor) und sollte ein Lorentz-Skalar sein. Das ist tatsächlich der Fall:

$$\frac{\partial}{\partial a^\mu} a^\mu = \frac{\partial a^0}{\partial a^0} + \frac{\partial a^1}{\partial a^1} + \frac{\partial a^2}{\partial a^2} + \frac{\partial a^3}{\partial a^3} = 4. \quad (3.34)$$

Andererseits ist $\left(\frac{\partial}{\partial a_\mu}\right)$ ein kontravarianter Vektor. Speziell für raumzeitliche Gradienten schreiben wir

$$\partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (\text{kovariant}), \quad (3.35)$$

$$\partial^\mu := \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (\text{kontravariant}). \quad (3.36)$$

Es ist

$$(\partial_\mu) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right), \quad (3.37)$$

$$(\partial^\mu) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right). \quad (3.38)$$

Beachte die umgekehrten Vorzeichen im Vergleich zu $(x_\mu) = (ct, -\mathbf{r})$, $(x^\mu) = (ct, \mathbf{r})$.

- *D'Alembert-Operator*:

$$\square := \partial_\mu \partial^\mu = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2. \quad (3.39)$$

- Die *Eigenzeit* τ ist die von einer Uhr angezeigte Zeit, die von einem Massenpunkt mitgeführt wird. Diese Uhr befindet sich daher i. A. nicht in einem Inertialsystem. Für infinitesimale Bewegungen kann man diese jedoch als gleichförmig ansehen und daher die Lorentz-Transformationen verwenden. Für das Differential $d\tau$ ergibt sich

$$d\tau = \frac{dt}{\gamma} \quad (3.40)$$

mit $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$, wobei $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ hier die *momentane* Geschwindigkeit des Massenpunktes in einem gegebenen Inertialsystem (z. B. dem Laborsystem) mit den Koordinaten ct, \mathbf{r} ist.

- Die *Vierergeschwindigkeit* ist

$$(u^\mu) := \left(\frac{dx^\mu}{d\tau}\right) = \left(\gamma c, \gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt}\right) = (\gamma c, \gamma \mathbf{v}). \quad (3.41)$$

Sie ist die Ableitung des Vierervektors (x^μ) nach dem Lorentz-Skalar τ und damit selbst ein Vierervektor. Die Größe $(dx^\mu/dt) = (c \partial_0 x^\mu)$ wäre die Ableitung eines Vierervektors nach einer Komponente eines Vierervektors und damit selbst kein Vierervektor. Das ist der Grund für die Einführung der Eigenzeit τ .

- Der *Viererimpuls* ist

$$(p^\mu) := (m u^\mu). \quad (3.42)$$

Mit m bezeichnen wir immer die Ruhemasse – wir verwenden kein Konzept einer „geschwindigkeitsabhängigen Masse“. Man findet leicht

$$p^\mu p_\mu = m^2 u^\mu u_\mu = \gamma^2 m^2 (c^2 - \mathbf{v}^2) = \gamma^2 m^2 c^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m^2 c^2 = \text{const.} \quad (3.43)$$

Wir schreiben

$$(p^\mu) = (p^0, \mathbf{p}), \quad (3.44)$$

dann ist

$$p^\mu p_\mu = (p^0)^2 - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2 \quad (3.45)$$

$$\Rightarrow (p^0)^2 = m^2 c^2 + \mathbf{p}^2 \quad (3.46)$$

$$\Rightarrow p^0 c = \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2}. \quad (3.47)$$

Der Limes für $v \ll c$ ergibt

$$p^0 c = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\mathbf{p}^2}{m^2 c^2}} \cong mc^2 \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m^2 c^2}\right) = mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (3.48)$$

also die Ruheenergie mc^2 plus die nichtrelativistische kinetische Energie. Es liegt daher nahe, $p^0 c$ als relativistische Verallgemeinerung der Gesamtenergie des freien Teilchens zu betrachten (Einsteinsche Energie-Impuls-Beziehung):

$$E := \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2} \Rightarrow E^2 = m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2. \quad (3.49)$$

Beachte, dass E die 0-Komponente eines Vierervektors ist und kein Lorentz-Skalar. E hängt also vom Inertialsystem ab. Das war zu erwarten, da E die kinetische Energie enthält.

Allgemein sollten physikalische Gesetze „kovariant formuliert“ werden, d. h. sie sollten nur Lorentz-Skalare, Vierervektoren und entsprechende höhere Tensoren enthalten. Dann erfüllen sie automatisch die Einsteinschen Postulate. Beachte die doppelte Verwendung des Begriffs „kovariant“: Einerseits beschreibt er Gleichungen und Theorien, die mit der Speziellen Relativitätstheorie vereinbar sind, und zum anderen Vektoren und höhere Tensoren mit unteren Indizes. Es ist eine Schwäche der relativistischen Newton-Mechanik, dass sie mit nicht kovarianten Größen (in der ersten Bedeutung), wie der Energie E , operiert. Die relativistische Quantenmechanik erbt dieses Problem.

Eine kovariante Formulierung der klassischen Mechanik ist aber möglich, sie verwendet den Lagrange-Formalismus. Eine kovariante Formulierung der Quantentheorie im Lagrange-Formalismus ist ebenfalls möglich. Sie verwendet einen Lagrange-Operator, der, im Rahmen der Zweiten Quantisierung, durch die Quantenfeldoperatoren Ψ , Ψ^\dagger ausgedrückt wird. Es handelt sich somit um eine relativistische Quantenfeldtheorie. Wir werden hier aber einen anderen Weg zu einer relativistischen Quantentheorie gehen.

3.1.2 Elektrodynamik

Das elektrische und das magnetische Feld erfüllen in Gegenwart von Ladungen und Strömen die Maxwell-Gleichungen (in Gaußschen Einheiten)

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (3.50)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3.51)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (3.52)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (3.53)$$

Aus diesen folgt die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{c}{4\pi} \underbrace{\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B})}_{=0} - \nabla \cdot \mathbf{j} = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (3.54)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (3.55)$$

Die Maxwell-Gleichungen vereinfachen sich durch Einführung von *Eichfeldern* (Potentialen) ϕ , \mathbf{A} gemäß

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (3.56)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (3.57)$$

Dann sind die homogenen Maxwell-Gleichungen (3.51) und (3.52) automatisch erfüllt. Die Gleichungen und damit alle beobachtbaren Größen sind invariant unter den simultanen Eichtransformationen

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad (3.58)$$

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t}, \quad (3.59)$$

wobei $\chi(\mathbf{r}, t)$ ein beliebiges skalares Feld ist (Eichinvarianz).

Die Maxwell-Gleichungen sind außerdem bereits relativistisch kovariant, was man ihnen aber nicht gleich ansieht. Die Kovarianz wird erkennbar durch Einführung des *Viererpotentials*

$$(A^\mu) = (\phi, \mathbf{A}), \quad (A_\mu) = (\phi, -\mathbf{A}). \quad (3.60)$$

Die Felder \mathbf{E} , \mathbf{B} sind nicht die räumlichen Komponenten von Vierervektoren, sondern Komponenten des antisymmetrischen *Feldstärketensors*,

$$F^{\mu\nu} := \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (3.61)$$

Dieser ist invariant unter Eichtransformationen der Form

$$A^\mu \rightarrow A^\mu - \partial^\mu\chi, \quad (3.62)$$

denn unter dieser Transformation gilt

$$F^{\mu\nu} \rightarrow F^{\mu\nu} - \partial^\mu\partial^\nu\chi + \partial^\nu\partial^\mu\chi = F^{\mu\nu}. \quad (3.63)$$

Es ist oft praktisch, eine bestimmte Eichung zu wählen. Eine besondere Rolle spielt die *Lorenz-Eichung* (Ludvig Lorenz, ohne „t“)

$$\partial_\mu A^\mu = 0, \quad (3.64)$$

da sie offensichtlich Lorentz-invariant ist (Hendrik Anton Lorentz, mit „t“).

Die Komponenten des Feldstärketensors sind, für $m, n = 1, 2, 3$,

$$F^{0n} = \frac{1}{c} \frac{\partial A_n}{\partial t} + \frac{\partial\phi}{\partial r_n} = -E_n, \quad (3.65)$$

$$F^{m0} = -\frac{\partial\phi}{\partial r_m} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_m}{\partial t} = E_m, \quad (3.66)$$

$$F^{mn} = -\frac{\partial A_n}{\partial r_m} + \frac{\partial A_m}{\partial r_n} = -\sum_p \epsilon_{mnp} B_p, \quad (3.67)$$

also

$$(F^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Die homogenen Maxwell-Gleichungen lassen sich zu

$$\partial^\lambda F^{\mu\nu} + \partial^\mu F^{\nu\lambda} + \partial^\nu F^{\lambda\mu} = 0 \quad (3.69)$$

zusammenfassen. Z. B. ist für $(\lambda, \mu, \nu) = (0, 1, 2)$:

$$0 = -\frac{1}{c} \frac{\partial B_3}{\partial t} - \frac{\partial E_2}{\partial r_1} + \frac{\partial E_1}{\partial r_2} = -\frac{1}{c} \frac{\partial B_3}{\partial t} - (\nabla \times \mathbf{E})_3. \quad (3.70)$$

Die homogenen Gleichungen sind weiterhin automatisch erfüllt:

$$\partial^\lambda F^{\mu\nu} + \partial^\mu F^{\nu\lambda} + \partial^\nu F^{\lambda\mu}$$

$$= \partial^\lambda \partial^\mu A^\nu - \partial^\lambda \partial^\nu A^\mu + \partial^\mu \partial^\nu A^\lambda - \partial^\mu \partial^\lambda A^\nu + \partial^\nu \partial^\lambda A^\mu - \partial^\nu \partial^\mu A^\lambda = 0. \quad (3.71)$$

Die Dichten ρ , \mathbf{j} bilden den *Viererstromdichtektor*

$$(j^\mu) = (\rho c, \mathbf{j}). \quad (3.72)$$

Die inhomogenen Gleichungen lauten dann

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu, \quad (3.73)$$

denn die zeitliche Komponente und die räumlichen Komponenten lauten

$$\begin{aligned} 4\pi\rho &= \frac{4\pi}{c} j^0 = \partial_n F^{n0} = \nabla \cdot \mathbf{E}, \\ \frac{4\pi}{c} j^n &= \partial_\mu F^{\mu n} = -\frac{1}{c} \frac{\partial E_n}{\partial t} + \frac{F^{mn}}{\partial r_m} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{\partial E_n}{\partial t} - \sum_p \epsilon_{mnp} \frac{\partial B_p}{\partial r_m} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{\partial E_n}{\partial t} + (\nabla \times \mathbf{B})_n. \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$(3.75)$$

Die Kontinuitätsgleichung nimmt die einfache Form

$$\partial^\mu j_\mu = \partial_\mu j^\mu = 0 \quad (3.76)$$

an, denn es ist

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \rho c + \nabla \cdot \mathbf{j} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (3.77)$$

Beachte das positive Vorzeichen des räumlichen Anteils, es resultiert aus $(\partial_\mu) = (c^{-1} \partial/\partial t, +\nabla)$.

3.1.3 Minimale Kopplung

Die Wirkung des elektromagnetischen Feldes auf Teilchen der Ladung q beschreiben wir in der nichtrelativistischen klassischen Mechanik durch

- Addition von $q\phi(\mathbf{r})$ zur potentiellen Energie und
- Ersetzung des kanonischen Impulses in der kinetischen Energie durch den kinetischen Impuls,

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (3.78)$$

Man überzeugt sich, dass hieraus die bekannte Lorentz-Kraft folgt. Dies zeigt, dass die Bewegungsgleichungen nur von den Feldern \mathbf{E} , \mathbf{B} abhängen und damit eichinvariant sind. Die beiden Schritte lassen sich in Viererschreibweise elegant zusammenfassen:

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - \frac{q}{c} A^\mu. \quad (3.79)$$

Die Null-Komponente lautet offenbar

$$p^0 \rightarrow p^0 - \frac{q}{c} A^0 \quad (3.80)$$

$$\Leftrightarrow \frac{E}{c} \rightarrow \frac{E}{c} - \frac{q}{c} \phi \quad (3.81)$$

$$\Leftrightarrow E \rightarrow E - q\phi. \quad (3.82)$$

Also wird die Dispersionsrelation

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (3.83)$$

zu

$$E - q\phi = \sqrt{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right)^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (3.84)$$

$$\Rightarrow E = \sqrt{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right)^2 c^2 + m^2 c^4} + q\phi. \quad (3.85)$$

Diese Art der Ankopplung des Eichfeldes (A^μ) nennt man *minimale Kopplung*, da es die einfachste nichttriviale, aber mit der Kovarianz und der Eichinvarianz vereinbare, Möglichkeit darstellt. Es ist nach unserem Wissen auch die tatsächlich realisierte Kopplung, wobei für elektrisch geladene Teilchen mit Spin noch ein (Zeeman-) Term hinzukommt, wie wir noch sehen werden.

3.2 Die Klein-Gordon-Gleichung

In diesem Abschnitt konstruieren wir die erste relativistisch kovariante Einteilchen-Quantentheorie, nämlich die Klein-Gordon-Theorie. Wir ignorieren den Spin der Teilchen. Es überrascht nicht, dass wir eine Theorie finden, die spinlose Teilchen (z. B. π -Mesonen, Higgs-Bosonen oder ^4He -Atome) beschreibt. Dabei ergeben sich aber fundamentale Schwierigkeiten. So wird es sich als unmöglich erweisen, eine Teilchenzahldichte zu definieren, die zugleich positiv semidefinit und erhalten ist.

3.2.1 Freie Teilchen

Die Argumentation folgt der heuristischen Begründung der Schrödinger-Gleichung für den nichtrelativistischen Fall. Zentral ist das *Korrespondenzprinzip*: Die Quantenmechanik enthält die klassische Mechanik als Grenzfall für große Wirkungen $S \gg \hbar$. Also muss sich für freie Teilchen im klassischen Grenzfall die relativistische Dispersionsrelation

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (3.86)$$

ergeben. Wir erhalten den klassischen Grenzfall, indem wir das Teilchen durch ein sowohl im Ort als auch im Impuls möglichst schmales Wellenpaket darstellen, soweit dies mit der Heisenbergschen Unschärferelation vereinbar ist,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (3.87)$$

Der Schwerpunkt des Wellenpakets bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}. \quad (3.88)$$

Das Korrespondenzprinzip verlangt, dass diese Geschwindigkeit des Schwerpunktes im klassischen Grenzfall gleich der Geschwindigkeit des Teilchens ist,

$$\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \mathbf{v}_g \stackrel{!}{=} \mathbf{v} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}}, \quad (3.89)$$

wobei wir im letzten Schritt eine kanonische Gleichung der klassischen Hamilton-Mechanik verwendet haben. Um eine möglichst einfache Lösung zu finden, fordern wir, dass diese Identität ganz allgemein gilt, nicht nur im klassischen Grenzfall. Das ist eine sehr starke Forderung. Sollten wir keine Lösung finden, müssten wir sie abschwächen. Der Photoeffekt zeigt, dass für Photonen $E = \hbar\omega$ gilt. Mit

$$\frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} \quad (3.90)$$

folgt $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. De Broglie stellte die Vermutung auf, dass diese Beziehungen auch für Materiewellen gelten. Dann erhalten wir für Materiewellen ohne äußeres Potential die Dispersionsrelation

$$\omega = \sqrt{\mathbf{k}^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}}. \quad (3.91)$$

Ebene Wellen haben also die Form

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp\left(i\left[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \sqrt{\mathbf{k}^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}} t\right]\right) \quad (3.92)$$

(wir können jetzt schadlos ebene Wellen anstelle von Wellenpaketen betrachten, weil wir gefordert haben, dass Gl. (3.89) ganz allgemein gilt, nicht nur im klassischen Grenzfall). In Vierernotation ist

$$\psi((x^\mu)) \equiv \psi(x) = \psi_0 e^{-ik^\mu x_\mu} \quad (3.93)$$

mit

$$(k^\mu) = \left(\frac{\omega}{c}, \mathbf{k}\right) = \left(\frac{E}{\hbar c}, \frac{\mathbf{p}}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar} (p^\mu), \quad (3.94)$$

konsistent mit dem de Broglie-Ansatz.

Immer in Analogie zum Fall der Schrödinger-Gleichung suchen wir eine möglichst einfache Gleichung, die von $\psi(x)$ erfüllt wird. Die Gleichung soll natürlich Lorentz-invariant sein. Da

$$\partial^\mu \psi(x) = \psi_0 \frac{\partial}{\partial x_\mu} e^{-ik^\nu x_\nu} = -ik^\mu \psi(x) \quad (3.95)$$

$$\Rightarrow \partial^\mu \partial_\mu \psi(x) = -k^\mu k_\mu \psi(x) \quad (3.96)$$

und andererseits

$$k^\mu k_\mu = \frac{\omega^2}{c^2} - \mathbf{k}^2 = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}, \quad (3.97)$$

lautet eine solche Gleichung

$$\left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(x) = 0. \quad (3.98)$$

Dies ist die *Klein-Gordon-Gleichung* für ein freies Teilchen, die übrigens schon vor Klein und Gordon von Erwin Schrödinger gefunden aber wieder verworfen wurde. Eine äquivalente Schreibweise ist

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(x) = 0. \quad (3.99)$$

Expliziter lautet die Gleichung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.100)$$

Die Inhomogenität hat die Dimension $1/\text{Länge}^2$. Die hier auftretende Längenskala ist die Compton-Wellenlänge $\lambda_C := \hbar/mc$. Im Fall $m = 0$ erhalten wir die Wellengleichung, so dass wir die Klein-Gordon-Gleichung als Verallgemeinerung der Wellengleichung auf massive Teilchen verstehen können. Es ist zu beachten, dass die Klein-Gordon-Gleichung nicht die einzige Lorentz-invariante Gleichung ist, die die geforderte Dispersion liefert, sondern bestenfalls die einfachste. Insbesondere kann man sich fragen, warum wir nicht

$$\sqrt{\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}} \psi(x) \stackrel{?}{=} 0 \quad (3.101)$$

angesetzt haben, was homogen von erster Ordnung in der Energie ist, wie die Schrödinger-Gleichung. Diese alternative Gleichung ist aber nicht schön, weil die Wurzel eine Singularität (nämlich einen Verzweigungspunkt) hat, und zwar gerade für solche ψ , die die Gleichung erfüllen.

Man fasst die heuristische Begründung oft wie folgt zusammen: Die freie Schrödinger-Gleichung kann man erhalten, indem man in der nichtrelativistischen, klassischen Relation

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (3.102)$$

die Ersetzungen

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3.103)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (3.104)$$

vornimmt und die resultierenden Differentialoperatoren auf die Wellenfunktion anwendet:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi. \quad (3.105)$$

Analog machen wir dieselben Ersetzungen,

$$p^\mu \rightarrow i\hbar \partial^\mu, \quad (3.106)$$

für

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (3.107)$$

und erhalten

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi + m^2 c^4 \psi \quad (3.108)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0, \quad (3.109)$$

also die Klein-Gordon-Gleichung. Diese Argumentation ist zwar als Merkhilfe nützlich, sie ist aber nur als Karikatur der ausführlicheren zu betrachten.

3.2.2 Eigenschaften der Klein-Gordon-Gleichung

Wir untersuchen nun die Klein-Gordon-Gleichung genauer.

- Die Gleichung ist *linear*, daher gilt das Superpositionsprinzip: Sind ψ_1 und ψ_2 Lösungen, so auch $\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2$ für alle $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$.
- Die Gleichung ist von *zweiter Ordnung* in der Zeit. Daher brauchen wir *zwei* Anfangsbedingungen, um die Lösung eindeutig festzulegen. I. A. wählen wir

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right|_{t=t_0}. \quad (3.110)$$

Das ist anders als bei der Schrödinger-Gleichung. Diese Eigenschaft ist überraschend: Es ist schwierig zu interpretieren, dass man in der kovarianten Quantentheorie $\psi(t_0)$ und $(\partial\psi/\partial t)(t_0)$ kennen muss, um die zukünftige Zeitentwicklung vorherzusagen, während im nichtrelativistischen Grenzfall die Wellenfunktion $\psi(t)$ ausreicht.

- Spezielle Lösungen sind ebene Wellen

$$\psi = \psi_0 e^{-ik^\mu x_\mu} \quad \text{mit} \quad k^\mu k_\mu = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}, \quad (3.111)$$

denn dann ist, wie wir gesehen haben,

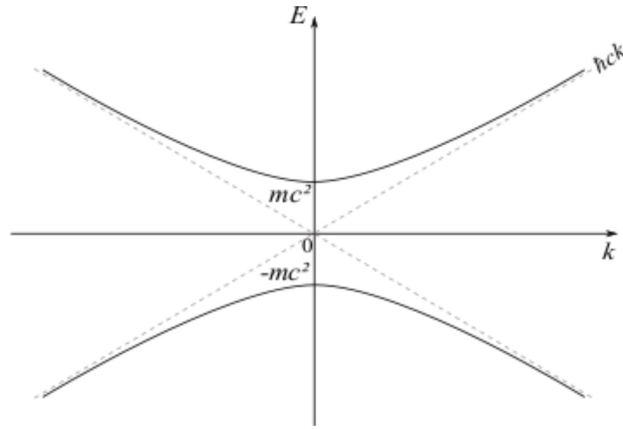
$$\left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = \left(-k^\mu k_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0. \quad (3.112)$$

Aber die Bedingung für (k^μ) impliziert nur

$$\omega^2 = \mathbf{k}^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \quad (3.113)$$

$$\Rightarrow \omega = \pm \sqrt{\mathbf{k}^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}} \quad (3.114)$$

$$\Rightarrow E = \hbar \omega = \pm \sqrt{\hbar^2 c^2 \mathbf{k}^2 + m^2 c^4}. \quad (3.115)$$



Die Dispersion besteht aus zwei Hyperbeln. Das Spektrum hat eine *Energielücke* von $-mc^2$ bis mc^2 , d. h. es treten keine Eigenzustände mit Energien in dieser Lücke auf. Außerdem ist das Spektrum nach *oben und unten unbeschränkt*. Die Unbeschränktheit nach unten ist problematisch, sobald wir das Teilchen an ein Wärmebad koppeln, so dass es Energie abgeben und aufnehmen kann. Es wird dann das Bestreben haben, seine Energie zu minimieren. Es kann aber beliebig viel Energie an das Bad abgeben und dabei in immer tiefer liegende Niveaus fallen. Dieses unphysikalische Verhalten nennt man *Zerstrahlungskatastrophe*.

Beachte, dass das Auftreten negativer Energien noch kein Problem darstellt – gebundene Zustände des Wasserstoffatoms haben negative Energien, abgesehen davon, dass wir ohnehin eine Konstante zur Energie addieren können – sondern nur die Unbeschränktheit nach unten. Auch diese führt nur dann zur Zerstrahlungskatastrophe, wenn das System tatsächlich Energie abgeben kann. Ein abgeschlossenes System beschrieben durch die freie Klein-Gordon-Gleichung kann das nicht, die Energie ist in diesem Fall eine Erhaltungsgröße. Wenn wir aber z. B. ein elektromagnetisches Feld ankoppeln, kann dieses als Wärmebad dienen und beliebig viel Energie aufnehmen.

- Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte (j^μ) sollte die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (3.116)$$

erfüllen. Tatsächlich benutzen wir die Kontinuitätsgleichung, um herauszufinden, wie (j^μ) aussieht. Es gibt keinen Grund anzunehmen, dass die Wahrscheinlichkeitsstromdichte dieselbe Form wie in der Schrödinger-Theorie hat. Aus der Klein-Gordon-Gleichung erhalten wir

$$\psi^* \left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0 \quad (3.117)$$

und durch Komplexkonjugation

$$\psi \left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi^* = 0. \quad (3.118)$$

Daraus folgt für die Differenz

$$\psi^* \partial^\mu \partial_\mu \psi - \psi \partial^\mu \partial_\mu \psi^* = 0 \quad (3.119)$$

$$\Rightarrow \partial^\mu (\psi^* \partial_\mu \psi - \psi \partial_\mu \psi^*) = 0, \quad (3.120)$$

wobei wir die Produktregel verwendet und Terme weggehoben haben. Damit haben wir eine (vierer-) divergenzfreie Größe gefunden. Daher *definieren* wir

$$j^\mu := \underbrace{\frac{i\hbar}{2m}}_{\text{konyventioneller Vorfaktor}} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*), \quad (3.121)$$

so dass $\partial_\mu j^\mu = 0$ gilt. Die Komponenten von $(j^\mu) =: (\rho c, \mathbf{j})$ lauten [beachte $(\partial^\mu) = (c^{-1} \partial/\partial t, -\nabla)$]

$$j^0 = \rho c \quad (3.122)$$

$$\Rightarrow \rho = \frac{i\hbar}{2mc} \left(\psi^* \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{1}{c} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad (3.123)$$

und

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (3.124)$$

Die Dichte ρ hat also tatsächlich nicht die Form $\psi^* \psi$ aus der Schrödinger-Theorie, die Stromdichte \mathbf{j} stimmt dagegen mit der Schrödinger-Form überein. Hier tritt ein Problem auf: Da die Klein-Gordon-Gleichung von zweiter Ordnung ist, können wir $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ und $\frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{r}, t_0)$ beliebig vorgeben. Damit können wir aber auch $\rho(\mathbf{r}, t_0)$ beliebig vorgeben; Gl. (3.123) garantiert nur, dass ρ reell ist. Wir können insbesondere $\rho(\mathbf{r}, t) < 0$ für gewisse \mathbf{r} wählen. Dann können wir ρ aber nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren!

Betrachten wir ebene Wellen $\psi = \psi_0 e^{-ik^\mu x_\mu}$, die ja spezielle Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung sind, so erhalten wir

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} |\psi_0|^2 (-i\omega - i\omega) = \frac{\hbar\omega}{mc^2} |\psi_0|^2. \quad (3.125)$$

Wir sehen:

- $\omega > 0$ ($E > 0$) führt auf eine konstante positive Dichte,
- $\omega < 0$ ($E < 0$) führt auf eine konstante negative Dichte.

Man kann im Rahmen der Klein-Gordon-Theorie keine *erhaltene* Viererstromdichte konstruieren, die $\rho \geq 0$ garantiert. Die Größe $\psi^* \psi$ ist z. B. zwar positiv semidefinit, und damit im Prinzip als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretierbar, aber nicht erhalten:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.126)$$

und die Klein-Gordon-Gleichung determiniert $\partial \psi / \partial t$ nicht, also können wir insbesondere nicht $\partial \psi / \partial t$ durch räumliche Ableitungen ausdrücken. Daher können wir die rechte Seite von Gl. (3.126) auch nicht allgemein als räumliche Divergenz einer Stromdichte schreiben. $\psi^* \psi$ ist also nicht die zeitliche Komponente einer erhaltenen Viererstromdichte.

Dieses Problem führt zu einer möglichen Uminterpretation der Theorie nach Pauli und Weißkopf: 1. Da sich keine erhaltene Wahrscheinlichkeitsstromdichte konstruieren lässt, ist die *Wahrscheinlichkeit* offenbar nicht erhalten. Das heißt, dass Teilchen erzeugt und vernichtet werden können. 2. Die Viererstromdichte

$$j^\mu = \frac{i\hbar q}{2m} (\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*) \quad (3.127)$$

(der neue Faktor q ist eine – nicht unbedingt elektrische – Ladung) ist aber erhalten. Wir interpretieren $\rho = j^0/c$ als *Ladungsdichte* und \mathbf{j} als *Ladungsstromdichte*. 3. Die Theorie beschreibt also die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen in Paaren der Gesamtladung Null („Teilchen-Antiteilchen-Paare“).

Da wir aber vom Einteilchenbild ausgegangen waren, ist diese Interpretation mit der Klein-Gordon-Quantenmechanik unverträglich. Sie weist über deren Rahmen hinaus. Erst in der Mehr-Teilchen-Theorie mit zweiter Quantisierung, d. h. in der *Quantenfeldtheorie*, kann die Paarerzeugung und -vernichtung sauber beschrieben werden. Sie löst auch die Probleme der Wahrscheinlichkeitserhaltung und des nach unten unbeschränkten Spektrums.

3.2.3 Teilchen im elektromagnetischen Feld

Mit dem Viererimpulsoperator in Ortsdarstellung

$$p^\mu := i\hbar \partial^\mu, \quad \text{also} \quad (3.128)$$

$$p^0 = \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3.129)$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla, \quad (3.130)$$

können wir die freie Klein-Gordon-Gleichung schreiben als

$$\left(-\frac{1}{\hbar^2} p^\mu p_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0 \quad (3.131)$$

$$\Leftrightarrow (p^\mu p_\mu - m^2 c^2) \psi = 0 \quad (3.132)$$

(beachte das Vorzeichen des Masseterms). Die minimale Kopplung an das elektromagnetische Feld besteht nun in der Ersetzung

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - \frac{q}{c} A^\mu. \quad (3.133)$$

Wir erhalten die Klein-Gordon-Gleichung für ein Teilchen der Ladung q im elektromagnetischen Feld,

$$\left[\left(p^\mu - \frac{q}{c} A^\mu \right) \left(p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu \right) - m^2 c^2 \right] \psi = 0. \quad (3.134)$$

Äquivalent können wir ersetzen

$$\partial^\mu \rightarrow D^\mu := \partial^\mu - \frac{q}{i\hbar c} A^\mu = \partial^\mu + i \frac{q}{\hbar c} A^\mu. \quad (3.135)$$

(D^μ) nennt man *eichkovariante Ableitung*, da die damit formulierte Theorie für ein Teilchen im Feld sowohl eichinvariant als auch relativistisch kovariant ist. Die Bezeichnung hat nichts damit zu tun, dass (D^μ) ein kontravarianter (sic!) Vektor ist. Damit wird die Klein-Gordon-Gleichung

$$\left(D^\mu D_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0 \quad (3.136)$$

$$\Leftrightarrow \left[\left(\partial^\mu + i \frac{q}{\hbar c} A^\mu \right) \left(\partial_\mu + i \frac{q}{\hbar c} A_\mu \right) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi = 0 \quad (3.137)$$

$$\Leftrightarrow \left[\partial^\mu \partial_\mu + i \frac{q}{\hbar c} (\partial^\mu A_\mu + A^\mu \partial_\mu) - \frac{q^2}{\hbar^2 c^2} A^\mu A_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi = 0. \quad (3.138)$$

Für ein zeitunabhängiges Feld (A^μ) können wir *stationäre* Lösungen suchen. Es ist zunächst nicht klar, ob „stationär“ bedeuten soll, dass $|\psi|^2$ zeitunabhängig ist (wie in der Schrödinger-Theorie), oder dass $\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$ zeitunabhängig ist. Das macht hier aber keinen Unterschied, da unser Ansatz beides erfüllt. Wir machen den Ansatz, analog zum Schrödinger-Fall,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{r}). \quad (3.139)$$

(Dann ist $\rho = (E/mc^2) |\psi(\mathbf{r})|^2$, die Zeitunabhängigkeit von ρ ist also äquivalent zu der von $|\psi|^2$.) Einsetzen ergibt

$$\left[\left(-i \frac{E}{\hbar c} + i \frac{q}{\hbar c} \phi(\mathbf{r}) \right)^2 - \left(\nabla + i \frac{q}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.140)$$

$$\Rightarrow (E - q\phi(\mathbf{r}))^2 \psi(\mathbf{r}) = c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \psi(\mathbf{r}) + m^2 c^4 \psi(\mathbf{r}). \quad (3.141)$$

Das ist die *zeitunabhängige Klein-Gordon-Gleichung* für ein Teilchen im statischen elektromagnetischen Feld. Man kann jetzt z. B. ein π^- -Meson im Coulomb-Potential eines Kerns betrachten, d. h. setzen

$$q = -e, \quad \phi(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{r}, \quad \mathbf{A} \equiv 0. \quad (3.142)$$

Wir haben hier eine Lorenz-Eichung gewählt, denn es gilt

$$\partial^\mu A_\mu = \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{Ze}{c} \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{r} = 0. \quad (3.143)$$

Die resultierende Gleichung kann man weitgehend analog zum nichtrelativistischen Fall durch den Separationsansatz in Kugelkoordinaten

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) Y(\vartheta, \varphi) \quad (3.144)$$

lösen, vgl. z. B. F. Schwabl, „Quantenmechanik für Fortgeschrittene“. Der Winkelanteil ist wieder durch Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ gegeben; dies folgt allein aus der Rotationssymmetrie.

3.3 Die Dirac-Gleichung

In diesem Abschnitt konstruieren wir eine zweite relativistische Quantentheorie, die Dirac-Theorie. Sie vermeidet einen Teil der Probleme der Klein-Gordon-Theorie, aber nicht alle. Auch hier erfordert eine konsistente Beschreibung letztlich eine Mehrteilchentheorie. Es stellt sich heraus, dass die Dirac-Theorie Spin-1/2-Fermionen beschreibt.

Wie wir gesehen haben, lässt sich im Rahmen der Klein-Gordon-Theorie keine erhaltene, positiv semidefinite Wahrscheinlichkeitsdichte konstruieren. Die erhaltene Dichte $\rho = j^0/c$ kann negativ gewählt werden, da die Klein-Gordon-Gleichung von zweiter Ordnung in der Zeit ist. Das ist ohnehin merkwürdig – warum sollte man in der kovarianten Theorie ψ und $\partial\psi/\partial t$ zu einer bestimmten Zeit kennen müssen, um die Zeitentwicklung vorherzusagen, im nichtrelativistischen Grenzfall aber nur ψ ? Diracs Ziel war daher, eine relativistische Bewegungsgleichung für ψ zu konstruieren, die von *erster* Ordnung in t ist. Aufgrund der Kovarianz muss sie dann auch von erster Ordnung in \mathbf{r} sein. Diese Idee erscheint zunächst nicht aussichtsreich; es ist nicht klar, wie im nichtrelativistischen Grenzfall die korrekte quadratische Dispersionsrelation herauskommen soll. Wir betrachten wieder zunächst ein freies Teilchen und kommen später zum Teilchen im elektromagnetischen Feld.

3.3.1 Freies Teilchen

Da eine Gleichung von erster Ordnung in (x^μ) gesucht war, machte Dirac für ein freies Teilchen den Ansatz

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.145)$$

wobei $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ und β noch unbestimmte Koeffizienten sind. Dies ist die *Dirac-Gleichung* für ein freies Teilchen. Sie lässt sich auch in einer zur Schrödinger-Gleichung ähnlichen Form schreiben:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (3.146)$$

mit der Definition

$$H := -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 \equiv c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2. \quad (3.147)$$

Wegen der zur nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung identischen Form können wir die dafür entwickelten Methoden direkt übertragen. Z. B. lautet der Zeitentwicklungsoperator $U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$. Damit können wir Operatoren ins Heisenberg-Bild transformieren usw.

Wir müssen noch die Koeffizienten bestimmen. Dazu gehen wir von der Dirac-Gleichung in der ersten Form aus Gl. (3.146) aus und wenden auf beide Seiten den Operator $i\hbar \partial/\partial t + H$ an. Dies ergibt (beachte die Vorzeichen)

$$\begin{aligned} & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + H \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 \right) \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2 \right)}_{=0} \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \end{aligned} \quad (3.148)$$

Also ist

$$\begin{aligned}
\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - H^2\right) \psi(\mathbf{r}, t) &= \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - (i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2)^2\right] \psi(\mathbf{r}, t) \\
&= \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 c^2 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla)^2 + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \beta mc^2 + i\beta mc^2 \hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta^2 m^2 c^4\right] \psi(\mathbf{r}, t) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{3.149}$$

Daraus folgt (unter der Annahme, dass β nicht vom Ort abhängt und daher an ∇ vorbei gezogen werden darf)

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - (\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla)^2 - \frac{imc}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \beta \cdot \nabla - \frac{imc}{\hbar} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \beta^2\right] \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \tag{3.150}$$

Im klassischen Grenzfall soll sich weiterhin die Einstein-Relation $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ ergeben. Wie im vorigen Abschnitt fordern wir sogar, dass diese immer gilt. Daher liegt es nahe, die Koeffizienten $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ so zu wählen, dass Gl. (3.150) wieder die Klein-Gordon-Gleichung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \tag{3.151}$$

ergibt, die diese Forderungen ja erfüllt. Dafür muss gelten

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 0 \quad \text{für } i \neq j, \tag{3.152}$$

$$\alpha_i^2 = \mathbb{1}, \tag{3.153}$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0, \tag{3.154}$$

$$\beta^2 = \mathbb{1}. \tag{3.155}$$

Etwas kompakter lauten diese Bedingungen unter Verwendung des Antikommutators

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{1}, \tag{3.156}$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0, \tag{3.157}$$

$$\beta^2 = \mathbb{1} \tag{3.158}$$

Diese Bedingungen lassen sich nicht durch Zahlen erfüllen, denn dann würde z. B. gelten

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 2\alpha_i \beta = 0 \Rightarrow \alpha_i^2 \beta^2 = 0 \Rightarrow \mathbb{1} = 0. \tag{3.159}$$

Eine Darstellung mit Zahlen widerspräche auch der Isotropie des Raumes, da $\boldsymbol{\alpha}$ eine bestimmte Raumrichtung beschreiben würde. Das würde auch Einsteins erstes Postulat verletzen. Man kann die Bedingungen jedoch mit *Matrizen* erfüllen. Sind α_i und β Matrizen der Dimension $n \times n$, so muss die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ offensichtlich n Komponenten haben.

Die einfachste Wahl wäre $n = 2$. Die Bedingung $\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{1}$ wird gerade von den Pauli-Matrizen erfüllt, da gilt

$$\sigma_i \sigma_i = \mathbb{1}, \tag{3.160}$$

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i \stackrel{i \neq j}{=} i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k + i \sum_k \epsilon_{jik} \sigma_k = i \sum_k \epsilon_{ijk} (\sigma_k - \sigma_k) = 0. \tag{3.161}$$

Jedoch existiert keine vierte 2×2 -Matrix β , die zu $\mathbb{1}$ quadriert und mit den Pauli-Matrizen antivertauscht. Das sieht man wie folgt: Die komplexen 2×2 -Matrizen bilden offenbar einen vierdimensionalen Vektorraum über \mathbb{C} . Eine Basis dieses Vektorraums ist

$$\{\mathbb{1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}. \tag{3.162}$$

Daher müsste sich β schreiben lassen als

$$\beta = b_0 \mathbb{1} + b_1 \sigma_1 + b_2 \sigma_2 + b_3 \sigma_3 \quad \text{mit } b_0, b_1, b_2, b_3 \in \mathbb{C}. \tag{3.163}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \{\sigma_i, \beta\} &= b_0(\sigma_i \mathbb{1} + \mathbb{1} \sigma_i) + b_1(\sigma_i \sigma_1 + \sigma_1 \sigma_i) + b_2(\sigma_i \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_i) + b_3(\sigma_i \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_i) \\ &= 2b_0 \sigma_i + 2b_i \mathbb{1} \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (3.164)$$

$$\Rightarrow b_0 = b_1 = b_2 = b_3 = 0 \quad (3.165)$$

$$\Rightarrow \beta^2 = 0, \quad (3.166)$$

im Widerspruch zur Bedingung $\beta^2 = \mathbb{1}$. Daher ist eine Darstellung durch 2×2 -Matrizen nicht möglich.

Für beliebiges *ungerades* n ist ebenfalls keine Darstellung möglich. Beweis:

$$\alpha_1 \alpha_2 = -\alpha_2 \alpha_1 \quad (3.167)$$

$$\Rightarrow \det(\alpha_1 \alpha_2) = \det(-\alpha_2 \alpha_1), \quad (3.168)$$

daraus folgt für n ungerade

$$\det(\alpha_1 \alpha_2) = -\det(\alpha_2 \alpha_1) \quad (3.169)$$

$$\Rightarrow \det \alpha_1 \det \alpha_2 = -\det \alpha_2 \det \alpha_1 \quad (3.170)$$

$$\Rightarrow \det \alpha_1 = 0 \quad \vee \quad \det \alpha_2 = 0. \quad (3.171)$$

Nun ist aber

$$\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \mathbb{1} \quad (3.172)$$

$$\Rightarrow \det \alpha_1^2 = \det \alpha_2^2 = 1 \quad (3.173)$$

$$\Rightarrow (\det \alpha_1)^2 = (\det \alpha_2)^2 = 1, \quad (3.174)$$

es ergibt sich ein Widerspruch. Also lässt sich insbesondere keine Darstellung durch 3×3 -Matrizen finden.

Eine Darstellung durch 4×4 -Matrizen existiert. Man überzeugt sich leicht, dass folgende Matrizen alle Bedingungen erfüllen:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.175)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad (3.176)$$

wobei $\mathbb{1}_2$ die 2×2 -Einheitsmatrix ist. Damit erfordert die einfachste Lösung $n = 4$. Es gibt unendlich viele mögliche Darstellungen. Die Gleichungen (3.175) und (3.176) geben die am häufigsten verwendete sogenannte Standarddarstellung wieder. Man kann außerdem zeigen: Darstellungen existieren nur für $n = 4k$, $k \in \mathbb{N}$ und jede Darstellung ist *ähnlich* (im Sinne von ähnlichen Matrizen) zu blockdiagonalen Matrizen mit $n/4 = k$ identischen Blöcken mit der angegebenen expliziten Darstellung von α_i und β .

Die Form (3.145) der Dirac-Gleichung bringt deren Kovarianz nicht klar zum Ausdruck – der Koeffizient der Zeitableitung ist eine Zahl, während der räumliche Gradient mit den α -Matrizen multipliziert wird. Das hängt damit zusammen, dass der Hamiltonian, wie schon erwähnt, kein Lorentz-Skalar ist. Um die Kovarianz explizit zu machen, ist es nützlich zu definieren

$$\gamma^0 = \beta, \quad (3.177)$$

$$\gamma^i = \beta \alpha_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.178)$$

Damit lautet die Dirac-Gleichung, multipliziert mit β/c ,

$$\left(i\hbar \beta \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta^2 mc \right) \psi(x) = \left(i\hbar \gamma^0 \partial_0 + i\hbar \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - mc \right) \psi(x) = 0 \quad (3.179)$$

$$\Rightarrow \left(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc \right) \psi(x) = 0, \quad (3.180)$$

wobei im Massenterm eine Einheitsmatrix $\mathbb{1}$ impliziert ist. Dies ist die Dirac-Gleichung in explizit kovarianter Form.

Man verwendet zur Abkürzung den „*Feynman dagger*“ (dagger = Dolch): Für einen Vierervektor (B^μ) ist

$$\not{B} := \gamma^\mu B_\mu \equiv \gamma_\mu B^\mu, \quad (3.181)$$

also z. B.

$$\not{\partial} := \gamma^\mu \partial_\mu \equiv \gamma_\mu \partial^\mu. \quad (3.182)$$

Damit lautet die freie Dirac-Gleichung

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\psi(x) = 0. \quad (3.183)$$

Die γ -Matrizen erfüllen

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1} \quad (3.184)$$

mit dem metrischen Tensor ($g^{\mu\nu}$). Die Standarddarstellung lautet

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad (3.185)$$

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.186)$$

Wie üblich ist $\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu$. Es folgt

$$\gamma^\mu \gamma_\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\mu \gamma^\nu = (\gamma^0)^2 - (\gamma^1)^2 - (\gamma^2)^2 - (\gamma^3)^2 = \mathbb{1} + \mathbb{1} + \mathbb{1} + \mathbb{1} = 4\mathbb{1}, \quad (3.187)$$

was offensichtlich ein Lorentz-Skalar ist (aber eine Matrix auf dem vierdimensionalen Raum der ψ).

Die Dirac-Gleichung (3.180) soll ihre Form unter Lorentz-Transformationen nicht ändern. Da sich (∂_μ) wie ein kovarianter Vektor transformiert, könnte man erwarten, dass sich (γ^μ) wie ein kontravarianter Vektor transformieren muss und der Dirac-Spinor ψ wie ein Lorentz-Skalar. Das ist aber nicht der Fall. ψ kann nicht als Lorentz-Skalar angesehen werden, weil sich die vier Spinor-Komponenten nichttrivial transformieren. Wir werden gleich sehen, dass zum einen die Komponenten von der Geschwindigkeit des Teilchens relativ zum Bezugssystem abhängen, und dass sie zum anderen etwas mit dem Drehimpuls des Teilchens zu tun haben. Wir erinnern uns, dass die Lorentz-Gruppe Drehungen enthält und dass sich Drehimpulse in bestimmter Weise unter Drehungen transformieren.

In der üblichen und sinnvollen Konvention transformieren sich die γ^μ überhaupt nicht unter Lorentz-Transformationen, sie sind also matrixwertige Konstanten. Sie bilden also keinen Lorentz-Vektor—die Notation ist irreführend. Die Forderung der Invarianz der γ^μ legt praktisch fest, wie sich Dirac-Spinoren ψ transformieren, das Stichwort ist „Spinor-Darstellung der Lorentz-Gruppe“. Wir verfolgen dies hier nicht weiter.

Beachte außerdem, dass die γ^μ nicht alle hermitesch sind. Es gilt nämlich

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \quad (3.188)$$

$$(\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i \quad \text{für } i = 1, 2, 3 \quad (3.189)$$

(das ist offensichtlich für die Standarddarstellung und man kann leicht zeigen, dass diese Beziehungen Lorentz-invariant sind). Wegen $\gamma^\mu = g^{\mu\nu}\gamma_\nu$ lässt sich dies schreiben als

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma_\mu. \quad (3.190)$$

Die γ^μ sind jedoch unitär, denn

$$\gamma^0(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0\gamma^0 = \beta^2 = \mathbb{1}, \quad (3.191)$$

$$\gamma^i(\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i\gamma^i = -\beta\alpha_i\beta\alpha_i = +\beta^2\alpha_i^2 = \mathbb{1}. \quad (3.192)$$

Das Fehlen von Hermitizität stellt kein Problem dar; die äquivalente Form

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)\psi \equiv H\psi \quad (3.193)$$

mit $(\alpha^i)^\dagger = \alpha^i$, $\beta^\dagger = \beta$ zeigt, dass der Hamiltonian hermitesch ist. Diese Form verschleiert aber wie erwähnt die Lorentz-Invarianz.

3.3.2 Eigenschaften der Dirac-Gleichung

Da der Hamilton-Operator

$$H = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 \quad (3.194)$$

eine 4×4 -Matrix ist, muss die Wellenfunktion $\psi(x)$ ein vierkomponentiger Vektor („*Dirac-Spinor*“) sein. Hier und im Folgenden bezeichnen wir als Vektor allgemein ein Element eines Vektorraums; wir verwenden den Begriff „Vektor“ nicht in Abgrenzung zu „Spinor“. Wir untersuchen jetzt die Bedeutung der vier Komponenten. Dazu betrachten wir zunächst ein ruhendes Teilchen:

$$\mathbf{p} \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = \beta mc^2 \psi. \quad (3.195)$$

Wir schreiben ψ als Vektor aus zwei Zweivektoren (*Spinoren*),

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3.196)$$

Dann ist

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix}. \quad (3.197)$$

Wir suchen stationäre Lösungen

$$\psi = \psi_0 e^{-iEt/\hbar} \equiv \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}. \quad (3.198)$$

Mit diesem Ansatz folgt

$$E \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = mc^2 \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ -\chi_0 \end{pmatrix}. \quad (3.199)$$

Die beiden Lösungen sind

$$\begin{pmatrix} \varphi_0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{zur Eigenenergie } E = mc^2, \quad (3.200)$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \quad \text{zur Eigenenergie } E = -mc^2. \quad (3.201)$$

βmc^2 ist der Operator der Ruheenergie, man nennt β auch Ruheenergiematrix. Für ruhende Teilchen beschreiben die ersten beiden Komponenten von ψ offenbar Zustände positiver Energie und die anderen beiden Komponenten Zustände negativer Energie.

Für nicht ruhende Teilchen gilt das nicht mehr: Die stationären Lösungen der freien Dirac-Gleichung sind

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - iEt/\hbar} \equiv \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - iEt/\hbar} \quad (3.202)$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi \stackrel{!}{=} H\psi = (\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{k} + \beta mc^2) \psi \quad (3.203)$$

$$\Rightarrow \quad (\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{k} + \beta mc^2) \psi_0 = E\psi_0. \quad (3.204)$$

Die Eigenenergien sind also die Eigenwerte der 4×4 -Matrix

$$\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{k} + \beta mc^2 = \begin{pmatrix} mc^2 \mathbb{1}_2 & \hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \\ \hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} & -mc^2 \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \quad (3.205)$$

in der Standarddarstellung [$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ ist der Vektor der Pauli-Matrizen] und für jeden Eigenwert ist ψ_0 der zugehörige Eigenvektor. Die Eigenwerte sind

$$E = \pm \sqrt{\hbar^2 c^2 \mathbf{k}^2 + m^2 c^4}, \quad (3.206)$$

wie erwartet. Die beiden Eigenwerte sind jeweils zweifach entartet. Die Dispersion ist identisch mit der aus der Klein-Gordon-Gleichung folgenden, abgesehen von der zusätzlichen Entartung. Die Eigenvektoren ψ_0 enthalten für $\mathbf{k} \neq 0$ sowohl $\varphi_0 \neq 0$ als auch $\chi_0 \neq 0$. (Wir können natürlich immer in das momentan mitbewegte Inertialsystem transformieren, in dem $\mathbf{k} = 0$ gilt.) Wir diskutieren die Eigenvektoren später genauer. Hinsichtlich der ursprünglichen Frage nach der Bedeutung der vier Komponenten der Dirac-Spinoren habe wir eine teilweise Antwort gefunden: Ein Faktor zwei von vier korrespondiert zu den beiden Vorzeichen der Energie.

Als nächstes betrachten wir zwei weitere wichtige Observable: die Geschwindigkeit und den Drehimpuls. Die Größe $c\boldsymbol{\alpha}$ lässt sich als *Geschwindigkeitsoperator* deuten: Im Heisenberg-Bild ist, für $j = 1, 2, 3$,

$$v_j := \dot{x}_j = \frac{i}{\hbar} [H, x_j] = \frac{ic}{\hbar} [\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, x_j] = \frac{ic}{\hbar} \sum_{l=1}^3 \alpha_l \underbrace{[p_l, x_j]}_{=-i\hbar \delta_{lj}} = c\alpha_j, \quad (3.207)$$

also $\mathbf{v} = c\boldsymbol{\alpha}$. Beachte, dass \mathbf{v} die Ableitung nach der Zeit t in einem Inertialsystem enthält, wie die Dirac-Gleichung selbst auch. \mathbf{v} korrespondiert also nicht direkt zur klassischen relativistischen Geschwindigkeit $(u^\mu) = (u^0, \mathbf{u})$, die die Ableitung nach der Eigenzeit τ enthält. Es ist nicht klar, wie man einen Operator der relativistischen Geschwindigkeit konstruieren soll.

Die α_i nennt man manchmal Geschwindigkeitsmatrizen. Wegen $\alpha_j^2 = 1$ sind die Eigenwerte von α_j gleich ± 1 und die von v_j somit gleich $\pm c$. Die Geschwindigkeitskomponenten kommutieren in der Dirac-Theorie, anders als in der nichtrelativistischen Quantenmechanik, nicht miteinander:

$$\begin{aligned} [v_i, v_j] &= c^2 [\alpha_i, \alpha_j] = c^2 (\alpha_i \alpha_j - \alpha_j \alpha_i) = c^2 \begin{pmatrix} \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i \end{pmatrix} \\ &= 2ic^2 \sum_k \epsilon_{ijk} \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \neq 0 \quad \text{für } i \neq j. \end{aligned} \quad (3.208)$$

Daher sind die Geschwindigkeitskomponenten nicht gleichzeitig scharf messbar. Die Geschwindigkeitskomponenten kommutieren auch nicht mit dem Hamiltonian. Die oben betrachteten ebenen Wellen haben also keine scharfe Geschwindigkeit, wohl aber einen scharfen Impuls $\hbar\mathbf{k}$.

Dass die Geschwindigkeitskomponenten in der Dirac-Quantenmechanik nicht miteinander kommutieren, hängt damit zusammen, dass schon in der klassischen Speziellen Relativitätstheorie Lorentz-Boosts in unterschiedliche Richtungen nicht kommutieren. Dies ist analog zu der Feststellung, dass quantenmechanisch Drehimpulskomponenten nicht miteinander kommutieren, weil schon klassisch Drehungen in verschiedenen Ebenen es nicht tun. Wir erinnern uns, dass Lorentz-Boosts verallgemeinerte Drehungen im Minkowski-Raum sind. Die Geschwindigkeitskomponenten sind die Generatoren von speziellen Lorentz-Transformationen, so wie die Drehimpulskomponenten Generatoren von räumlichen Drehungen sind.

3.3.3 Drehimpuls und Spin

Die stationären Lösungen der freien Dirac-Gleichung sind zweifach entartet. Das bedeutet, dass durch die Dirac-Gleichung beschriebene Teilchen einen *zweiwertigen inneren Freiheitsgrad* haben. Um dessen physikalische Bedeutung zu verstehen, betrachten wir zunächst den (Bahn-) Drehimpuls

$$\mathbf{L} := \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (3.209)$$

Da das System rotationsinvariant ist, sollte der Drehimpuls gemäß des Noether-Theorems erhalten sein. Wir überprüfen dies o. B. d. A. für L_3 :

$$\begin{aligned} [H, L_3] &= [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, x_1 p_2 - x_2 p_1] = c[\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2, x_1 p_2 - x_2 p_1] = c[\alpha_1 p_1, x_1 p_2] - c[\alpha_2 p_2 + x_2 p_1] \\ &= c\alpha_1 \underbrace{[p_1, x_1]}_{=-i\hbar} p_2 - c\alpha_2 \underbrace{[p_2, x_2]}_{=-i\hbar} p_1 = -i\hbar c (\alpha_1 p_2 - \alpha_2 p_1) \\ &= -i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p})_3 \neq 0. \end{aligned} \quad (3.210)$$

Überraschenderweise ist der Bahndrehimpuls nicht erhalten. Haben wir vielleicht Beiträge zum Drehimpuls übersehen? Können wir \mathbf{L} zu einer Erhaltungsgröße vervollständigen? Dazu betrachten wir den „Defekt“ $-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}$ weiter: Es gilt

$$\begin{aligned}
\alpha_1 p_2 - \alpha_2 p_1 &= \sum_{j=1}^3 (\alpha_1 \delta_{j2} - \delta_{j1} \alpha_2) p_j = \sum_j \left(\alpha_1 \frac{\{\alpha_2, \alpha_j\}}{2} - \frac{\{\alpha_1, \alpha_j\}}{2} \alpha_2 \right) p_j \\
&= \frac{1}{2} \sum_j (\alpha_1 \alpha_2 \alpha_j + \alpha_1 \alpha_j \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_j \alpha_2 - \alpha_j \alpha_1 \alpha_2) p_j \\
&= \frac{1}{2} \sum_j [\alpha_1 \alpha_2, \alpha_j] p_j \\
&= \frac{1}{2} [\alpha_1 \alpha_2, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = -\frac{1}{2} [\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \alpha_1 \alpha_2] \\
&= -\frac{1}{2c} [H - \beta m c^2, \alpha_1 \alpha_2].
\end{aligned} \tag{3.211}$$

Hierin ist

$$[\beta, \alpha_1 \alpha_2] = \beta \alpha_1 \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2 \beta = -\alpha_1 \beta \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2 \beta = +\alpha_1 \alpha_2 \beta - \alpha_1 \alpha_2 \beta = 0, \tag{3.212}$$

also

$$\alpha_1 p_2 - \alpha_2 p_1 = -\frac{1}{2c} [H, \alpha_1 \alpha_2] \tag{3.213}$$

und damit

$$[H, L_3] = \frac{i\hbar}{2} [H, \alpha_1 \alpha_2] \tag{3.214}$$

$$\Rightarrow \left[H, L_3 - \frac{i\hbar}{2} \alpha_1 \alpha_2 \right] = 0 \tag{3.215}$$

$$\Rightarrow \left[H, L_3 + \frac{\hbar}{4i} (\alpha_1 \alpha_2 - \alpha_2 \alpha_1) \right] = 0. \tag{3.216}$$

Verallgemeinert auf alle Komponenten gilt

$$\left[H, \mathbf{L} + \frac{\hbar}{4i} \boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha} \right] = 0. \tag{3.217}$$

Beachte, dass das Kreuzprodukt $\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}$ nicht verschwindet, da die α -Matrizen nicht miteinander kommutieren. Damit ist

$$\mathbf{J} := \mathbf{L} + \frac{\hbar}{4i} \boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha} \tag{3.218}$$

eine Erhaltungsgröße mit der Dimension eines Drehimpulses, genannt „*Gesamtdrehimpuls*“. Es liegt nahe, den Zusatzterm als *Eigendrehimpuls* (*Spin*) des Teilchens zu interpretieren, da er ja nicht aus der Bahnbewegung resultiert. Man schreibt

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{3.219}$$

mit

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{2i} \boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha}. \tag{3.220}$$

Explizit findet man für die Standarddarstellung der α_i ,

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \tag{3.221}$$

Da $(\hbar/2) \boldsymbol{\sigma}$ bekanntlich die Drehimpulsvertauschungsrelationen erfüllt, tut \mathbf{S} dies ebenfalls. Außerdem gilt

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{S} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1} = S(S+1) \hbar^2 \mathbb{1} \quad \text{für } S = \frac{1}{2}. \tag{3.222}$$

\mathbf{S} repräsentiert also einen Spin $1/2$, genauer zwei Moden mit positiver und negativer Energie und jeweils dem Spin $1/2$. Aus Diracs linearem Ansatz für H folgt also zwingend, dass die beschriebenen Teilchen den Spin $1/2$ tragen und damit insbesondere *Fermionen* sind.

Damit ist die Bedeutung der vier Komponenten des Dirac-Spinors klar: Es ist $4 = 2 \times 2$, wobei ein Faktor von 2 die Zweige positiver und negativer Energie unterscheidet und der andere Faktor von 2 die beiden Einstellmöglichkeiten des Spins. Es ist wichtig, sich klarzumachen, dass diese vier Komponenten nichts mit den („zufällig“ auch) vier Dimensionen des Minkowski-Raums zu tun haben!

Wir haben gesehen, dass der Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} eine Erhaltungsgröße ist:

$$[H, \mathbf{J}] = 0. \quad (3.223)$$

Aufgrund der Translationsinvarianz des Raumes ist der Impuls \mathbf{p} eine weitere Erhaltungsgröße der freien Dirac-Theorie:

$$[H, \mathbf{p}] = [c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \mathbf{p}] = 0. \quad (3.224)$$

Nun gilt

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = p_1 x_2 p_3 - p_1 x_3 p_2 + p_2 x_3 p_1 - p_2 x_1 p_3 + p_3 x_1 p_2 - p_3 x_2 p_1 = 0, \quad (3.225)$$

woraus folgt

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{J} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{S} \quad (3.226)$$

$$\Rightarrow [H, \mathbf{p} \cdot \mathbf{S}] = [H, \mathbf{p} \cdot \mathbf{J}] = \mathbf{p} \cdot [H, \mathbf{J}] + [H, \mathbf{p}] \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (3.227)$$

Also ist $\mathbf{p} \cdot \mathbf{S}$ eine weitere Erhaltungsgröße. Die Eigenfunktionen der freien Dirac-Gleichung sind ebene Wellen mit scharfem Wellenvektor \mathbf{k} . Für diese definiert man die *Helizität* als Matrix

$$\hat{h} := \frac{\mathbf{k}}{k} \cdot \frac{2\mathbf{S}}{\hbar} \equiv \hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\Sigma}. \quad (3.228)$$

In der Standarddarstellung ist also

$$\hat{h} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (3.229)$$

[manchmal wird in Gl. (3.228) nicht mit $2/\hbar$ multipliziert, so dass hier ein Faktor $\hbar/2$ erscheint]. Beachte, dass \hat{h} kein Operator auf dem Hilbertraum ist, da \hat{h} nur für spezielle Wellenfunktionen, nämlich ebene Wellen, definiert ist. Die Helizität \hat{h} beschreibt die Spinkomponente (in Einheiten von $\hbar/2$) in Ausbreitungs- bzw. Bewegungsrichtung. Sie ist offensichtlich eine Erhaltungsgröße (die Komponenten senkrecht zu $\hat{\mathbf{k}}$ sind nicht erhalten). Ihre Eigenwerte sind $h = \pm 1$, wir können die vier Eigenzustände von H zum Wellenvektor \mathbf{k} durch

- $E \geq 0$,
- $h = \pm 1$

klassifizieren.



Wir können die (nicht normierten) Eigenfunktionen jetzt angeben: Sie lauten

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - iEt/\hbar} \quad (3.230)$$

mit

$$\psi_0 \equiv \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} W_+ \\ AW_+ \end{pmatrix} & \text{für } E > 0, h = +1, \\ \begin{pmatrix} W_- \\ -AW_- \end{pmatrix} & \text{für } E > 0, h = -1, \\ \begin{pmatrix} -AW_+ \\ W_+ \end{pmatrix} & \text{für } E < 0, h = +1, \\ \begin{pmatrix} AW_- \\ W_- \end{pmatrix} & \text{für } E < 0, h = -1, \end{cases} \quad (3.231)$$

wobei W_{\pm} Zweier-Eigen-spinoren der Helizität sind,

$$\hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} W_h = h W_h, \quad h = \pm 1, \quad (3.232)$$

und

$$A := \frac{\hbar ck}{|E| + mc^2}, \quad (3.233)$$

$$|E| = \sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4}. \quad (3.234)$$

Offenbar ist $A \ll 1$ falls $\hbar ck \ll mc^2$, d. h. im nichtrelativistischen Limes. Dann sind jeweils zwei Komponenten von ψ_0 klein und zwei groß.

Für massive Teilchen ist die Helizität zwar erhalten, aber nicht Lorentz-invariant, denn \hat{h} ist ein Skalarprodukt von Dreiervektoren, nicht von Vierervektoren. Transformieren wir vom Laborsystem auf ein Bezugssystem, das sich schneller als das Teilchen bewegt (das ist möglich für $m > 0$), so kehren sich $\hat{\mathbf{k}}$ und damit die Helizität um.

Man verwendet auch den Begriff der *Chiralität*. Diese ist definiert als $h \operatorname{sgn} E$. Teilchen mit positiver (negativer) Chiralität nennt man rechtshändig (linkshändig).

3.3.4 Wahrscheinlichkeitsdichte

Eine Motivation für die Dirac-Gleichung war, dass die Klein-Gordon-Gleichung keine positiv semidefinite, erhaltene Dichte zu definieren erlaubt. Wie sieht das bei der Dirac-Gleichung aus? Wir müssen wieder eine Kontinuitätsgleichung konstruieren. Aus der Dirac-Gleichung

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2 \right) \psi = 0 \quad (3.235)$$

erhalten wir

$$\psi^\dagger \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \beta mc^2 \right) \psi = i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar c \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi - mc^2 \psi^\dagger \beta \psi = 0 \quad (3.236)$$

mit dem Zeilenvektor (kein Operator!)

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*). \quad (3.237)$$

Die hermitesch konjugierte Dirac-Gleichung lautet

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} - i\hbar c \nabla \psi^\dagger \cdot \boldsymbol{\alpha} - \psi^\dagger \beta mc^2 = 0, \quad (3.238)$$

woraus folgt

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi - i\hbar c (\nabla \psi^\dagger) \cdot \boldsymbol{\alpha} \psi - mc^2 \psi^\dagger \beta \psi = 0. \quad (3.239)$$

Die Differenz der Glg. (3.236) und (3.239) lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) + i\hbar c \nabla \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) = 0 \quad (3.240)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) + c \nabla \cdot (\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi) = 0 \quad (3.241)$$

Wir erhalten die Kontinuitätsgleichung

$$\partial^\mu j_\mu = \partial_\mu j^\mu = 0, \quad (3.242)$$

wenn wir die kontravariante Viererstromdichte als

$$(j^\mu) := (\psi^\dagger c \psi, \psi^\dagger c \boldsymbol{\alpha} \psi) \quad (3.243)$$

definieren. Beachte das Auftreten des Geschwindigkeitsoperators $c\boldsymbol{\alpha}$. Die Viererstromdichte (j^μ) ist per Konstruktion erhalten. Die zeitliche Komponente $\rho := j^0/c = \psi^\dagger \psi$ ist auch offensichtlich positiv semidefinit. Wir können daher $\rho = \psi^\dagger \psi$ als erhaltene Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren. Diracs Programm war also in dieser Hinsicht erfolgreich.

3.3.5 Teilchen im elektromagnetischen Feld

Ein Spin-1/2-Teilchen im elektromagnetischen Feld wird wieder durch minimale Kopplung beschrieben. Der günstigste Ausgangspunkt ist die explizit kovariante Form der Dirac-Gleichung,

$$\left(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc \right) \psi(x) = 0. \quad (3.244)$$

Darin ersetzen wir ∂_μ durch die eichkovariante Ableitung,

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu + i \frac{q}{\hbar c} A_\mu. \quad (3.245)$$

Dies ergibt

$$\left(i\hbar \gamma^\mu D_\mu - mc \right) \psi(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - \frac{q}{c} \gamma^\mu A_\mu - mc \right) \psi(x) = 0. \quad (3.246)$$

Um dies durch einen Hamiltonian auszudrücken, schreiben wir

$$\left(\frac{i\hbar}{c} \gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c} \gamma^0 \phi(\mathbf{r}, t) + i\hbar \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla + \frac{q}{c} \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - mc \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.247)$$

Multiplikation mit $\gamma^0 = \beta$ von links ergibt

$$\left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c} \phi(\mathbf{r}, t) + i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \frac{q}{c} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \beta mc \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (3.248)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\hbar c}{i} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - q \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + q \phi(\mathbf{r}, t) + \beta mc^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) \equiv H \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.249)$$

Wir haben verwendet, dass gilt $\gamma^0 = \beta$, $\boldsymbol{\gamma} = \beta \boldsymbol{\alpha}$ und $\beta^2 = \mathbb{1}$. Daraus folgt

$$\boldsymbol{\alpha} = \beta \boldsymbol{\gamma} = \gamma^0 \boldsymbol{\gamma}. \quad (3.250)$$

Man findet leicht, dass die Viererstromdichte $(j^\mu) = (\psi^\dagger c \psi, \psi^\dagger c \boldsymbol{\alpha} \psi)$ weiterhin erhalten ist. Allerdings ist die Darstellung von j^μ mit Hilfe der γ -Matrizen hier günstiger:

$$(j^\mu) = (\psi^\dagger c \gamma^0 \gamma^\mu \psi, \psi^\dagger c \boldsymbol{\gamma}^0 \boldsymbol{\gamma} \psi). \quad (3.251)$$

Wir definieren

$$\bar{\psi} := \psi^\dagger \beta \equiv \psi^\dagger \gamma^0, \quad (3.252)$$

man nennt $\bar{\psi}$ die *Dirac-* oder *Pauli-Adjungierte* zu ψ oder, wenn Verwechslung mit dem hermitesch konjugierten Spinor ψ^\dagger unwahrscheinlich ist, auch einfach als *Adjungierte*. Damit ist

$$j^\mu = c \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \quad (3.253)$$

die explizit kovariante Form der Viererstromdichte. Allerdings ist bei der Definition von $\bar{\psi}$ die Matrix γ^0 eingegangen, die die nullte Komponente eines Vierervektors ist. Es ist daher nicht *a priori* klar, dass sich (j^μ) wie ein Vierervektor transformiert. Den Beweis führen wir hier nicht.

Wir überzeugen uns noch von der Erhaltung von j^μ :

$$\partial^\mu j_\mu = \partial^\mu (c \bar{\psi} \gamma_\mu \psi) = c (\partial^\mu \bar{\psi}) \gamma_\mu \psi + c \bar{\psi} \gamma_\mu \partial^\mu \psi. \quad (3.254)$$

Nun gilt gemäß der Dirac-Gleichung

$$\gamma_\mu \partial^\mu \psi = \gamma^\mu \partial_\mu \psi = \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{q}{c} \gamma^\mu A_\mu + mc \right) \psi. \quad (3.255)$$

Die hermitesch konjugierte Dirac-Gleichung lautet

$$-i\hbar (\partial_\mu \psi^\dagger) (\gamma^\mu)^\dagger - \frac{q}{c} \psi^\dagger (\gamma^\mu)^\dagger A_\mu - mc \psi^\dagger = 0. \quad (3.256)$$

Nun zeigt man durch explizites Nachrechnen, dass gilt

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0, \quad (3.257)$$

also folgt

$$-i\hbar (\partial_\mu \bar{\psi}) \gamma^\mu \gamma^0 - \frac{q}{c} \bar{\psi} \gamma^\mu \gamma^0 A_\mu - mc \bar{\psi} \gamma^0 = 0 \quad (3.258)$$

$$\Rightarrow -i\hbar (\partial_\mu \bar{\psi}) \gamma^\mu - \frac{q}{c} \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu - mc \bar{\psi} = 0 \quad (3.259)$$

$$\Rightarrow (\partial^\mu \bar{\psi}) \gamma_\mu = (\partial_\mu \bar{\psi}) \gamma^\mu = -\frac{1}{i\hbar} \bar{\psi} \left(\frac{q}{c} \gamma^\mu A_\mu + mc \right). \quad (3.260)$$

Schließlich folgt

$$\partial^\mu j_\mu = -\frac{c}{i\hbar} \bar{\psi} \left(\frac{q}{c} \gamma^\mu A_\mu + mc \right) \psi + \frac{c}{i\hbar} \bar{\psi} \left(\frac{q}{c} \gamma^\mu A_\mu + mc \right) \psi = 0. \quad (3.261)$$

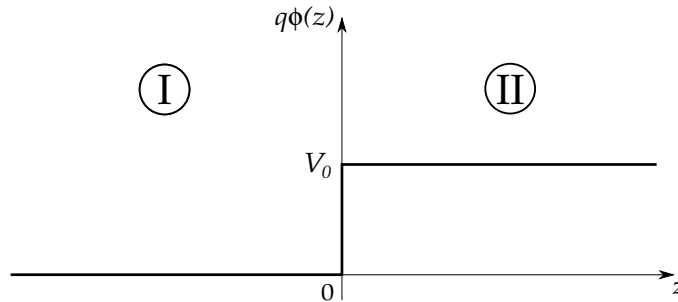
□

3.3.6 Klein-Paradoxon

Als Anwendung betrachten wir die Streuung an einer Potentialstufe im Rahmen der Dirac-Theorie. Das skalare Potential sei

$$\phi(z) = \frac{V_0}{q} \Theta(z), \quad V_0 > 0, \quad (3.262)$$

wobei $\Theta(z)$ die Heavisidesche Sprungfunktion ist.



Das Vektorpotential sei $\mathbf{A} \equiv 0$. Wir suchen stationäre Lösungen für einen von links einlaufenden Teilchenstrahl mit positiver Energie $E > 0$ und o. B. d. A. dem Spin-Zustand $|\uparrow\rangle$, also positiver Helizität. Die Dirac-Gleichung lautet, siehe Gl. (3.249),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{\hbar c}{i} \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + q\phi(z) + \beta mc^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.263)$$

und speziell in einer Raumdimension

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(z, t) = \left(\frac{\hbar c}{i} \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} + q\phi(z) + \beta mc^2 \right) \psi(z, t). \quad (3.264)$$

Wir wählen hier als räumliche Koordinate z und nicht x , um die einfachere Standarddarstellung von γ^3 bzw. α_3 verwenden zu können. Die Ergebnisse müssen natürlich analog sein. Wir machen den stationären Ansatz

$$\psi(z, t) = \psi(z) e^{-iEt/\hbar} \quad (3.265)$$

und erhalten die zeitunabhängige Dirac-Gleichung

$$E\psi(z, t) = -i\hbar c \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial z} + q\phi(z) \psi(z) + mc^2 \beta \psi(z) \quad (3.266)$$

$$\Rightarrow (E - q\phi(z)) \psi(z) = -i\hbar c \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial z} + mc^2 \beta \psi(z). \quad (3.267)$$

Wir betrachten eine einlaufende Welle im Bereich I (Ansatz!):

$$\psi_{\text{in}}(z) = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ A|\uparrow\rangle \end{pmatrix} e^{ikz} \quad \text{mit} \quad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.268)$$

Einsetzen ergibt

$$E \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ A|\uparrow\rangle \end{pmatrix} = \hbar c k \alpha_3 \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ A|\uparrow\rangle \end{pmatrix} + mc^2 \beta \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ A|\uparrow\rangle \end{pmatrix}. \quad (3.269)$$

Die erste und dritte Komponente dieser Spinorgleichung ergeben

$$E = \hbar c k A + mc^2 \quad \wedge \quad EA = \hbar c k - mc^2 A. \quad (3.270)$$

Die Lösung mit positiver Energie lautet

$$E = \sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4}, \quad (3.271)$$

$$A = \frac{E - mc^2}{\hbar c k} = \frac{\hbar c k}{E + mc^2}. \quad (3.272)$$

Für die reflektierte Welle erhalten wir dasselbe Ergebnis mit $k \rightarrow -k$, also $A \rightarrow -A$. Wir nehmen hier an, dass der Spin erhalten ist. Für die transmittierte Welle im Bereich II finden wir ebenfalls dasselbe Ergebnis, jedoch mit E durch $E - V_0$ ersetzt. Im Fall $|E - V_0| < mc^2$ wird die Wellenzahl

$$k' = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 c^4} \quad (3.273)$$

rein imaginär; $e^{ik'z}$ ergibt dann eine exponentiell fallende Lösung. Nach diesen Überlegungen machen wir die folgenden Ansätze in den Bereichen I und II:

$$\psi_{\text{I}}(z) = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ A|\uparrow\rangle \end{pmatrix} e^{ikz} + r \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ -A|\uparrow\rangle \end{pmatrix} e^{-ikz} \quad (3.274)$$

mit

$$k = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{E^2 - m^2 c^4}, \quad (3.275)$$

$$A = \frac{E - mc^2}{\hbar ck} = \frac{\hbar ck}{E + mc^2} \quad (3.276)$$

und

$$\psi_{\text{II}}(z) = t \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ A'|\uparrow\rangle \end{pmatrix} e^{ik'z} \quad (3.277)$$

mit

$$k' = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 c^4}, \quad (3.278)$$

$$A' = \frac{E - V_0 - mc^2}{\hbar ck'} = \frac{\hbar ck'}{E - V_0 + mc^2}. \quad (3.279)$$

Da die Dirac-Gleichung von *erster* Ordnung in räumlichen Ableitungen ist, existiert nur die *eine* Anschlussbedingung

$$\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0) \quad (3.280)$$

$$\Rightarrow 1 + r = t \quad \wedge \quad A - Ar = A't \quad (3.281)$$

$$\Rightarrow r = \frac{A - A'}{A + A'} \quad \wedge \quad t = \frac{2A}{A + A'}. \quad (3.282)$$

Zur Bestimmung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten betrachten wir die Stromdichte

$$j \equiv j^3 = \psi^\dagger c \alpha_3 \psi, \quad (3.283)$$

also für den einlaufenden Strahl (A ist reell)

$$j_{\text{in}} = c (1, 0, A, 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ A \\ 0 \end{pmatrix} = 2cA, \quad (3.284)$$

für den reflektierten Strahl

$$j_R = c r^* r (1, 0, -A, 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -A \\ 0 \end{pmatrix} = -2cA r^* r \quad (3.285)$$

und für den transmittierten Strahl (A' kann reell oder imaginär sein)

$$j_T = c t^* t (1, 0, (A')^*, 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ A' \\ 0 \end{pmatrix} = c (A' + A'^*) t^* t = 2c \operatorname{Re}(A') t^* t. \quad (3.286)$$

Damit ist der Reflexionskoeffizient

$$R = \frac{-j_R}{j_{\text{in}}} = r^* r \quad (3.287)$$

und der Transmissionskoeffizient

$$T = \frac{j_T}{j_{\text{in}}} = \frac{\operatorname{Re}(A') t^* t}{A}. \quad (3.288)$$

Wir unterscheiden zwei Fälle:

1. $|E - V_0| < mc^2$: A' ist rein imaginär, damit ist $T = 0$ und

$$R = \left| \frac{A - A'}{A + A'} \right|^2 = \left| \frac{A - i \operatorname{Im} A'}{A + i \operatorname{Im} A'} \right|^2 = \frac{A^2 + (\operatorname{Im} A')^2}{A^2 + (\operatorname{Im} A')^2} = 1. \quad (3.289)$$

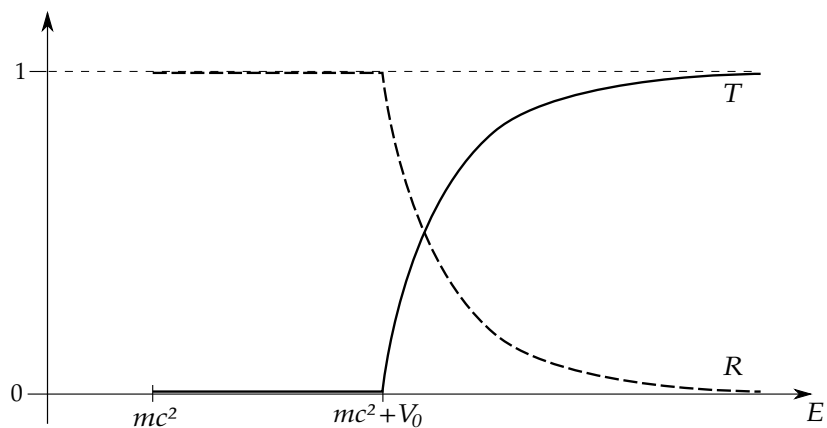
2. $|E - V_0| \geq mc^2$: A' ist reell. Es folgt

$$R = \left(\frac{A - A'}{A + A'} \right)^2 = \frac{A^2 - 2AA' + (A')^2}{A^2 + 2AA' + (A')^2}, \quad (3.290)$$

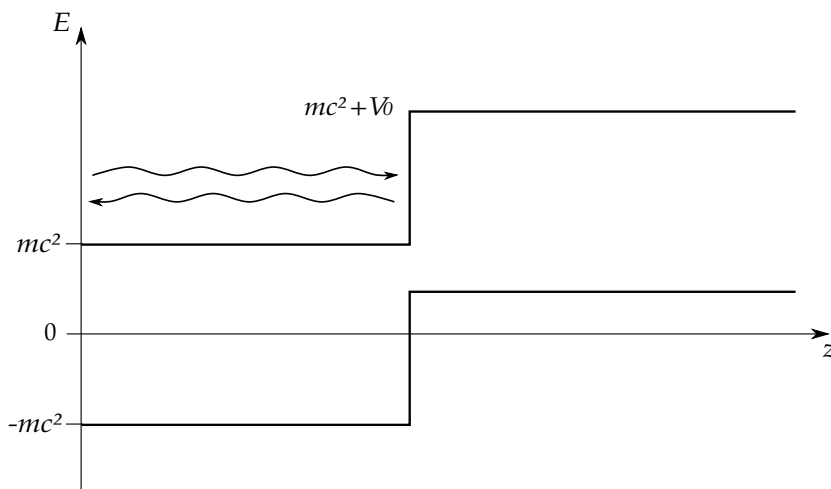
$$T = \frac{A'}{A} \frac{4A^2}{(A + A')^2} = \frac{4AA'}{A^2 + 2AA' + (A')^2}, \quad (3.291)$$

so dass $R + T = 1$ gilt, wie erwartet.

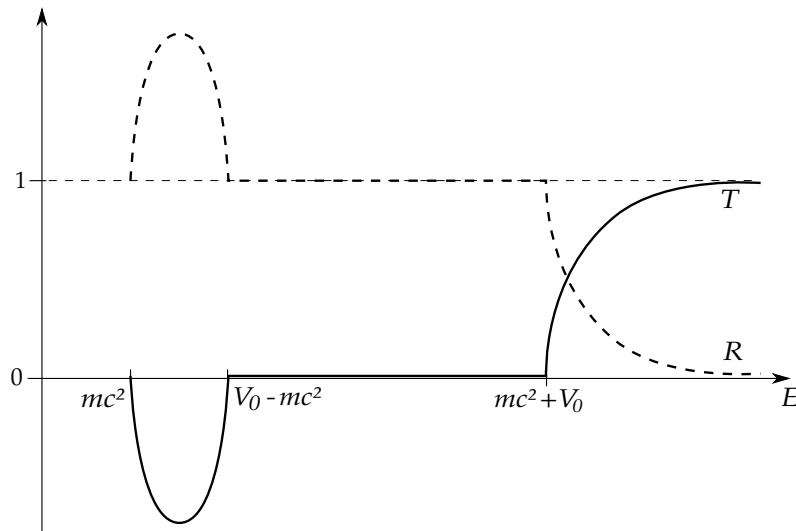
Solange $V_0 \leq 2mc^2$ ist, ergibt sich kein ungewöhnliches Verhalten:



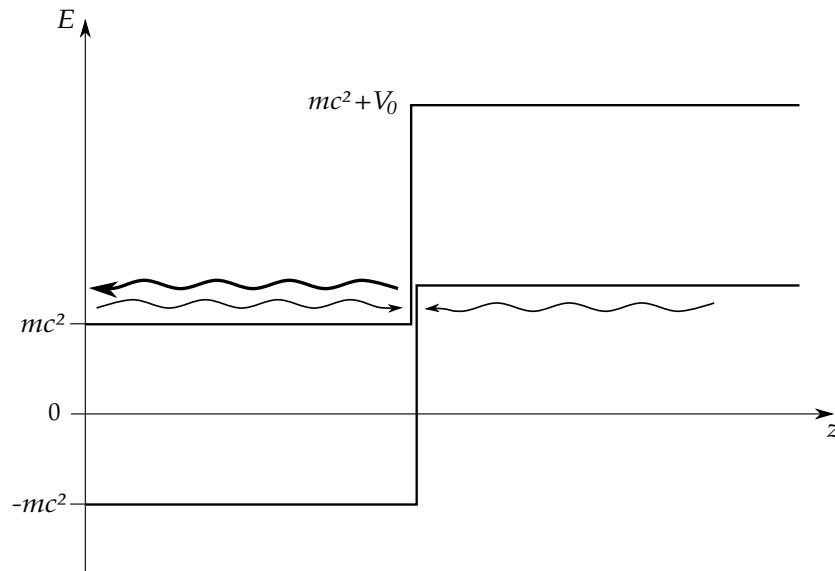
keine einlaufende
Welle



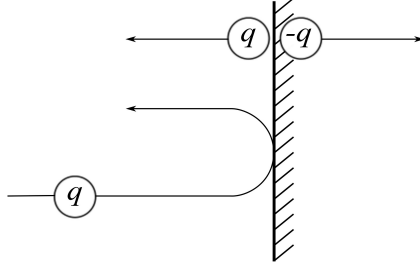
Das *Klein-Paradoxon* tritt auf, wenn die Stufe höher ist als die zweifache Ruheenergie: $V_0 > 2mc^2$.



Im Energieintervall $mc^2 < E < V_0 - mc^2$ finden wir $R > 1$ und $T < 0$. Wenn wir die Definitionen (3.287) und (3.288) von R und T betrachten, sehen wir, dass einerseits $|j_R| > j_{\text{in}}$ gilt und andererseits der transmittierte Strom j_T in die umgekehrte Richtung fließt. Weiterhin finden wir $|A'| > 1$, d. h. die transmittierten Teilchen haben ein hohes Gewicht von Zuständen unterhalb der Energielücke. Der Effekt beruht auf Tunneln von Zuständen oberhalb der Lücke in Zustände unterhalb der Lücke.



Deren Strom „zählt aber negativ“. Das liegt daran, dass ihre Geschwindigkeit *antiparallel* zu \mathbf{k} ist. Schon in der Klein-Gordon-Theorie hatte es sich angeboten, Zuständen unterhalb der Energielücke stattdessen die entgegengesetzte Ladung zuzuordnen. In demselben Sinne können wir sagen, dass an der Stufe zusätzliche Paare von Teilchen mit den Ladungen $\pm q$ erzeugt werden, so dass die Teilchen der Ladung $-q$ nach rechts laufen und die mit der Ladung q nach links, zusätzlich zu den reflektierten einlaufenden Teilchen. Die Interpretation der zusätzlichen Teilchen mit Ladungen $\pm q$ als Teilchen-Antiteilchen-Paare ist naheliegend. Diese Idee werden wir im nächsten Abschnitt weiter verfolgen.



Dies ergibt eine plausible Deutung der Ergebnisse $R > 1$ und $T < 0$. Es sei daran erinnert, dass wir stationäre Zustände fester Energie E betrachten. Dennoch stellt sich die Frage, wie es sein kann, dass der reflektierte Strahl eine höhere Intensität hat als der einlaufende Strahl ($R > 1$). Die Antwort ist, dass der Energiestrom im Bereich II negativ ist – die zusätzliche Energie läuft von rechts ein. Damit ist die gefundene Lösung zwar ein sinnvoller stationärer Zustand, passt im Klein-Regime aber nicht zur Aufgabe, ausschließlich von links einlaufende Teilchen zu betrachten.

Wir probieren noch einen anderen Ansatz, der im Bereich II eine positive Geschwindigkeit und damit nach rechts laufende Energie annimmt. Dazu schreiben wir

$$\psi_{\text{I}}(z) = \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ A|\uparrow\rangle \end{pmatrix} e^{ikz} + \tilde{r} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ -A|\uparrow\rangle \end{pmatrix} e^{-ikz} \quad (3.292)$$

mit

$$k = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{E^2 - m^2 c^4}, \quad (3.293)$$

$$A = \frac{E - mc^2}{\hbar c k} = \frac{\hbar c k}{E + mc^2} \quad (3.294)$$

und

$$\psi_{\text{II}}(z) = \tilde{t} \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle \\ -A'|\uparrow\rangle \end{pmatrix} e^{-ik'z} \quad (3.295)$$

mit

$$k' = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2 c^4}, \quad (3.296)$$

$$A' = \frac{E - V_0 - mc^2}{\hbar c k'} = \frac{\hbar c k'}{E - V_0 + mc^2}. \quad (3.297)$$

Der wesentlichen Unterschiede sind der Faktor $e^{-ik'z}$ anstelle von $e^{ik'z}$ und der damit einhergehende Vorzeichenwechsel von A' zu $-A'$ in Gl. (3.295). Die Änderung sollte die Koeffizienten in der Lösung ändern, die wir daher mit \tilde{r} und \tilde{t} bezeichnen. Aus $\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0)$ folgt

$$1 + \tilde{r} = \tilde{t} \quad \wedge \quad A - A\tilde{r} = -A'\tilde{t} \quad (3.298)$$

$$\Rightarrow \quad \tilde{r} = \frac{A + A'}{A - A'} \quad \wedge \quad \tilde{t} = \frac{2A}{A - A'}. \quad (3.299)$$

Im Bereich I gilt weiterhin $j_{\text{in}} = 2cA$ und $j_{\text{R}} = -2cA\tilde{r}^*\tilde{r}$. Im Bereich II beträgt der Strom

$$j_{\text{T}} = c\tilde{t}^*\tilde{t}(1, 0, -(A')^*, 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -A' \\ 0 \end{pmatrix} = -2c \operatorname{Re}(A') \tilde{t}^*\tilde{t}. \quad (3.300)$$

Damit ist

$$\tilde{R} = \frac{-j_{\text{R}}}{j_{\text{in}}} = \tilde{r}^*\tilde{r}, \quad (3.301)$$

$$\tilde{T} = \frac{j_T}{j_{\text{in}}} = -\frac{\text{Re}(A') \tilde{t}^* \tilde{t}}{A}. \quad (3.302)$$

Wir unterscheiden wieder zwei Fälle:

1. $|E - V_0| < mc^2$: A' ist rein imaginär, also ist $\tilde{T} = 0$ und

$$\tilde{R} = \left| \frac{A + A'}{A - A'} \right|^2 = \left| \frac{A + i \text{Im } A'}{A - i \text{Im } A'} \right|^2 = 1. \quad (3.303)$$

2. $|E - V_0| \geq mc^2$: A' ist reell. Es folgt

$$\tilde{R} = \left(\frac{A + A'}{A - A'} \right)^2 = \frac{A^2 + 2AA' + (A')^2}{A^2 - 2AA' + (A')^2}, \quad (3.304)$$

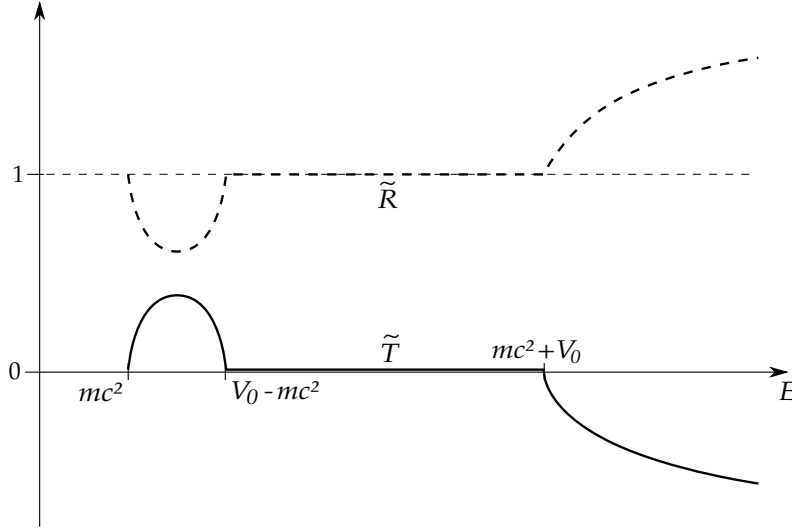
$$\tilde{T} = -\frac{A'}{A} \frac{4A^2}{(A - A')^2} = \frac{-4AA'}{A^2 - 2AA' + (A')^2}. \quad (3.305)$$

Offensichtlich folgt wieder $\tilde{R} + \tilde{T} = 1$.

Beachte, dass der Reflexionskoeffizient mit der alten Lösung gemäß

$$\tilde{R} = \frac{1}{R} \quad (3.306)$$

zusammenhängt. Damit erhalten wir sofort, für $V_0 > 2mc^2$:



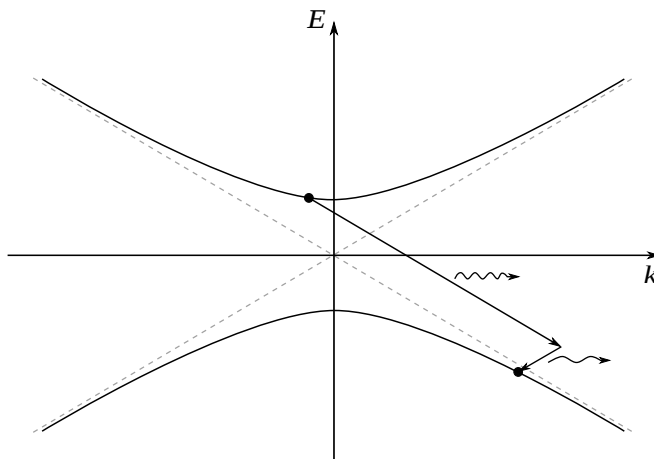
Der alternative Ansatz ergibt also im Regime des Klein-Paradoxons, $mc^2 < E < V_0 - mc^2$, Reflexions- und Transmissionskoeffizienten zwischen 0 und 1, dafür aber im eigentlich harmlosen Regime mit der Energie oberhalb der Stufe, $E > mc^2 + V_0$, anomale Werte $\tilde{R} > 1$ und $\tilde{T} < 0$. Im Klein-Regime beschreiben wir jetzt wirklich Teilchen, die aus Zuständen oberhalb der Energielücke im Bereich I in Zustände unterhalb der Energielücke im Bereich II tunneln. Das ist natürlich nur möglich, wenn diese unbesetzt sind (s. u.). Insgesamt können wir für alle Fälle vernünftige Reflexions- und Transmissionskoeffizienten finden, nur nicht immer mit demselben Ansatz. Das Interband-Tunneln ist interessant, aber nicht paradox.

3.3.7 Löchertheorie

Die Dispersion freier Dirac-Teilchen ist, wie wir gesehen haben,

$$E = \pm \sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4}. \quad (3.307)$$

Damit leidet die Dirac-Theorie, wie die Klein-Gordon-Theorie, unter dem Problem, dass das Spektrum nach unten unbeschränkt ist. Für die *freie* Theorie ist dies noch harmlos, da keine Übergänge zwischen Einteilchenzuständen stattfinden können. Koppeln wir aber die Teilchen an das elektromagnetische Feld, so können sie beliebig viel Energie abstrahlen und ihre Energie divergiert dabei nach $-\infty$. Genauer müssen wir zwei Prozesse unterscheiden: 1. Teilchen auf dem oberen Ast der Dispersion können unter Emission von (mindestens) *zwei* Photonen auf den unteren Ast wechseln. Zwei Photonen sind erforderlich, weil eines nicht sowohl die Energiedifferenz als auch die Impulsdifferenz aufnehmen kann.



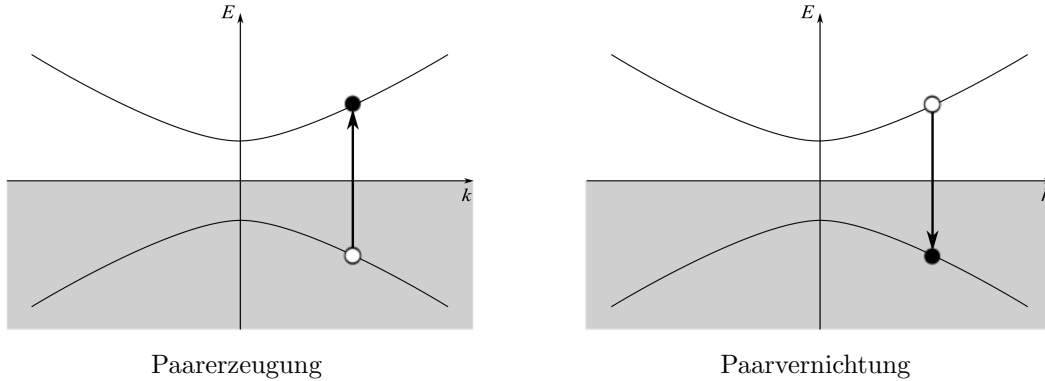
2. Teilchen auf dem unteren Ast (oder Teilchen auf dem oberen Ast, die dort bleiben) können nicht allein durch Emission von Photonen relaxieren, da Energie und Impuls dabei nicht simultan erhalten werden können. Es ist die Absorption eines Photons oder die Beteiligung mehrere Dirac-Teilchen notwendig. Die Abstrahlung von unendlich viel Energie, die mit der Relaxation zu $E \rightarrow -\infty$ einhergehen müsste, wird nicht beobachtet.

Dirac hat die *Löchertheorie* formuliert, um dieses Problem zu beheben: Im *Vakuum* sind die Zustände negativer Energie nicht, wie man zunächst denken würde, unbesetzt, sondern sie sind alle besetzt. Sie spielen also eine ähnliche Rolle wie der Fermi-See in Festkörpern. Aufgrund des *Pauli-Prinzips* können sie nicht mehrfach besetzt werden. Ein zusätzlich eingeführtes Elektron hat daher notwendigerweise *positive* Energie $E \geq mc^2$. Dirac musste Folgendes postulieren:

1. Das Fermi-Gas von besetzten Zuständen, also das Vakuum, hat keine elektromagnetische Wirkung, obwohl seine Ladungsdichte unendlich groß ist.
2. Das Vakuum hat keine gravitative Wirkung, obwohl seine Energiedichte unendlich groß ist.
3. Die negativ divergente Energie des Vakuums kann als Nullpunkt der Energieskala gewählt werden.

Wie in Abschnitt 2.4.2 diskutiert, kostet dann die Entfernung eines Teilchens *negativer* Energie $-\sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4}$ die *positive* Energie $\sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4}$. Ein fehlendes Teilchen nennt man, wie in der Halbleiterphysik, ein *Loch*. Ein Loch trägt die entgegengesetzte Ladung $-q$. Die Betrachtung von Wellenpaketen aus Zuständen negativer Energie zeigt, dass man die Dynamik in der Tat unter der Annahme der Ladung $-q$ und der Dispersion $\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ verstehen kann. Die träge Masse der Löcher ist positiv und gleich der trägen Masse der Teilchen.

Die Identifikation der Löcher mit *Antiteilchen* liegt nahe. Damit kann man nun im Prinzip die Paarerzeugung beschreiben: Ein Teilchen wird aus einem Zustand negativer Energie in einen Zustand positiver Energie angehoben und lässt ein Loch (Antiteilchen) zurück. Entsprechend kann man die Paarvernichtung durch den umgekehrten Prozess beschreiben.



Die Löchertheorie ist jedoch aus mehreren Gründen problematisch:

- Die Begriffe des Vakuums, der Paarerzeugung und -vernichtung und des Pauli-Prinzips sind sämtlich nur im Rahmen einer Mehrteilchentheorie sinnvoll. Die Löchertheorie ist also als Interpretation der *Einteilchen-Dirac-Theorie* inkonsistent.
- Zwar sind die Voraussagen der Theorie symmetrisch für Teilchen und Antiteilchen, aber die Formulierung ist asymmetrisch (unendlich viele Teilchen im Vakuum, aber keine Antiteilchen).
- Die Löchertheorie muss annehmen, dass eine unendliche Dichte von massiven, geladenen Teilchen keine beobachtbaren Konsequenzen hat.

Diese Probleme lassen sich im Rahmen der Mehrteilchentheorie beheben. Die Anwendung der Methoden aus Kap. 2, insbesondere der *Zweiten Quantisierung*, führt auf eine konsistente *Dirac-Feldtheorie*. Diese wird in der Vorlesung Quantenfeldtheorie besprochen. Siehe auch das Skript zur Vorlesung Vielteilchentheorie.

3.4 Nichtrelativistischer Grenzfall und relativistische Korrekturen

Die Dirac-Gleichung und die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung scheinen sehr verschieden zu sein. Dennoch sollte sich die nichtrelativistische Quantentheorie als Grenzfall der Dirac-Theorie ergeben, wenn die Teilchengeschwindigkeit klein im Vergleich zur Lichtgeschwindigkeit c ist. In diesem Abschnitt untersuchen wir diesen Grenzfall und werden dabei auch herausfinden, was mit dem Teilchen-Spin geschieht. Wir betrachten auch die führenden Korrekturen zur Schrödinger-Theorie, wenn relativistische Effekte nicht ganz vernachlässigt werden können. Dies ist z. B. in der Festkörperphysik wichtig.

3.4.1 Große und kleine Komponenten, Pauli-Theorie

Wir gehen von der Hamiltonschen Formulierung der Dirac-Theorie für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld aus, siehe Gl. (3.249):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = \left[c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\phi + \beta mc^2 \right] \psi \quad (3.308)$$

mit

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (3.309)$$

Wir suchen stationäre Zustände und schreiben ψ und H wieder in Blockform,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}, \quad (3.310)$$

$$H = c \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\phi + \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} mc^2. \quad (3.311)$$

Dann lautet die Eigenwertgleichung für die Energie, also die zeitunabhängige Dirac-Gleichung,

$$c \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \chi \\ \boldsymbol{\sigma} \varphi \end{pmatrix} + q\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3.312)$$

Dies ergibt zwei gekoppelte Gleichungen für die Zweierspinoren $\varphi(\mathbf{r})$, $\chi(\mathbf{r})$:

$$c \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi = (E - q\phi - mc^2) \varphi, \quad (3.313)$$

$$c \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi = (E - q\phi + mc^2) \chi. \quad (3.314)$$

Wir lösen die zweite Gleichung nach χ auf,

$$\chi = \frac{1}{E - q\phi + mc^2} c \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi. \quad (3.315)$$

Soweit ist alles exakt. Wir betrachten nun den Fall $E > 0$ ($E < 0$ ist analog). Im nichtrelativistischen Grenzfall ist die Geschwindigkeit klein, $v \ll c$. Noch allgemeiner definieren wir den nichtrelativistischen Grenzfall dadurch, dass die Ruheenergie mc^2 groß im Vergleich zu allen anderen Energieskalen ist. Dann ist $E \approx mc^2$ und es folgt

$$E - q\phi + mc^2 \approx 2mc^2 \quad (3.316)$$

und

$$\chi \approx \frac{1}{2mc^2} c \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi = \frac{1}{2mc} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi. \quad (3.317)$$

Eine Abschätzung für die Geschwindigkeit erhalten wir aus dem klassischen Grenzfall:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \frac{\partial H_{\text{klass}}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left[\sqrt{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 + q\phi} \right] \\ &= \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) c^2}{\sqrt{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 c^2 + m^2 c^4}} \approx \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) c^2}{mc^2} = \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right). \end{aligned} \quad (3.318)$$

Damit sehen wir, dass χ relativ zu φ um einen Faktor der Größenordnung $v/c \ll 1$ kleiner ist. Man nennt daher φ die *große* und χ die *kleine* Komponente von ψ für den Fall $E > 0$. Wir schreiben

$$\chi \cong \frac{1}{2mc} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi + \mathcal{O}\left(\frac{v^2}{c^2}\right). \quad (3.319)$$

Einsetzen in die Gleichung (3.313) für die große Komponente ergibt

$$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi + \mathcal{O}\left(\frac{v^3}{c^3}\right) \cong (E - q\phi - mc^2) \varphi. \quad (3.320)$$

In führender Ordnung in v/c erhalten wir damit die *Pauli-Gleichung*

$$H_{\text{Pauli}} \varphi(\mathbf{r}) = (E - mc^2) \varphi(\mathbf{r}) \quad (3.321)$$

mit

$$H_{\text{Pauli}} := \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} + q\phi. \quad (3.322)$$

Dieser Hamiltonian sieht des nichtrelativistischen Version schon recht ähnlich, aber die Pauli-Spin-Matrizen stören noch. Wir verwenden die Identität

$$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{m,n=1}^3 a_m \sigma_m b_n \sigma_n = \sum_{m,n} a_m b_n \sigma_m \sigma_n = \sum_m a_m b_m \underbrace{\sigma_m \sigma_m}_{=1_2} + \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} a_m b_n \sigma_m \sigma_n$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_m a_m b_m \mathbb{1}_2 + \sum_{m,n,p} a_m b_n \epsilon_{mnp} i\sigma_p \\
&= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}.
\end{aligned} \tag{3.323}$$

Im ersten Term in der letzten Zeile ist eine Einheitsmatrix $\mathbb{1}_2$ impliziert. Damit ist

$$\begin{aligned}
H_{\text{Pauli}} &= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{i}{2m} \left[\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \times \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \right] \cdot \boldsymbol{\sigma} + q\phi \\
&= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{iq}{2mc} (\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + q\phi \\
&= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{iq}{2mc} \left[\frac{\hbar}{i} (\nabla \times \mathbf{A}) - \cancel{\frac{\hbar}{i} \mathbf{A} \times \nabla} + \cancel{\frac{\hbar}{i} \mathbf{A} \times \nabla} \right] \cdot \boldsymbol{\sigma} + q\phi \\
&= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{q\hbar}{2mc} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} + q\phi.
\end{aligned} \tag{3.324}$$

Betrachten wir speziell ein Elektron, so ist

$$H_{\text{Pauli}} = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} - e\phi. \tag{3.325}$$

Offenbar tritt ein *Zeeman-Term* proportional zu $\mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \equiv \mathbf{B} \cdot \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ auf. Wir führen das *magnetische Moment* $\boldsymbol{\mu}_e$ ein durch

$$\frac{e\hbar}{2m_e c} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} \tag{3.326}$$

mit

$$\boldsymbol{\mu}_e := -\frac{e\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{S} = -2 \frac{e\hbar}{2m_e c} \frac{\mathbf{S}}{\hbar} = -2\mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \tag{3.327}$$

und dem *Bohrschen Magneton*, in Gaußschen Einheiten,

$$\mu_B := \frac{e\hbar}{2m_e c}. \tag{3.328}$$

Durch Vergleich mit der allgemeinen Beziehung

$$\boldsymbol{\mu} = \pm g\mu_B \frac{\mathbf{J}}{\hbar} \tag{3.329}$$

(das Vorzeichen hängt vom Vorzeichen der Ladung des Teilchens ab) finden wir, dass der Landé-Faktor des Elektronenspins

$$g = 2 \tag{3.330}$$

beträgt. Die Kopplung an das elektromagnetische Feld führt zu einer kleinen Korrektur, die im Rahmen der QED berechnet werden kann. Mit dieser Korrektur ist $g = 2,0023$. Zur Erinnerung: Für die Bahnbewegung eines Elektrons findet man

$$\boldsymbol{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e c} \mathbf{L} = -\mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}, \tag{3.331}$$

also den Landé-Faktor $g = 1$. Wir erhalten folgende Resultate:

- Das Elektron hat auch im nichtrelativistischen Grenzfall einen Eigendrehimpuls (Spin) $S = 1/2$.
- Dieser ist mit einem magnetischen Moment verbunden, das doppelt so groß ist, wie für Bahndrehimpulse.

3.4.2 Relativistische Korrekturen, Spin-Bahn-Kopplung

Bewegt sich ein Teilchen „nicht ganz so langsam“, müssen wir über die Pauli-Gleichung hinaus die ersten Korrekturen in v/c bzw. $1/m$ berücksichtigen. Die bei der Herleitung der Pauli-Gleichung verwendete Methode lässt sich nicht leicht auf höhere Ordnungen verallgemeinern. Eine Schwierigkeit beruht auf dem Term $\phi(\mathbf{r}, t)$ im Nenner von Gl. (3.315), der nicht mit \mathbf{p} kommutiert. Stattdessen verwendet man die sogenannte *Foldy-Wouthuysen-Transformation*. Die Idee ist die folgende: Wir suchen eine evtl. zeitabhängige unitäre Transformation

$$U = e^{iS} \quad (3.332)$$

(S ist hermitesch), die die großen und kleinen Komponenten in

$$\psi' = \begin{pmatrix} \varphi' \\ \chi' \end{pmatrix} = e^{iS} \psi \quad (3.333)$$

bis zu einer gewünschten Ordnung in $1/m$ entkoppelt. Die Entkopplung bedeutet, dass die transformierte Gleichung für ψ' bis zu dieser Ordnung keine Terme enthält, die φ' und χ' verknüpfen. Bis zu dieser Ordnung haben wir damit unabhängige Gleichungen für die Zweierspinoren φ' (wichtig für positive Energien) und χ' (wichtig für negative Energien).

Die Entwicklung in $1/m$ oder äquivalent in $1/mc^2$ ist mathematisch sauberer als die in v/c , da mc^2 ein *Parameter* der Theorie ist, während wir \mathbf{v} als Erwartungswert oder Operator ansehen müssen. Die Bedingung, dass $1/mc^2$ klein sein soll, bedeutet dabei, dass alle anderen Beiträge zur Energie klein gegenüber der Ruheenergie mc^2 sein sollen, was offensichtlich den nichtrelativistischen Grenzfall ergibt.

Aus der Dirac-Gleichung erhalten wir

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{iS} \psi = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} e^{iS} \right) \psi + e^{iS} \underbrace{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}_{= H\psi} \\ &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} e^{iS} \right) e^{-iS} \psi' + e^{iS} H e^{-iS} \psi' \\ &= -i\hbar e^{iS} \left(\frac{\partial}{\partial t} e^{-iS} \right) \psi' + e^{iS} H e^{-iS} \psi' \stackrel{!}{=} H' \psi'. \end{aligned} \quad (3.334)$$

Der transformierte Dirac-Hamiltonian lautet daher

$$H' = e^{iS} \left(H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) e^{-iS}. \quad (3.335)$$

Der ungewohnte zweite Term mit $\partial/\partial t$ erscheint, weil S zeitabhängig sein kann. Es soll also ein S gefunden werden, so dass in H' alle Terme bis zu einer gewissen Ordnung in $1/mc^2$ verschwinden, die große und kleine Komponenten koppeln. Wir geben hier nur die wesentlichen Ergebnisse an:

Fordern wir die Entkopplung bis zur Ordnung $1/mc^2$, so erhalten wir wieder den Pauli-Hamiltonian H_{Pauli} für die großen Komponenten. Fordern wir dagegen die Entkopplung bis zur Ordnung $(1/mc^2)^3$, so erhalten wir für die großen Komponenten die transformierte Gleichung (wir lassen jetzt die Striche an H' und φ' weg)

$$H\varphi = (E - mc^2) \varphi \quad (3.336)$$

mit

$$\begin{aligned} H &= \underbrace{\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{q\hbar}{2mc} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} + q\phi}_{H_{\text{Pauli}}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{1}{8m^3 c^2} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^4}_{\text{Korrektur zur kinetischen Energie}} - \underbrace{\frac{q\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla \cdot \mathbf{E}}_{\text{Darwin-Term}} - \underbrace{\frac{q\hbar}{4m^2 c^2} (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}} + \underbrace{i \frac{q\hbar^2}{8m^2 c^3} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\sigma}}_{\text{Korrektur zur Zeeman-Energie}}. \end{aligned} \quad (3.337)$$

Wir machen einige Bemerkungen zu den neuen Termen: Die Korrektur zur kinetischen Energie ist negativ, sie reduziert also die kinetische Energie. Ihr Ursprung ist einfach zu verstehen: Die wahre Dispersion wird durch die Einsteinsche Energie-Impuls-Beziehung gegeben und ist damit hyperbolisch und nicht parabolisch. Der Korrekturterm ist der zweite Term in einer Taylor-Entwicklung der Energie-Impuls-Beziehung in $\mathbf{p} - (q/c) \mathbf{A}$. Den Darwin-Term kann man als Korrektur zur potentiellen Energie interpretieren. Er enthält

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\nabla^2 \phi = 4\pi\rho, \quad (3.338)$$

wobei ρ die Ladungsdichte ist, von der \mathbf{E} erzeugt wird, nicht die Ladungsdichte $q|\psi|^2$ des betrachteten Dirac-Teilchens. Speziell in Atomen wird dieser Term nur für s -Orbitale relevant sein, da $\rho(\mathbf{r}) \approx Ze\delta(\mathbf{r})$ und nur s -Orbitale eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kernort $\mathbf{r} = 0$ haben. Der letzte Term in Gl. (3.337) verschwindet offensichtlich für statische Felder. Mit Hilfe des Faraday-Gesetzes $\nabla \times \mathbf{E} = -(1/c) \partial \mathbf{B} / \partial t$ können wir ihn auch schreiben als

$$-i \frac{q\hbar^2}{8m^2c^2} (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.339)$$

In dieser Form kann man ihn mit dem sehr ähnlichen Spin-Bahn-Kopplungsterm zusammenfassen. Für beliebige elektromagnetische Felder ist nur die Summe beider Terme hermitesch. Wir betrachten im Folgenden aber nur statische Felder.

Die Spin-Bahn-Kopplung ist i. A. die wichtigste Korrektur. Wir können sie für ein zeitunabhängiges Vektorpotential \mathbf{A} schreiben als

$$\begin{aligned} H_{SB} &= -\frac{q\hbar}{4m^2c^2} (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad \Big| \quad \dot{\mathbf{A}} = 0 \\ &= +\frac{q\hbar}{4m^2c^2} (\nabla\phi \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \quad (3.340)$$

wobei $V = q\phi$ das lokale Potential ist. Speziell für Zentralpotential gilt

$$\nabla\phi = \frac{d\phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (3.341)$$

also

$$H_{SB} = \frac{q\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{q}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}. \quad (3.342)$$

Wir finden also eine $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ -Kopplung, wie sie aus der Atomphysik bekannt ist. Beachte, dass der Vorfaktor stark r -abhängig ist. Für das Coulomb-Potential $\phi \sim 1/r$ ist

$$\frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \sim \frac{1}{r^3}. \quad (3.343)$$

Wegen H_{SB} kommutieren weder \mathbf{L} noch \mathbf{S} mit dem Hamiltonian, also sind \mathbf{L} und \mathbf{S} keine Erhaltungsgrößen. H_{Pauli} für ein Zentralpotential und $\mathbf{B} = 0$ kommutiert hingegen mit \mathbf{L} und \mathbf{S} . Die Verletzung der separaten Erhaltung von \mathbf{L} und \mathbf{S} ist also ein relativistischer Effekt.

Jedoch gilt für den Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$:

$$[\mathbf{J}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}] = \left[\mathbf{J}, \frac{\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2}{2} \right] = \frac{1}{2} [\mathbf{J}, \mathbf{J}^2] - \frac{1}{2} [\mathbf{L}, \mathbf{L}^2] - \frac{1}{2} [\mathbf{S}, \mathbf{S}^2] = 0 \quad (3.344)$$

$$\Rightarrow [\mathbf{J}, H_{SB}] = 0. \quad (3.345)$$

(Bei der letzten Folgerung haben wir verwendet, dass der Vorfaktor in H_{SB} nur vom Abstand r abhängt und daher mit \mathbf{L} und \mathbf{J} kommutiert.) Der Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} ist also im Zentralpotential auch in Anwesenheit von Spin-Bahn-Kopplung erhalten.

3.4.3 Feinstruktur des Spektrums des Wasserstoffatoms

Eine wichtige Konsequenz der Spin-Bahn-Kopplung ist die Aufhebung von Entartungen im Energiespektrum von Atomen und Ionen. Dies ist die sogenannte *Feinstrukturaufspaltung*. Wir könnten sie ausgehend vom genäherten Hamiltonian mit relativistischen Korrekturen aus dem vorigen Abschnitt diskutieren. Jedoch ist dies für wasserstoffähnliche Systeme unnötig, da sich die Dirac-Gleichung für ein Elektron im Coulomb-Potential exakt lösen lässt. Die Vorgehensweise ist ähnlich zur Lösung des Wasserstoffproblems in der Schrödinger-Quantenmechanik. Wir geben hier nur das Ergebnis für die Energieeigenwerte an.

Der Hamiltonian lautet, jetzt in SI-Einheiten,

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - e\phi(\mathbf{r}) + \beta m_e c^2 = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \beta m_e c^2, \quad (3.346)$$

wobei Z die Kernladungszahl ist. Die Eigenenergien sind

$$E_{n,j} = m_e c^2 \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{[n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - Z^2 \alpha^2}]^2} \right)^{-1/2}, \quad (3.347)$$

wobei $n = 1, 2, \dots$ die Hauptquantenzahl und $j = 1/2, 3/2, \dots$ die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses ist. Nach den üblichen Regeln für die Kombination von Drehimpulsen ist

$$j = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{für } l = 0, \\ l \pm \frac{1}{2} & \text{für } l = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (3.348)$$

wobei l die Quantenzahl des Bahndrehimpulses und $1/2$ die Quantenzahl des Elektronenspins ist. Die Zustände werden durch $n l_j$ bezeichnet, wobei $l = 0, 1, 2, \dots$ durch den Buchstaben s, p, d, f, g, h, \dots ersetzt wird.

$$\alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (3.349)$$

ist die *Feinstrukturkonstante* in SI-Einheiten (jetzt wird klar, wieso sie so genannt wird!). Beachte, dass in $E_{n,j}$ nur die Kombination $Z\alpha$ auftritt. Da

$$Z\alpha \sim \frac{1}{c} \quad (3.350)$$

ist, entsprechen kleine $Z\alpha$ dem nichtrelativistischen Grenzfall. Entwicklung von $E_{n,j}$ in $Z\alpha$ ergibt

$$E_{n,j} \cong m_e c^2 - \underbrace{\frac{m_e Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}}_{\text{nichtrelativistischer Limes}} - \underbrace{\frac{m_e c^2}{2} Z^4 \alpha^4 \left(\frac{1}{(j + 1/2) n^3} - \frac{3}{4n^4} \right)}_{\text{führende relativistische Korrekturen}}. \quad (3.351)$$

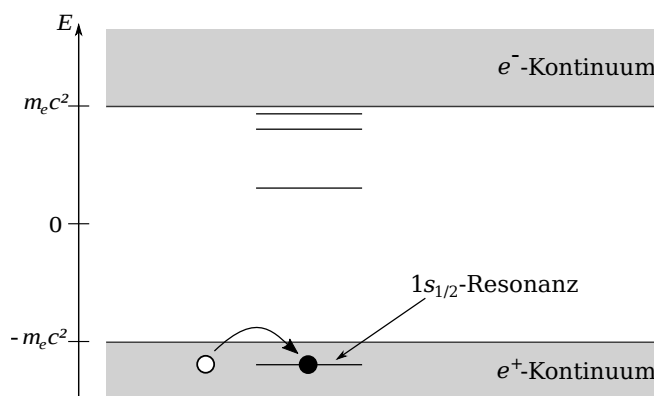
Die Feinstrukturaufspaltung ist offenbar am größten, wenn n und j möglichst klein sind. Für $n = 1$ gibt es aber keine Aufspaltung, da l dann auf den Wert Null und j daher auf den Wert $j = 1/2$ beschränkt ist. Die größte Aufspaltung tritt also zwischen $(2s_{1/2}, 2p_{1/2})$ einerseits und $2p_{3/2}$ andererseits auf. Im Wasserstoffatom beträgt diese Aufspaltung ungefähr $0,1 \text{ meV}$. Dies entspricht einer Temperatur von $T \approx 1 \text{ K}$ und ist somit für die makroskopischen Eigenschaften von Wasserstoff unerheblich. Die Aufspaltung ist spektroskopisch aber leicht nachweisbar. $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ sind in der Dirac-Theorie noch entartet (gleiches n und j). Diese Entartung wird durch die Wechselwirkung mit dem dynamischen elektromagnetischen Feld aufgehoben (*Lamb-Shift*, wird im Rahmen der QED berechnet) und auch durch die Hyperfeinwechselwirkung mit dem Kern aufgrund der unterschiedlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kernort für die $2s$ - und $2p$ -Orbitale.

Die Aufspaltung wächst offenbar mit der Kernladungszahl stark an, nämlich in führender Ordnung wie Z^4 . Dies kann man so deuten, dass die typische Geschwindigkeit der Elektronen in inneren Schalen in dem tiefen Potentialtopf für große Z sehr groß wird. (Der Virialsatz zeigt, dass in der klassischen Mechanik die kinetische

und die potentielle Energie von gebundenen Systemen betragsmäßig von derselben Größenordnung sind.) Daher werden relativistische Effekte wichtiger. Noch eine Bemerkung zum exakten Ausdruck (3.347): Das Ergebnis kann nicht stimmen, wenn $Z\alpha > 1$ wird, da dann für den kleinsten Wert von j , nämlich $\frac{1}{2}$, der Radikand

$$\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2 = 1 - Z^2\alpha^2 < 0 \quad (3.352)$$

wäre. $E_{n,1/2}$ würde dann komplex, was für den Eigenwert eines hermiteschen Operators nicht stimmen kann. In der hier nicht gezeigten Herleitung wird aber $Z\alpha < 1$ angenommen. Für $Z\alpha > 1$, also $Z > 137$, kann man das Problem auch lösen, nur braucht man weitere Überlegungen. Physikalisch passiert für $Z > 137$ Folgendes: Der am stärksten gebundene $1s_{1/2}$ -Zustand hat eine Bindungsenergie, die größer als $2m_e c^2$ ist. Der Zustand ist somit resonant mit dem Kontinuum von Zuständen negativer Energie („Positronen“). Ein unbesetzter $1s_{1/2}$ -Zustand würde sich daher sofort mit einem Elektron aus dem Kontinuum füllen, wobei im Kontinuum ein Loch (Positron) zurückbleibt. Mit anderen Worten, die Bindungsenergie ist größer als $2m_e c^2$, daher wird spontan ein Elektron-Positron-Paar erzeugt und das Elektron gebunden. Das Positron ist frei.

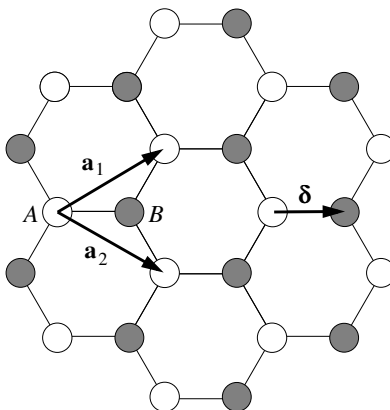


Bisher wurden keine Kerne mit Ladungszahlen $Z > 137$ hergestellt. Derselbe physikalische Effekt tritt jedoch auch in Halbleitern auf, wenn die Bindungsenergie eines Donators größer ist als die Bandlücke.

3.5 Graphen

Als Beispiel dafür, dass Dirac-Teilchen im vielleicht unerwarteten Kontext der Festkörperphysik auftreten können, betrachten wir hier die elektronische Struktur von *Graphen*. Es stellt sich heraus, dass die Elektronen in Graphen bei niedrigen Anregungsenergien, d. h. nah an der Fermi-Energie, wie masselose relativistische Teilchen verhalten.

Graphen besteht aus einer Lage von Kohlenstoffatomen, die ein Honigwabengitter bilden. In Graphit sind solche Schichten aufeinander gestapelt. Dieses ist ein Dreiecksgitter mit einer zweiatomigen Basis.



Die C-Atome bilden σ -Bindungen zwischen sp^2 -Hybridorbitalen aus. Die bindenden Molekülorbitale sind alle besetzt, die antibindenden unbesetzt. Diese Orbitale spielen keine Rolle für die elektronischen Eigenschaften bei niedrigen Energien (nahe der Fermi-Energie). Drei der vier Valenzelektronen des Kohlenstoffs besetzen diese Molekülorbitale. Jedes C-Atom hat noch ein p_z -Orbital, das senkrecht zur Graphen-Ebene steht, mit im Mittel einem Elektron. Diese p_z -Orbitale hybridisieren miteinander in Form von π -Bindungen und bilden ein halb besetztes Energieband.

Eine vernünftige Näherung berücksichtigt nur das Hüpfen von Elektronen zwischen nächsten Nachbarn. Wir schreiben den Hamiltonian für diese Elektronen in zweiter Quantisierung:

$$H = -t \sum_{\mathbf{R}\sigma} (c_{A\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{R}\sigma} + c_{A\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{B,\mathbf{R}-\mathbf{a}_2,\sigma} + c_{A\mathbf{R}\sigma}^\dagger c_{B,\mathbf{R}-\mathbf{a}_1,\sigma}) + \text{H.c.}, \quad (3.353)$$

wobei sich A und B auf die beiden Basisatome beziehen und „H.c.“ für *Hermitian conjugate* steht.

Um die Eigenenergien aus Gl. (3.353) zu erhalten, führen wir eine Fourier-Transformation durch,

$$c_{A\mathbf{R}\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} c_{A\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.354)$$

$$c_{B\mathbf{R}\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta})} c_{B\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.355)$$

wobei $N \rightarrow \infty$ die Zahl der C-Atome und $N/2$ somit die Zahl der Einheitszellen ist. $\boldsymbol{\delta}$ ist der Vektor vom Atom A zum Atom B in derselben Einheitszelle, siehe Skizze. Wir erhalten

$$\begin{aligned} H &= -t \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} \sum_{\mathbf{R}} \left[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left(e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta})} + e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_1)} \right) c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}'\sigma} \right. \\ &\quad \left. + \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta})} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_1)} \right) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}} c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}'\sigma} \right] \\ &= -t \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\left(e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_2)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_1)} \right) c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} \right. \\ &\quad \left. + \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_2)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{\delta}-\mathbf{a}_1)} \right) c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} \right] \\ &= -t \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\left(e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3} \right) c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{B\mathbf{k}\sigma} + \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3} \right) c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{A\mathbf{k}\sigma} \right] \end{aligned} \quad (3.356)$$

mit den Nächste-Nachbar-Vektoren

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \boldsymbol{\delta}, \quad (3.357)$$

$$\boldsymbol{\delta}_2 = \boldsymbol{\delta} - \mathbf{a}_2, \quad (3.358)$$

$$\boldsymbol{\delta}_3 = \boldsymbol{\delta} - \mathbf{a}_1. \quad (3.359)$$

Den Hamiltonian kann man kompakt schreiben als

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (c_{A\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{B\mathbf{k}\sigma}^\dagger) \hat{H}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}\sigma} \\ c_{B\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} \quad (3.360)$$

mit

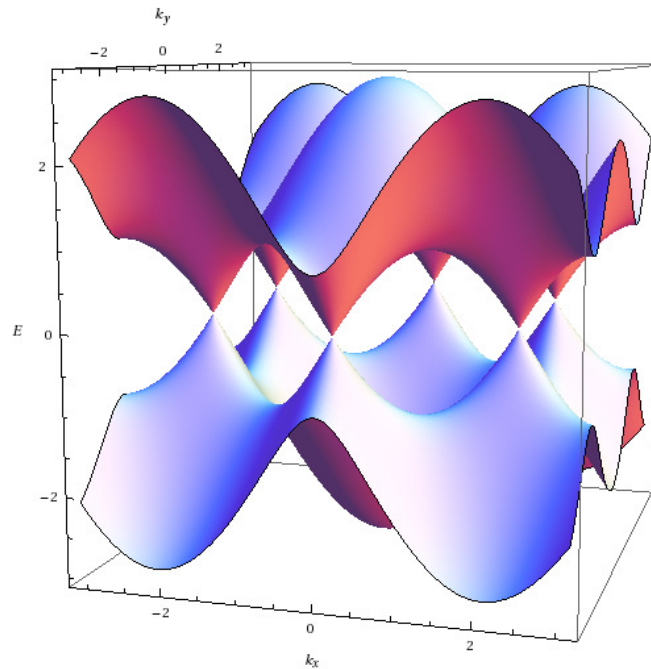
$$\hat{H}(\mathbf{k}) = -t \begin{pmatrix} 0 & e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3} \\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.361)$$

Nun können wir die Eigenwerte leicht bestimmen:

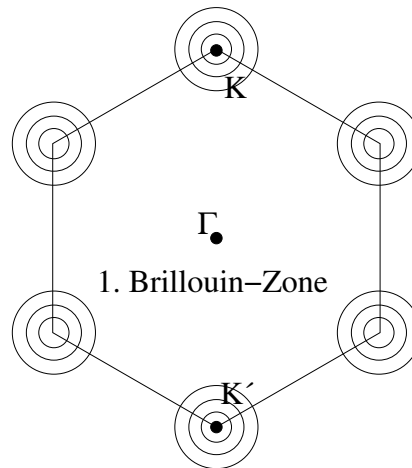
$$\begin{aligned} E &= \pm t \sqrt{(e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3})(e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3})} \\ &= \pm t \sqrt{3 + 2 \cos \mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_1) + 2 \cos \mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_2) + 2 \cos \mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_3)} \end{aligned}$$

$$= \pm t \sqrt{3 + 4 \cos \frac{3k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2} + 2 \cos \sqrt{3}k_y}. \quad (3.362)$$

Die beiden Bänder sind hier skizziert:



Wir finden Bandberührungen in Form von Doppelkegeln („Dirac-Kegeln“). Diese Dispersion erinnert bereits an *masselose Dirac-Teilchen*. Die Brillouin-Zone ist ein Sechseck mit diesen Dirac-Punkten an den Ecken, also erhalten wir *zwei* inäquivalente Dirac-Kegel pro Brillouin-Zone. Wir können z. B. die Kegel an den Punkten K und K' wählen.



Linearisiert man die Dispersion in der Nähe der Dirac-Punkte $\nu = 1, 2$, so kann man mit

$$\mathbf{q} := \mathbf{k} - \begin{cases} \mathbf{k}_K & \text{für } \nu = 1, \\ \mathbf{k}_{K'} & \text{für } \nu = 2 \end{cases} \quad (3.363)$$

und

$$E_{\mathbf{q}} := \frac{3t}{2} q \quad (3.364)$$

den Hamiltonian näherungsweise schreiben als

$$H = \sum_{\nu, \mathbf{q}, \sigma} E_{\mathbf{q}} \left(c_{\nu+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\nu+\mathbf{q}\sigma} - c_{\nu-\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\nu-\mathbf{q}\sigma} \right). \quad (3.365)$$

Das hochgestellte \pm im Subskript bezeichnet das Band positiver/negativer Energie.

Die Dispersion der Elektronen in Graphen bei niedrigen Energien ist also linear, ähnlich der von Dirac-Fermionen im Limes $m = 0$. Handelt es sich nur um eine oberflächliche Analogie oder gilt sie tiefer, auf der Ebene der Hamiltonians? Um zu zeigen, dass letzteres der Fall ist, drehen wir die soeben ausgeführte Diagonalisierung zurück und schreiben

$$H = \sum_{\mathbf{q}, \sigma} (c_{1A\mathbf{q}\sigma}^\dagger, c_{2A\mathbf{q}\sigma}^\dagger, c_{2B\mathbf{q}\sigma}^\dagger, c_{1B\mathbf{q}\sigma}^\dagger) \hat{H}(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} c_{1A\mathbf{q}\sigma} \\ c_{2A\mathbf{q}\sigma} \\ c_{2B\mathbf{q}\sigma} \\ c_{1B\mathbf{q}\sigma} \end{pmatrix} \quad (3.366)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{q}) &= -t \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ 0 & & & 0 \\ 0 & & e^{-i(\mathbf{k}_{K'}+\mathbf{q})\cdot\delta_1} + e^{-i(\mathbf{k}_{K'}+\mathbf{q})\cdot\delta_2} + e^{-i(\mathbf{k}_{K'}+\mathbf{q})\cdot\delta_3} & \\ e^{-i(\mathbf{k}_K+\mathbf{q})\cdot\delta_1} + e^{-i(\mathbf{k}_K+\mathbf{q})\cdot\delta_2} + e^{-i(\mathbf{k}_K+\mathbf{q})\cdot\delta_3} & & & 0 \\ & 0 & e^{i(\mathbf{k}_K+\mathbf{q})\cdot\delta_1} + e^{i(\mathbf{k}_K+\mathbf{q})\cdot\delta_2} + e^{i(\mathbf{k}_K+\mathbf{q})\cdot\delta_3} & \\ e^{i(\mathbf{k}_{K'}+\mathbf{q})\cdot\delta_1} + e^{i(\mathbf{k}_{K'}+\mathbf{q})\cdot\delta_2} + e^{i(\mathbf{k}_{K'}+\mathbf{q})\cdot\delta_3} & & & 0 \\ 0 & & & 0 \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix} \\ &\cong -t \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{3i}{2}q_x - \frac{3}{2}q_y \\ 0 & 0 & \frac{3i}{2}q_x + \frac{3}{2}q_y & 0 \\ 0 & -\frac{3i}{2}q_x + \frac{3}{2}q_y & 0 & 0 \\ -\frac{3i}{2}q_x - \frac{3}{2}q_y & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{3i}{2}t \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & q_x + iq_y \\ 0 & 0 & q_x - iq_y & 0 \\ 0 & -q_x - iq_y & 0 & 0 \\ -q_x + iq_y & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{3i}{2}t \begin{pmatrix} 0 & q_x\sigma_1 - q_y\sigma_2 \\ -q_x\sigma_1 + q_y\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{3}{2}t \left[\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} q_x + \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} q_y \right]. \quad (3.367) \end{aligned}$$

Also lautet der effektive (linearisierte) Hamiltonian für festen Spin in erster Quantisierung

$$\tilde{H}_\sigma = \frac{3}{2} \frac{t}{\hbar} \left[\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} p_x + \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} p_y \right]. \quad (3.368)$$

Beachte, dass die beiden hier auftretenden Matrizen hermitesch sind und außerdem die folgenden Eigenschaften haben:

$$\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad (3.369)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.370)$$

Also handelt es sich um eine Darstellung der Dirac-Matrizen α_1 und α_2 . Damit können wir schreiben

$$\tilde{H}_\sigma = \frac{3}{2} \frac{t}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \quad (3.371)$$

mit

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}. \quad (3.372)$$

Abgesehen davon, dass wir es mit einem zweidimensionalen System zu tun haben, ist dieser Hamiltonian identisch mit dem Dirac-Hamiltonian für

$$c = \frac{3}{2} \frac{t}{\hbar} = v_F \quad \text{und} \quad m = 0, \quad (3.373)$$

also für ein masseloses Teilchen mit der (Fermi-) Geschwindigkeit $v_F = 3t/2\hbar$, die für Graphen deutlich kleiner als die Lichtgeschwindigkeit ist. Beachte, dass hier der Index $\nu = 1, 2$, der zwischen Dirac-Punkten K, K' unterscheidet, an die Stelle des Spins tritt („Pseudo-Spin“). Der *reale* Spin σ trat in der gesamten Herleitung nur als Zuschauer auf. Durch die beiden Einstellmöglichkeiten $\sigma = \uparrow, \downarrow$ verdoppelt sich die Zahl der Zustände noch einmal.

Die interessanten elektronischen Eigenschaften von Graphen beruhen überwiegend auf dem oben hergeleiteten Ergebnis, dass sich die Elektronen wie masselose relativistische Fermionen in zwei Raumdimensionen verhalten. So ist ihre Geschwindigkeit bei niedrigen Energien konstant gleich v_F , unabhängig vom Impuls. Es liegt daher nahe, dass die Transporteigenschaften, die ja auf offensichtlich auf der Bewegung der Elektronen beruhen, ungewöhnlich sein werden. Dies wird z. Zt. intensiv im Hinblick auf Anwendungen in der Elektronik untersucht.

3.6 Relativistische Quantenmechanik für größere Spins

In diesem Abschnitt wollen wir kurz die relativistische Quantenmechanik für Teilchen mit größeren Spins ansprechen, konkret für die Spins $S = 1$ und $3/2$. Dies ist ein schwieriges und noch nicht abgeschlossenes Feld. Der Abschnitt ist als Ergänzung für an Elementarteilchen- und Feldtheorie sowie an der „metaphysikalischen“ Frage der Theorieentwicklung Interessierte gedacht.

Sinnvoll ist sicherlich zunächst eine Unterscheidung zwischen Bosonen und Fermionen. Für Bosonen beschränken wir uns hier auf massive Teilchen; die Quantentheorie des elektromagnetischen Eichfeldes, die auf masselose Photonen führt, wird in Kapitel 5 diskutiert. Im Folgenden liegt das Augenmerk nicht nur auf der konkreten Beschreibung, sondern auch auf der „metaphysikalischen“ Frage der Konstruktion plausibler Theorien – welche Ideen können uns bei der Theorieentwicklung leiten?

3.6.1 Spin-1-Bosonen und die Proca-Gleichung

Wir beginnen mit der Diskussion von Spin-1- (Vektor-) Bosonen, motiviert durch die W^\pm - und Z^0 -Bosonen und die Spin-1-Mesonen ρ, ω usw. Es ist naheliegend, von der Klein-Gordon-Gleichung auszugehen und der Wellenfunktion einen zusätzlichen Spin-Freiheitsgrad zu geben. Wir erwarten, dass dieser $2S + 1 = 3$ Werte annehmen kann. Demnach sollte die Wellenfunktion ein dreikomponentiger Vektor sein. Aber die Theorie soll natürlich kovariant formuliert werden, daher muss insbesondere die Wellenfunktion eine kovariante Größe sein. Die einfachste Möglichkeit, einen dreikomponentigen Vektor unterzubringen, verwendet einen Vierervektor (B^μ). Also *postulieren* wir, im Sinne einer möglichst einfachen Verallgemeinerung der Klein-Gordon-Gleichung,

$$\left(\partial^\nu \partial_\nu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) B^\mu = 0. \quad (3.374)$$

Aber (B^μ) enthält hier noch vier unabhängige Komponenten statt drei. Wir benötigen eine kovariante, skalare Nebenbedingung, die die Zahl der unabhängigen Komponenten auf drei reduziert. Wie könnte diese lauten? Wir haben nur die drei Vektoren (x^μ), (∂^μ) und (B^μ) zur Verfügung, wobei der letztere komplex ist. (x^μ) sollte nicht auftauchen, denn sonst würde die Bedingung vom Raumzeitpunkt abhängen. Es bleiben zwei einfache Möglichkeiten:

- $B_\mu^* B^\mu = \text{const}$ oder auch $B_\mu B^\mu = \text{const}$: Dies würde die Theorie nichtlinear machen. Eine so fundamentale Änderung der Struktur der Theorie beim Übergang von Spin 0 zu Spin 1 scheint implausibel.

- $\partial_\mu B^\mu = \text{const}$: Dies ist eine lineare Bedingung, die Theorie bleibt daher linear. Wir zeigen zunächst, dass die Konstante Null sein muss. Sei nämlich $\partial_\mu B^\mu = \Phi = \text{const}$. Dann folgt aus der verallgemeinerten Klein-Gordon-Gleichung (3.374), dass gilt

$$\partial_\mu \left(\partial^\nu \partial_\nu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) B^\mu = 0 \quad (3.375)$$

$$\Rightarrow \partial^\mu \partial_\mu \partial_\mu B^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \partial_\mu B^\mu = 0 \quad (3.376)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\partial^\nu \partial_\nu \Phi}_{=0} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Phi = 0 \quad (3.377)$$

$$\Rightarrow \Phi = 0. \quad (3.378)$$

Die resultierende Bedingung

$$\partial_\mu B^\mu = 0 \quad (3.379)$$

ist von derselben Form wie die Lorenz-Eichung für das Vektorpotential (A^μ). Wie dort beseitigt sie einen unphysikalischen Freiheitsgrad in einer kovarianten Art und Weise. Hier ist es aber keine frei wählbare Eichung.

Wir müssen noch prüfen, ob die Lorenz-Bedingung (3.379) mit der Klein-Gordon-Gleichung vereinbar ist: Wenn die Klein-Gordon-Gleichung für drei der vier Komponenten von (B^μ) gilt und $\partial_\mu B^\mu = 0$ ist, dann muss die vierte Komponente so bestimmt werden können, dass sie ebenfalls die Klein-Gordon-Gleichung erfüllt. Wir zeigen nun, dass dies möglich ist. Es gelte also, mit $(B^\mu) = (B^0, \mathbf{B})$,

$$\left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \mathbf{B} = 0 \quad (\text{räumliche Komponenten}) \quad (3.380)$$

und $\partial_\mu B^\mu = 0$ (alle Komponenten). Behauptung:

$$B^0 = -c \int dt \nabla \cdot \mathbf{B} \quad (3.381)$$

erfüllt die Klein-Gordon-Gleichung und die Lorenz-Bedingung. Der Ansatz enthält die Stammfunktion von $\nabla \cdot \mathbf{B}$.

Beweis: 1. Wir finden

$$\partial_\mu B^\mu = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} B^0 + \nabla \cdot \mathbf{B} = -\nabla \cdot \mathbf{B} + \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (3.382)$$

2. Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \left(\partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) B^0 &= -c \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \int dt \nabla \cdot \mathbf{B} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{B} + \nabla \cdot c \int dt \underbrace{\left(\nabla^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \mathbf{B}}_{= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{B}} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{B} + \nabla \cdot \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} = 0. \end{aligned} \quad (3.383)$$

□

Wir können die Gleichung für (B^μ) noch etwas anders schreiben: Addition von $-\partial^\nu \partial_\mu B^\mu = 0$ zur Klein-Gordon-Gleichung ergibt (mit μ, ν vertauscht)

$$\partial_\mu (\partial^\mu B^\nu - \partial^\nu B^\mu) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} B^\nu = 0. \quad (3.384)$$

Dies ist die sogenannten *Proca-Gleichung*, die also aus der Klein-Gordon-Gleichung für die Komponenten B^μ in Konjunktion mit der Lorenz-Bedingung $\partial_\mu B^\mu = 0$ folgt. Man kann leicht zeigen, dass der Umkehrschluss ebenfalls gilt: 1. Aus der Proca-Gleichung folgt

$$\partial_\nu \partial_\mu (\partial^\mu B^\nu - \partial^\nu B^\mu) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \partial_\nu B^\nu = 0. \quad (3.385)$$

Nun ist im ersten Term $\partial_\nu \partial_\mu$ symmetrisch in μ, ν , während $\partial^\mu B^\nu - \partial^\nu B^\mu$ antisymmetrisch ist. Damit verschwindet der Term aufgrund der implizierten Summe über μ, ν . Es folgt die Lorenz-Bedingung $\partial_\nu B^\nu = 0$. 2. Einsetzen dieser Lorenz-Bedingung in die Proca-Gleichung ergibt sofort die Klein-Gordon-Gleichung für B^ν .

Die Proca-Gleichung hat große Ähnlichkeit mit den inhomogenen Maxwell-Gleichungen: Mit der Definition des „Feldstärketensors“

$$F_B^{\mu\nu} := \partial^\mu B^\nu - \partial^\nu B^\mu \quad (3.386)$$

folgt nämlich

$$\partial_\mu F_B^{\mu\nu} = -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} B^\nu. \quad (3.387)$$

Die inhomogenen Maxwell-Gleichungen lauten, zum Vergleich, $\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu$. Die Proca-Gleichung beschreibt also in gewissem Sinne ein Feld, das seine eigene Quelle ist. Es sei angemerkt, dass die Proca-Theorie die konzeptionellen Probleme der Klein-Gordon-Theorie erbt. Diese werden in der Vielteilchen- bzw. Quantenfeldtheorie überwunden.

Abschließend wäre es noch wünschenswert, explizit zu zeigen, dass die beschriebenen Teilchen den Drehimpuls $S = 1$ tragen. Die entsprechenden Argumente für die Dirac-Theorie können wir aber nicht direkt übertragen, da kein Hamiltonian existiert (Gleichung zweiter Ordnung!). Um dennoch den Spin-Gehalt der Theorie zu verstehen, betrachten wir ebene Wellen, die ja spezielle Lösungen der Klein-Gordon- und Proca-Gleichungen sind:

$$B_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}^\mu = b_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}^\mu e^{-ik^\mu x_\mu}, \quad (3.388)$$

wobei $\epsilon = \pm$ das Vorzeichen der Energie ist und σ evtl. mehrere Lösungen für denselben Wellenvektor \mathbf{k} abzählt. Dies ist nur eine Lösung, wenn gilt

$$k^0 c = \epsilon \omega_{\mathbf{k}} := \epsilon \sqrt{k^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}} \quad (3.389)$$

und

$$\partial_\mu B_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}^\mu = -ik_\mu b_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}^\mu e^{-ik^\mu x_\mu} = 0 \quad (3.390)$$

$$\Rightarrow k_\mu b_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}^\mu = 0. \quad (3.391)$$

Wir suchen orthogonale Lösungen und wählen eine bestimmte Normierung:

$$B_{\epsilon\mathbf{k}\sigma,\mu}^* B_{\epsilon\mathbf{k}\sigma'}^\mu = b_{\epsilon\mathbf{k}\sigma,\mu}^* b_{\epsilon\mathbf{k}\sigma'}^\mu \stackrel{!}{=} -\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (3.392)$$

Das Minuszeichen sorgt dafür, dass das Betragsquadrat eines rein räumlichen Vektors positiv ist. Wir wählen die *Polarisationsvektoren* ($b_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}^\mu$) reell. Da sie orthogonal zueinander und zu (k^μ) sein sollen, existieren nur drei unabhängige Vektoren. Wir wählen zwei davon *transversal*:

$$(b_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}^\mu) = (0, \hat{\mathbf{e}}_{\epsilon\mathbf{k}\sigma}), \quad \sigma = 1, 2, \quad (3.393)$$

wobei $\hat{\mathbf{e}}_{\epsilon\mathbf{k}1} \perp \hat{\mathbf{e}}_{\epsilon\mathbf{k}2}$ orthogonale (Dreier-) Einheitsvektoren sind und $\hat{\mathbf{e}}_{\epsilon\mathbf{k}1}, \hat{\mathbf{e}}_{\epsilon\mathbf{k}2} \perp \mathbf{k}$ gilt. Dies ist soweit analog zu elektromagnetischen Wellen. Nun haben wir aber zusätzlich eine *longitudinale* Mode:

$$(b_{\epsilon\mathbf{k}3}^\mu) = \left(\frac{\hbar k}{mc}, \frac{\epsilon \hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \hat{\mathbf{k}} \right) \quad \text{mit } \hat{\mathbf{k}} := \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \equiv \frac{\mathbf{k}}{k}. \quad (3.394)$$

Dieser Vierervektor erfüllt

$$k_\mu b_{\epsilon\mathbf{k}3}^\mu = \frac{\epsilon \omega_{\mathbf{k}}}{c} \frac{\hbar k}{mc} - \mathbf{k} \cdot \frac{\epsilon \hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \hat{\mathbf{k}} = \frac{\epsilon \hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} k - \frac{\epsilon \hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} k = 0, \quad (3.395)$$

$$b_{\epsilon\mathbf{k}3,\mu}b_{\epsilon\mathbf{k}3}^\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{m^2 c^2} - \frac{\hbar^2 \omega_{\mathbf{k}}^2}{m^2 c^4} = \frac{\hbar^2}{m^2 c^4} \left(k^2 c^2 - k^2 c^2 - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \right) = -1. \quad (3.396)$$

Wir fordern noch, dass die räumlichen Komponenten $\hat{\mathbf{e}}_{\epsilon\mathbf{k}1}$, $\hat{\mathbf{e}}_{\epsilon\mathbf{k}2}$ und $(\epsilon\hbar\omega_{\mathbf{k}}/mc^2)\hat{\mathbf{k}}$ ein Rechtssystem bilden.

Wie in der Elektrodynamik konstruieren wir aus den beiden transversalen, linear polarisierten Moden zwei *zirkular* polarisierte Moden:

$$b_{\epsilon\mathbf{k}\pm}^\mu := \frac{b_{\epsilon\mathbf{k}1}^\mu \pm ib_{\epsilon\mathbf{k}2}^\mu}{\sqrt{2}} \quad (3.397)$$

und setzen

$$b_{\epsilon\mathbf{k}0}^\mu := b_{\epsilon\mathbf{k}3}^\mu. \quad (3.398)$$

Wir unterdrücken jetzt die Indizes ϵ , \mathbf{k} . Die zirkularen Polarisationsvektoren erfüllen die Orthonormalitätsrelationen

$$b_{0,\mu}^* b_0^\mu = b_{3,\mu} b_3^\mu = -1, \quad (3.399)$$

$$b_{\pm,\mu}^* b_\pm^\mu = \frac{1}{2} (b_{1,\mu} \mp ib_{2,\mu})(b_1^\mu \pm ib_2^\mu) = -\frac{1}{2} (\hat{\mathbf{e}}_1 \mp i\hat{\mathbf{e}}_2) \cdot (\hat{\mathbf{e}}_1 \pm i\hat{\mathbf{e}}_2) = -1, \quad (3.400)$$

$$b_{\pm,\mu}^* b_\mp^\mu = \frac{1}{2} (b_{1,\mu} \mp ib_{2,\mu})(b_1^\mu \mp ib_2^\mu) = -\frac{1}{2} (\hat{\mathbf{e}}_1 \mp i\hat{\mathbf{e}}_2) \cdot (\hat{\mathbf{e}}_1 \mp i\hat{\mathbf{e}}_2) = 0 \quad (3.401)$$

und analog $b_{\mp,\mu}^* b_\pm^\mu = 0$. Die übrigen gemischten Skalarprodukte sind offensichtlich gleich Null. Nun definieren wir die Vierertensoren $(S_{z,\nu}^\mu)$ und $(S_{\pm,\nu}^\mu)$ mit den Komponenten

$$S_{z,\nu}^\mu := -\hbar (b_+^\mu b_{+,\nu}^* - b_-^\mu b_{-,\nu}^*), \quad (3.402)$$

$$S_{\pm,\nu}^\mu := -\sqrt{2}\hbar (b_\pm^\mu b_{0,\nu}^* + b_0^\mu b_{\mp,\nu}^*) \quad (3.403)$$

und untersuchen deren Wirkung auf die Polarisationsvektoren. Mit Hilfe der Orthonormalitätsrelationen finden wir

$$S_{z,\nu}^\mu b_\pm^\nu = -\hbar (b_+^\mu b_{+,\nu}^* b_\pm^\nu - b_-^\mu b_{-,\nu}^* b_\pm^\nu) = \begin{cases} \hbar b_\pm^\mu \\ -\hbar b_\mp^\mu \end{cases} = \pm \hbar b_\pm^\mu, \quad (3.404)$$

$$S_{z,\nu}^\mu b_0^\nu = -\hbar (b_+^\mu b_{+,\nu}^* b_0^\nu - b_-^\mu b_{-,\nu}^* b_0^\nu) = 0. \quad (3.405)$$

Die Polarisationsvektoren sind also *Eigenvektoren* von $(S_{z,\nu}^\mu)$ zu den Eigenwerten $\pm\hbar$ und 0. Weiter gilt

$$S_{\pm,\nu}^\mu b_\pm^\nu = -\sqrt{2}\hbar (b_\pm^\mu b_{0,\nu}^* b_\pm^\nu + b_0^\mu b_{\mp,\nu}^* b_\pm^\nu) = 0, \quad (3.406)$$

$$S_{\pm,\nu}^\mu b_\mp^\nu = -\sqrt{2}\hbar (b_\pm^\mu b_{0,\nu}^* b_\mp^\nu + b_0^\mu \underbrace{b_{\mp,\nu}^* b_\mp^\nu}_{=-1}) = \sqrt{2}\hbar b_0^\mu, \quad (3.407)$$

$$S_{\pm,\nu}^\mu b_0^\nu = -\sqrt{2}\hbar (b_\pm^\mu \underbrace{b_{0,\nu}^* b_0^\nu}_{=-1} + b_0^\mu b_{\mp,\nu}^* b_0^\nu) = \sqrt{2}\hbar b_\pm^\mu. \quad (3.408)$$

Schließlich betrachten wir noch die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} S_{z,\rho}^\mu S_{\pm,\nu}^\rho - S_{\pm,\rho}^\mu S_{z,\nu}^\rho &= \sqrt{2}\hbar^2 [(b_+^\mu b_{+,\rho}^* - b_-^\mu b_{-,\rho}^*)(b_\pm^\rho b_{0,\nu}^* + b_0^\rho b_{\mp,\nu}^*) - (b_\pm^\mu b_{0,\rho}^* + b_0^\mu b_{\mp,\rho}^*)(b_+^\rho b_{+,\nu}^* - b_-^\rho b_{-,\nu}^*)] \\ &= \sqrt{2}\hbar^2 [\mp b_\pm^\mu b_{0,\nu}^* \mp b_0^\mu b_{\mp,\nu}^*] = \pm \hbar S_{\pm,\nu}^\mu, \end{aligned} \quad (3.409)$$

$$\begin{aligned} S_{+,\rho}^\mu S_{-,\nu}^\rho - S_{-,\rho}^\mu S_{+,\nu}^\rho &= 2\hbar^2 [(b_+^\mu b_{0,\rho}^* + b_0^\mu b_{-,\rho}^*)(b_-^\rho b_{0,\nu}^* + b_0^\rho b_{+,\nu}^*) - (b_-^\mu b_{0,\rho}^* + b_0^\mu b_{+,\rho}^*)(b_+^\rho b_{0,\nu}^* - b_0^\rho b_{-,\nu}^*)] \\ &= 2\hbar^2 [-b_+^\mu b_{+,\nu}^* - \cancel{b_0^\mu b_{0,\nu}^*} + b_-^\mu b_{-,\nu}^* + \cancel{b_0^\mu b_{0,\nu}^*}] = 2\hbar S_{z,\nu}^\mu. \end{aligned} \quad (3.410)$$

Die Tensoren erfüllen also die Kommutatorrelationen für Drehimpulse. Im Rahmen dieser Deutung sind die Polarisationsvektoren $(b_{\epsilon\mathbf{k}\pm}^\mu)$ und $(b_{\epsilon\mathbf{k}0}^\mu)$ Eigenvektoren und entsprechend die ebenen Wellen $(B_{\epsilon\mathbf{k}\pm}^\mu)$ und $(B_{\epsilon\mathbf{k}0}^\mu)$ Eigenfunktionen zu den Eigenwerten $\pm\hbar$ und 0 der Drehimpulskomponente in Richtung $\hat{\epsilon\mathbf{k}}$. Wir deuten

$$(\mathbf{S}^\mu)_\nu := \left(\frac{S_{+,\nu}^\mu + S_{-,\nu}^\mu}{2}, \frac{S_{+,\nu}^\mu - S_{-,\nu}^\mu}{2i}, S_{z,\nu}^\mu \right) \quad (3.411)$$

als *Spin* (-Operator) des Teilchens bzgl. der Quantisierungsachse $\hat{\epsilon}\mathbf{k}$. Da es drei Einstellmöglichkeiten gilt, ist die Länge des Spins dann offensichtlich $S = 1$. Man kann auch prüfen, dass der quadrierte Spin-Operator $S(S+1)\hbar^2 \mathbf{1} = 2\hbar^2 \mathbf{1}$ ist (s. u.). Der Spin ist für freie Teilchen per Konstruktion erhalten. Daraus folgt aber noch nicht, dass (\mathbf{S}^μ_ν) wirklich einen Eigendrehimpuls repräsentiert. Dazu müssten wir zeigen, dass unter Wechselwirkungen und Teilchenerzeugung und -vernichtung der Gesamtdrehimpuls einschließlich der Spins (\mathbf{S}^μ_ν) aller beteiligten Vektor-Bosonen erhalten ist. Dies erfordert sicherlich Zweite Quantisierung.

Mehr Intuition für den Spin von Vektor-Bosonen können wir durch die Betrachtung einer speziellen Lösung erhalten. Konkret für eine ebene Welle positiver Energie ($\epsilon = +$) in z -Richtung haben wir $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{z}}$ und wählen $\hat{\mathbf{e}}_{+\mathbf{k}1} = \hat{\mathbf{x}}$ und $\hat{\mathbf{e}}_{+\mathbf{k}2} = \hat{\mathbf{y}}$. Dann folgt für die linear polarisierten Moden

$$(b^\mu_{+\mathbf{k}1}) = (0, \hat{\mathbf{x}}) = (0, 1, 0, 0), \quad (3.412)$$

$$(b^\mu_{+\mathbf{k}2}) = (0, \hat{\mathbf{y}}) = (0, 0, 1, 0), \quad (3.413)$$

$$(b^\mu_{+\mathbf{k}3}) = \left(\frac{\hbar k}{mc}, \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \hat{\mathbf{z}} \right) = \left(\frac{\hbar k}{mc}, 0, 0, \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \right) \quad (3.414)$$

bzw. für die zirkular polarisierten Moden

$$(b^\mu_{+\mathbf{k}\pm}) = \left(0, \frac{\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}}}{\sqrt{2}} \right) = \left(0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{i}{\sqrt{2}}, 0 \right), \quad (3.415)$$

$$(b^\mu_{+\mathbf{k}0}) = \left(\frac{\hbar k}{mc}, \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \hat{\mathbf{z}} \right) = \left(\frac{\hbar k}{mc}, 0, 0, \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \right). \quad (3.416)$$

Die Spin-Operatoren lauten dann explizit

$$\begin{aligned} (S^\mu_{z,\nu}) &= (-\hbar(b^\mu_{+\mathbf{k}+}b^*_{+\mathbf{k}+\nu} - b^\mu_{+\mathbf{k}-}b^*_{+\mathbf{k}-})) \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i & 0 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.417)$$

$$\begin{aligned} (S^\mu_{\pm,\nu}) &= (-\sqrt{2}\hbar(b^\mu_{+\mathbf{k}\pm}b^*_{+\mathbf{k}0,\nu} + b^\mu_{+\mathbf{k}0}b^*_{+\mathbf{k}\mp,\nu})) \\ &= -\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\hbar k}{mc} & 0 & 0 & -\frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \\ \pm i \frac{\hbar k}{mc} & 0 & 0 & \mp i \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar k}{mc} & \pm i \frac{\hbar k}{mc} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} & \pm i \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{mc} \begin{pmatrix} 0 & k & \pm ik & 0 \\ -k & 0 & 0 & \omega_{\mathbf{k}}/c \\ \mp ik & 0 & 0 & \pm i\omega_{\mathbf{k}}/c \\ 0 & \omega_{\mathbf{k}}/c & \pm i\omega_{\mathbf{k}}/c & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.418)$$

$$(S^\mu_{x,\nu}) = \frac{\hbar^2}{mc} \begin{pmatrix} 0 & k & 0 & 0 \\ -k & 0 & 0 & \omega_{\mathbf{k}}/c \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{\mathbf{k}}/c & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.419)$$

$$(S^\mu_{y,\nu}) = \frac{\hbar^2}{mc} \begin{pmatrix} 0 & 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -k & 0 & 0 & \omega_{\mathbf{k}}/c \\ 0 & 0 & \omega_{\mathbf{k}}/c & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.420)$$

Man kann nachrechnen, dass die Kommutatorrelation erfüllt sind: $S^\mu_{x,\rho}S^\rho_{y,\nu} - S^\mu_{y,\rho}S^\rho_{x,\nu} = i\hbar S^\mu_{z,\nu}$ usw. Für alle drei Komponenten findet man außerdem die Eigenwerte $0, 0, \hbar, -\hbar$. Offenbar ist ein Eigenwert Null „überschüssig“.

Weitere Einsicht bietet der Operator S^2 , genauer

$$(S^{2,\mu}_{\nu}) := (S^{\mu}_{x,\rho} S^{\rho}_{x,\nu} + S^{\mu}_{y,\rho} S^{\rho}_{y,\nu} + S^{\mu}_{z,\rho} S^{\rho}_{z,\nu}) = \frac{2\hbar^4}{m^2 c^2} \begin{pmatrix} -k^2 & 0 & 0 & k\omega_{\mathbf{k}}/c \\ 0 & m^2 c^2/\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m^2 c^2/\hbar^2 & 0 \\ -k\omega_{\mathbf{k}}/c & 0 & 0 & \omega_{\mathbf{k}}^2/c^2 \end{pmatrix}. \quad (3.421)$$

Dies sieht nicht besonders einfach aus, aber die Eigenwerte ergeben sich zu $0, 2\hbar^2, 2\hbar^2, 2\hbar^2$. Wir beschreiben also ein Teilchen mit dem Spin $S = 1$ mit $S^2 = S(S+1)\hbar^2 \mathbb{1} = 2\hbar^2 \mathbb{1}$, wie gewünscht, *oder* dem Spin $S = 0$. Der Eigenvektor von S^2 zum Eigenwert Null ist, ohne Beachtung der Normierung,

$$(w^{\nu}) = \left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2}, 0, 0, \frac{\hbar k}{mc} \right), \quad (3.422)$$

er ist auch Eigenvektor von allen drei Spin-Komponenten zum Eigenwert Null. Die übrigen drei Eigenvektoren von S^2 können wir als simultane Eigenvektoren von S_z wählen:

$$(v^{\mu}_{\pm}) = (0, 1, \pm i, 0), \quad (3.423)$$

$$(v^{\mu}_0) = \left(\frac{\hbar k}{mc}, 0, 0, \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \right). \quad (3.424)$$

Wir überprüfen nun die Lorenz-Bedingung $\partial_{\mu} B^{\mu} = 0$. Für ebene Wellen wird diese zu $k_{\mu} B^{\mu} = 0$. Für die angegebenen Eigenvektoren finden wir, mit $(k_{\mu}) = (\omega_{\mathbf{k}}/c, 0, 0, -k)$,

$$k_{\mu} w^{\mu} = \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{c} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} - k \frac{\hbar k}{mc} = \frac{\hbar^2}{mc^3} (\omega_{\mathbf{k}}^2 - k^2 c^2) = \frac{\hbar^2}{mc^3} \left(\cancel{k^2 c^2} + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} - \cancel{k^2 c^2} \right) = mc \neq 0, \quad (3.425)$$

$$k_{\mu} v^{\mu}_{\pm 1} = 0, \quad (3.426)$$

$$k_{\mu} v^{\mu}_0 = \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{c} \frac{\hbar k}{mc} - k \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} = 0. \quad (3.427)$$

Also schließt die Lorenz-Bedingung gerade die unerwünschte Spin-0-Lösung aus.

3.6.2 Spin-3/2-Fermionen und die Rarita-Schwinger-Gleichung

Bei der Konstruktion einer plausiblen Theorie für Spin-3/2-Fermionen (z. B. die Spin-3/2-Baryonen $\Delta, \Sigma, \Xi, \Omega$) gehen wir zunächst ähnlich vor wie für Spin-1-Bosonen. Jedoch ist der Ausgangspunkt nun die Dirac-Gleichung. Da ein Spin $S = 3/2$ vier Einstellmöglichkeiten hat, erwarten wir für die freie Theorie vierfach entartete Lösungen für festen Wellenvektor \mathbf{k} und festes Vorzeichen der Energie, $\epsilon = \pm$. Die Wellenfunktion sollte also acht unabhängige Komponenten haben. Die zentrale Idee ist, den Teilchen *sowohl* einen Spin-Freiheitsgrad der Länge 1 *als auch* einen der Länge 1/2 zu geben. Dazu führen wir einen Vierervektor (ψ^{μ}) von vierkomponentigen Dirac-Spinoren ein, einen sogenannten *Vektor-Spinor*. (ψ^{μ}) hat $4 \times 4 = 16$ Komponenten. Die Vierervektor-Struktur soll analog zur Proca-Theorie den Spin 1 implementieren und die Dirac-Spinor-Struktur den Spin 1/2 sowie den Teilchen-Loch-Freiheitsgrad $\epsilon = \pm$.

Die Dirac-Gleichung für den Vektor-Spinor (ψ^{μ}) lautet

$$(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - mc)\psi^{\nu} = 0. \quad (3.428)$$

Diese Gleichung hat ebenfalls 16 Komponenten. Für jeden Spinor ψ^{ν} (ν fest) hat die Dirac-Gleichung wie bekannt zwei entartete Lösungen für feste \mathbf{k}, ϵ . Insgesamt erhalten wir demnach $4 \times 2 = 8$ entartete Lösungen. Wir müssen diese Zahl durch Nebenbedingungen auf vier reduzieren.

Wie für Spin-1-Bosonen suchen wir Nebenbedingungen, die linear in (ψ^{μ}) und unabhängig vom Raumzeitpunkt (x^{μ}) sind. Nun haben wir aber drei Vierervektoren zur Verfügung: (γ^{μ}), (∂^{μ}) und (ψ^{μ}). Die einfachsten linearen Bedingungen lauten daher

$$\partial_{\mu}\psi^{\mu} = 0 \quad (3.429)$$

und

$$\gamma_\mu \psi^\mu = 0. \quad (3.430)$$

Diese Bedingungen sind jedoch nicht unabhängig; aus der zweiten und der Dirac-Gleichung folgt nämlich die erste:

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi^\nu = 0 \quad \Bigg| \quad \gamma_\nu \times \quad (3.431)$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \underbrace{\gamma_\nu\gamma^\mu}_{=2\delta_\nu^\mu - \gamma^\mu\gamma_\nu} \partial_\mu\psi^\nu - mc \underbrace{\gamma_\nu\psi^\nu}_{=0} = 0 \quad (3.432)$$

$$\Rightarrow \quad 2i\hbar\partial_\mu\psi^\mu - i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu \underbrace{\gamma_\nu\psi^\nu}_{=0} = 0 \quad (3.433)$$

$$\Rightarrow \quad \partial_\mu\psi^\mu = 0. \quad (3.434)$$

Der *Vierervektor* (ψ^μ) zusammen mit der Lorenz-Bedingung $\partial_\mu\psi^\mu = 0$ implementiert einen Spin-1-Freiheitsgrad, analog zu Abschnitt 3.6.1. Der *Dirac-Spinor* in jeder Komponenten ψ^μ implementiert wie gesagt einen Spin-1/2-Freiheitsgrad und den Teilchen-Loch-Freiheitsgrad. Wir erwarten, dass sich diese Spins zu einem Gesamtspin von $1 - 1/2 = 1/2$ oder $1 + 1/2 = 3/2$ zusammensetzen können. Der erste Fall ist hier nicht erwünscht. Man kann zeigen, dass die Bedingung $\gamma_\mu\psi^\mu = 0$ auf den Unterraum zum Gesamtspin 3/2 projiziert. In diesem Abschnitt verzichten wir weitgehend auf Beweise; siehe T. Pilling, Int. J. Mod. Phys. A **20**, 2715 (2005).

Auch für Spin-3/2-Fermionen existiert eine alternative Gleichung. Wir definieren zunächst einige Abkürzungen: Der „Chiralitätsoperator“ lautet

$$\gamma_5 \equiv \gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.435)$$

Man überzeugt sich leicht, dass gilt

$$\{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0 \quad \text{für } \mu = 0, 1, 2, 3, \quad (3.436)$$

$$\gamma_5\gamma_5 = \mathbb{1}. \quad (3.437)$$

Außerdem sei

$$\sigma^{\mu\nu} := \frac{i}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu) \equiv \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]. \quad (3.438)$$

Dies ist ein antisymmetrischer Vierertensor von Matrizen auf dem Spinor-Raum. Man kann zeigen, dass die 16 linear unabhängigen Matrizen $\mathbb{1}$, γ^μ , $\sigma^{\mu\nu}$, $\gamma_5\gamma^\mu$ und γ_5 eine Basis der 16-dimensionalen Vektorraums über \mathbb{C} der komplexen 4×4 -Matrizen bilden.

Damit können wir nun die *Rarita-Schwinger-Gleichung* hinschreiben:

$$(\hbar\epsilon^{\mu\kappa\rho\nu}\gamma_5\gamma_\kappa\partial_\rho - imc\sigma^{\mu\nu})\psi_\nu = 0. \quad (3.439)$$

Man kann zeigen, dass 1. die Dirac-Gleichung für die Komponenten ψ^μ zusammen mit der Bedingung $\gamma_\mu\psi^\mu = 0$ die Rarita-Schwinger-Gleichung impliziert und 2. die Rarita-Schwinger-Gleichung die Dirac-Gleichung und die Bedingung $\gamma_\mu\psi^\mu = 0$ impliziert.

Die Kopplung von Spin-3/2-Teilchen an das elektromagnetische Feld sollte mittels minimaler Kopplung erfolgen. Aber Fierz und Pauli haben schon 1939 festgestellt, dass dies für alle Spins $S > 1$ zu Inkonsistenzen führt. Für die Spin-3/2-Theorie sehen wir dies wie folgt: Zunächst folgt aus der minimal gekoppelten Dirac-Gleichung, analog zum freien Fall,

$$(i\hbar\gamma^\mu D_\mu - mc)\psi^\nu = 0 \quad \Bigg| \quad D_\mu = \partial_\mu + i\frac{q}{\hbar c}A_\mu \quad (3.440)$$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \underbrace{\gamma_\nu\gamma^\mu}_{=2\delta_\nu^\mu - \gamma^\mu\gamma_\nu} D_\mu\psi^\nu - mc \underbrace{\gamma_\nu\psi^\nu}_{=0} = 0 \quad (3.441)$$

$$\Rightarrow \quad 2i\hbar D_\mu\psi^\mu - i\hbar\gamma^\mu D_\mu \underbrace{\gamma_\nu\psi^\nu}_{=0} \quad (3.442)$$

$$\Rightarrow D_\mu \psi^\mu = 0. \quad (3.443)$$

Nun wenden wir D_ν auf die Dirac-Gleichung an:

$$D_\nu (i\hbar\gamma^\mu D_\mu - mc) \psi^\nu = 0 \quad (3.444)$$

$$\Rightarrow i\hbar\gamma^\mu D_\nu D_\mu \psi^\nu - mc \underbrace{D_\nu \psi^\nu}_{=0} = 0. \quad (3.445)$$

Wir wollen im ersten Term D_ν und D_μ vertauschen, um $D_\nu \psi^\nu = 0$ ausnutzen zu können:

$$\dots \Rightarrow i\hbar\gamma^\mu \left(\partial_\nu + i \frac{q}{\hbar c} A_\nu \right) \left(\partial_\mu + i \frac{q}{\hbar c} A_\mu \right) \psi^\nu = 0 \quad (3.446)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar\gamma^\mu \left[\partial_\mu \partial_\nu + i \frac{q}{\hbar c} (\partial_\nu A_\mu) + i \frac{q}{\hbar c} A_\mu \partial_\nu + i \frac{q}{\hbar c} A_\nu \partial_\mu + \left(i \frac{q}{\hbar c} \right)^2 A_\mu A_\nu \right] \psi^\nu &= 0 \quad (3.447) \\ &= i \frac{q}{\hbar c} \partial_\mu A_\nu - i \frac{q}{\hbar c} (\partial_\mu A_\nu) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow i\hbar\gamma^\mu D_\mu \underbrace{D_\nu \psi^\nu}_{=0} + i\hbar\gamma^\mu i \frac{q}{\hbar c} \underbrace{(\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu)}_{=F_{\nu\mu} = -F_{\mu\nu}} \psi^\nu = 0 \quad (3.448)$$

$$\Rightarrow \gamma^\mu F_{\mu\nu} \psi^\nu = 0 \quad (3.449)$$

mit dem elektromagnetischen Feldstärketensor ($F_{\mu\nu}$). Dies ist eine zusätzliche Nebenbedingung für (ψ^ν), die nicht vorhanden ist, wenn das elektromagnetische Feld verschwindet oder nicht an die Teilchen koppelt. Das bedeutet aber, dass die Theorie für *elektrisch geladene* Spin-3/2-Teilchen weniger Freiheitsgrade beschreibt als für freie Teilchen. Man findet auch, dass die minimal an das Feld gekoppelte Rarita-Schwinger-Gleichung Moden vorhersagt, die schneller als mit Lichtgeschwindigkeit propagieren. Zusammengefasst bezeichnet man diese Schwierigkeiten als „Rarita-Schwinger-Paradoxien“.

Eine mögliche Deutung ist, dass keine fundamentalen Spin-3/2-Teilchen existieren können, die an das elektromagnetische Feld koppeln. Allerdings existieren zusammengesetzte Teilchen mit dem Spin 3/2 und elektrischer Ladung, z. B. die Δ -Baryonen aus drei Spin-1/2-Quarks u und d mit parallelen Spins. Man würde die Δ -Baryonen gern durch eine effektive Rarita-Schwinger-Theorie beschreiben können. Die hier angerissenen Probleme sind nicht abschließend geklärt. Es wurden jedoch signifikante Fortschritte erzielt, die aber eine Vielteilchen- bzw. Quantenfeldtheorie erfordern.

Kapitel 4

Streutheorie

Das dritte große Kapitel der Vorlesung beschäftigt sich mit der Streuung von Teilchen. Wir werden eine allgemeine Theorie für Streuzustände entwickeln, ähnlich wie wir in der Quantentheorie 1 eine allgemeine Theorie für gebundene Zustände entwickelt haben. Wie dort gehen wir zunächst von der (Schrödingerschen) Wellenmechanik aus und kommen später zu einer formaleren und allgemeineren (Dirac-) Notation.

Auf Basis der in der Quantentheorie 1 überwiegend betrachteten gebundenen Zustände können wir die meisten spektroskopischen Experimente im Prinzip verstehen. Diese Experimente messen die Übergangsenergien zwischen gebundenen Zuständen sowie die Übergangsraten unter bekannten Störungen (vgl. die zeitabhängige Störungstheorie). Bei *Streuexperimenten* sind dagegen der Anfangs- und Endzustand i. A. ungebunden. Beispiele sind die Experimente von Rutherford, Franck und Hertz, Stern und Gerlach sowie Compton und natürlich die Experimente mit Teilchenbeschleunigern. Um Streuexperimente beschreiben zu können, benötigen wir eine systematische Quantentheorie der Streuung, von der wir hier die Grundzüge entwickeln wollen.

Im Vergleich zu den letzten beiden großen Kapiteln wird die Streutheorie oft als mathematisch aufwendiger empfunden. Bis einschließlich Abschnitt 4.4 werden wir das Streuproblem in der Ortsdarstellung behandeln. In diesem Rahmen resultieren die mathematischen Schwierigkeiten daraus, dass wir nichttriviale Lösungen partieller Differentialgleichungen untersuchen müssen. Das liegt in der Natur der Streuung in mehr als einer Dimension. Die Denkweise und auch ein Teil der Methoden erinnern hier an die Elektrodynamik, in der es ja auch um nicht-triviale Lösungen partieller Differentialgleichungen geht. Bei der ersten Beschäftigung mit dem Thema besteht eine Schwierigkeit oft darin, dass wichtige Aspekte hier in der mathematischen Methodik stecken, zusätzlich zur physikalischen Erkenntnis.

In den Abschnitten 4.5 und 4.6 verlassen wir dann die Ortsdarstellung und gehen zu einer abstrakteren Beschreibung über. Dies entspricht dem Schritt von der Schrödingerschen Wellenmechanik zum Dirac-Formalismus in der Vorlesung Quantentheorie 1.

4.1 Grundlagen

In diesem Abschnitt besprechen wir, was wir überhaupt mit Streuzuständen meinen, und definieren zentrale Größen. Wir beweisen auch eine wichtige Eigenschaft dieser Streuzustände, ausgedrückt durch das Optische Theorem, das die gesamte Streuung und die Streuung in Vorwärtsrichtung miteinander in Beziehung setzt.

Wir unterscheiden folgende Fälle:

- Streuung an einem *festen Target*. Dies ist ein Einteilchenproblem: Wir suchen Streuzustände eines Teilchens in einem gegebenen Potential. Diese Streuung ist immer elastisch, die Einteilchenenergie ist erhalten.
- Streuung an *anderen Teilchen*. Dies ist i. A. ein Mehrteilchenproblem und damit schwierig. Handelt es sich jedoch um *elastische* Streuung, d. h. Streuung ohne innere Anregung der Teilchen und ohne Teilchenerzeugung und -vernichtung, an *einem* anderen Teilchen, kann das (Zwei-Teilchen-) Problem durch Transformation auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten auf die Streuung am Potential (festem Target) zurückgeführt werden. Dies ist analog zur Reduktion des Wasserstoffproblems (Elektron und Proton!) auf ein effektives Einteilchenproblem in der Quantentheorie 1.

Wir machen einige vereinfachende Annahmen: Wir betrachten, zumindest vorerst, nur

- Streuung an einem Potential (also automatisch elastisch).
- den nichtrelativistischen Grenzfall, die kinetische Energie lautet also

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (4.1)$$

Eine Verallgemeinerung auf die Dirac- oder Klein-Gordon-Theorie ist möglich.

- ein hinreichend schnell abfallendes Potential, genauer

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(\mathbf{r}) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} rV(r, \vartheta, \varphi) = 0 \quad \forall \vartheta, \varphi. \quad (4.2)$$

Das bedeutet, dass V schneller als $1/r$ abfällt. Beachte, dass wir damit das Coulomb-Potential ausschließen – wir kommen später darauf zurück. Den Punkt $\mathbf{r} = 0$ nennen wir das *Streuzentrum*.

- einen einfallenden Teilchenstrahl mit festem Impuls $\hbar\mathbf{k}$ und daher fester Energie $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ weit entfernt vom Streuzentrum. Weit entfernt wird der einlaufende Zustand also durch eine ebene Welle $\psi_0(\mathbf{r}, t) \sim e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - Et/\hbar)}$ beschrieben. Das ist nicht realistisch, da diese ebene Welle unendlich breit ist, was außerdem im Experiment die Detektion der gestreuten Welle stören würde. Wir stellen uns daher bei Bedarf ein Wellenpaket vor, das hinreichend breit ist, um gut durch eine ebene Welle angenähert zu werden.

Das Streuproblem besteht jetzt aus der Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (4.3)$$

mit $E > 0$ und

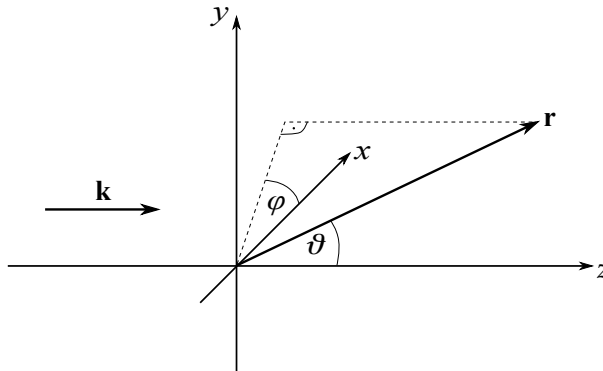
$$\psi(\mathbf{r}) = \underbrace{\psi_0(\mathbf{r})}_{\text{Primärwelle}} + \underbrace{\psi_s(\mathbf{r})}_{\text{Streuwellen}}, \quad (4.4)$$

wobei

$$\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.5)$$

gesetzt wird (die Primärwelle wurde o. B. d. A. auf die Amplitude 1 normiert). Die Primärwelle ψ_0 wäre für $V \equiv 0$ bereits allein eine Lösung, die Streuwelle ψ_s beschreibt also den Effekt des Streupotentials.

Weit entfernt vom Streuzentrum muss ψ und damit auch ψ_s die *freie* Schrödinger-Gleichung zur Energie E (elastische Streuung!) erfüllen. Daher muss ψ_s eine Superposition von ebenen Wellen mit $|\mathbf{k}| = \sqrt{2mE}/\hbar$ sein. Wegen der Lokalisierung des Streuers [schneller Abfall von $V(\mathbf{r})$] ist eine Darstellung in Kugelkoordinaten günstig. Wir wählen das Koordinatensystem so, dass sich die einlaufende Welle entlang der positiven z -Richtung ausbreitet: $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$.



Nun ist

$$\psi_s(\mathbf{r}) = f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.6)$$

mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ($\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/\sqrt{2mE}$ ist die *de-Broglie-Wellenlänge* der Streuteilchen) für große r eine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung. Beachte, dass im Exponenten nicht $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ auftritt, sondern $kr = |\mathbf{k}||\mathbf{r}|$. Der Faktor e^{ikr}/r beschreibt eine auslaufende Kugelwelle. Der Beweis ist einfach:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_s(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[f \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \frac{e^{ikr}}{r} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right] \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{O}\left(f \frac{e^{ikr}}{r^3}\right) \\ &= E \psi_s(\mathbf{r}) - \mathcal{O}\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \psi_s(\mathbf{r})\right). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Die Schreibweise soll andeuten, dass die Beiträge der Ableitungen nach ϑ, φ durch einen zusätzlichen Faktor $1/r^2$ unterdrückt sind. Für große r erfüllt ψ_s also die freie Schrödinger-Gleichung. \square

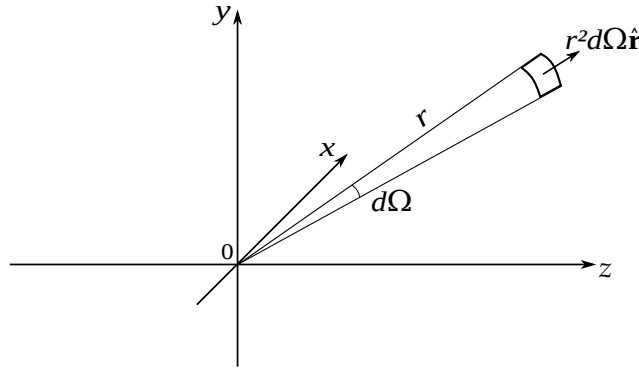
Daher können wir nun für große r schreiben

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (4.8)$$

Man nennt $f(\vartheta, \varphi) \equiv f(\hat{\mathbf{r}})$ mit $\hat{\mathbf{r}} := \mathbf{r}/r$ die *Streuamplitude*. Sie ist i. A. komplex. Es ist wichtig, immer zu bedenken, dass dies nur eine asymptotische Form für große Abstände vom Streuzentrum ist.

Wir definieren nun den *differentiellen Wirkungsquerschnitt* (oder Streuquerschnitt) $d\sigma/d\Omega$ zunächst in Worten: Es ist

$$d\sigma \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\text{Zahl der gestreuten Teilchen in } d\Omega \text{ pro Zeit}}{\text{Zahl der einlaufenden Teilchen pro Zeit und Fläche}}. \quad (4.9)$$



$d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ ist das *Raumwinkelement* in der Richtung $\hat{\mathbf{r}}$. Zähler und Nenner sind weit entfernt vom Streuzentrum, d. h. für $r \rightarrow \infty$, auszuwerten. Weiter definieren wir den *totalen Wirkungsquerschnitt* (oder Streuquerschnitt)

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{\text{Zahl der gestreuten Teilchen pro Zeit}}{\text{Zahl der einlaufenden Teilchen pro Zeit und Fläche}}. \quad (4.10)$$

Offenbar gilt

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (4.11)$$

σ_{tot} hat die Dimension einer *Fläche* und lässt sich als Querschnittsfläche des Anteils des einlaufenden Strahls interpretieren, der gestreut wird. Für den Fall der *klassischen* Streuung an einer harten Kugel mit dem Radius R ist $\sigma_{\text{tot}} = \pi R^2$, also ist der totale Wirkungsquerschnitt gleich der Querschnittsfläche der Kugel.

Um die Messgröße $d\sigma/d\Omega$ durch die Streuamplitude f auszudrücken, bestimmen wir die Stromdichte der einlaufenden ebenen Primärwelle,

$$\mathbf{j}_0(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi_0^*(\mathbf{r}) \nabla \psi_0(\mathbf{r}) - \psi_0(\mathbf{r}) \nabla \psi_0^*(\mathbf{r}) \right] = \frac{\hbar}{2mi} \left[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} i\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-i\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \quad (4.12)$$

und die Stromdichte der Streuwelle für $r \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_s(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi_s^*(\mathbf{r}) \nabla \psi_s(\mathbf{r}) - \psi_s(\mathbf{r}) \nabla \psi_s^*(\mathbf{r}) \right] \\ &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\cong} \frac{\hbar}{2mi} \left[f^* \frac{e^{-ikr}}{r} \nabla f \frac{e^{ikr}}{r} - f \frac{e^{ikr}}{r} \nabla f^* \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[\hat{\mathbf{r}} \left(f^* f \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} - f f^* \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \right) + \hat{\vartheta} \left(f^* \frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial \vartheta} f - f \frac{1}{r^3} \frac{\partial}{\partial \vartheta} f^* \right) \right. \\ &\quad \left. + \hat{\varphi} \left(f^* \frac{1}{r^3 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} f - f \frac{1}{r^3 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} f^* \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Wir benötigen nur die radiale Komponente, da nur diese auf den Detektor trifft,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_s(\mathbf{r}) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\cong} |f|^2 \frac{\hbar}{2mi} \left(\frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \right) \\ &= |f|^2 \frac{\hbar}{2mi} \left(\frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3} + \frac{ik}{r^2} + \frac{1}{r^3} \right) = |f|^2 \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Die Zahl der gestreuten Teilchen pro Zeit, also den Strom, im Raumwinkelement $d\Omega$ erhalten wir, indem wir \mathbf{j}_s für $r \rightarrow \infty$ über ein Flächenelement $r^2 d\Omega \hat{\mathbf{r}}$ der Kugeloberfläche mit dem Radius r integrieren. Dies entspricht einfach der Multiplikation mit dem Flächenelement, da dieses infinitesimal ist:

$$r^2 d\Omega \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_s = |f|^2 \frac{\hbar k}{m} d\Omega. \quad (4.15)$$

Die Zahl der einlaufenden Teilchen pro Zeit und Fläche ist die Stromdichte

$$|\mathbf{j}_0| = \frac{\hbar k}{m}. \quad (4.16)$$

Damit folgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{|f|^2 \frac{\hbar k}{m} d\Omega}{\frac{\hbar k}{m}} = |f|^2 d\Omega, \quad (4.17)$$

also

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \varphi)|^2. \quad (4.18)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist demnach das Betragsquadrat der Streuamplitude. Dies ist eine zentrale Aussage der Streutheorie. Es folgt sofort

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d\Omega |f(\vartheta, \varphi)|^2 \equiv \int d\vartheta d\varphi \sin \vartheta |f(\vartheta, \varphi)|^2. \quad (4.19)$$

Ist das Streupotential speziell ein *Zentralpotential*, $V(\mathbf{r}) = V(r)$, so ist das System invariant unter Drehungen um die Einfallrichtung (z -Achse). Daher müssen beobachtbare Größen ebenfalls diese Rotationssymmetrie haben. Das bedeutet, dass f und $d\sigma/d\Omega$ nur von ϑ , aber nicht von φ , abhängen können. Das System hat keine volle Kugelsymmetrie, da die Primärwelle eine Richtung $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{z}}$ auszeichnet.

4.1.1 Teilchenzahlerhaltung und Optisches Theorem

Aus der Tatsache, dass in der Abwesenheit von Teilchenerzeugung und -vernichtung die Zahl der gestreuten Teilchen gleich der Verminderung der Zahl der in Vorwärtsrichtung ungestreut weiterfliegenden Teilchen sein muss, folgt das *Optische Theorem*

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\vartheta = 0). \quad (4.20)$$

Hier ist $f(\vartheta = 0) \equiv f(\vartheta = 0, \varphi)$ die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung. Wir beweisen nun dieses Theorem (einige Subtilitäten werden wir hier nicht erschöpfend erörtern – eine klarere Herleitung folgt in Kürze mittels der Methode der Partialwellenzerlegung).

Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit bzw. der Teilchenzahl bedeutet, dass der Gesamtstrom durch eine geschlossene Fläche verschwinden muss. Wir wählen eine Kugel mit dem Radius r um das Streuzentrum. Wählen wir r hinreichend groß im Vergleich zur Reichweite des Streupotentials, so können wir in der Nähe der Kugeloberfläche die Wellenfunktion durch ihre asymptotische Form ersetzen,

$$\psi(\mathbf{r}) \cong \underbrace{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}_{\psi_0(\mathbf{r})} + \underbrace{f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}}_{\psi_s(\mathbf{r})}. \quad (4.21)$$

Die ebene Welle *allein* trägt nichts zum Gesamtstrom durch die Kugeloberfläche bei, denn was hinein fließt, kommt auch wieder heraus. Die Streuwelle *allein* trägt, wie wir gesehen haben, den aus der Kugel heraus fließenden Strom

$$I_s = \int d\Omega r^2 \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_s(\mathbf{r}) = \frac{\hbar k}{m} \int d\Omega |f(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{\hbar k}{m} \sigma_{\text{tot}} \quad (4.22)$$

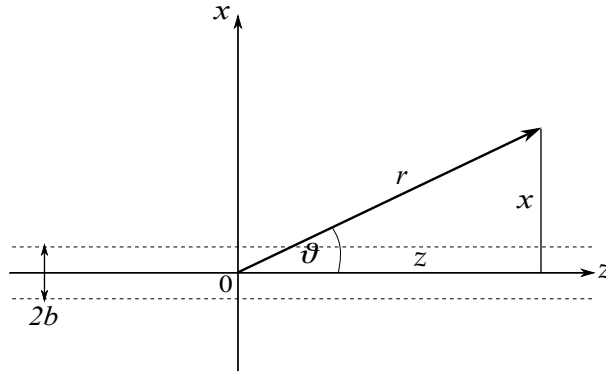
bei. Wie kann dann der Gesamtstrom verschwinden? Notwendig dafür ist die *Interferenz* von Primärwelle und gestreuter Welle. Der Interferenz-Beitrag zur Stromdichte lautet

$$\mathbf{j}_{\text{int}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi_0^*(\mathbf{r}) \nabla \psi_s(\mathbf{r}) + \psi_s^*(\mathbf{r}) \nabla \psi_0(\mathbf{r}) - \psi_0(\mathbf{r}) \nabla \psi_s^*(\mathbf{r}) - \psi_s(\mathbf{r}) \nabla \psi_0^*(\mathbf{r}) \right]. \quad (4.23)$$

Wir benötigen nur die radiale Komponente, für große r ,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_{\text{int}}(\mathbf{r}) &\equiv j_{\text{int},r}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi_0^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} \psi_s(\mathbf{r}) + \psi_s^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} \psi_0(\mathbf{r}) - \psi_0(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} \psi_s^*(\mathbf{r}) - \psi_s(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} \psi_0^*(\mathbf{r}) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} + f^*(\vartheta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right. \\ &\quad \left. - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} f^*(\vartheta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{r} - f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Hier erscheint die ebene Welle $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ für große r . Der Grenzwert $\lim_{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ existiert aber nicht im Sinne von gewöhnlichen Funktionen, sondern nur als Distribution. Wir müssen uns über die *physikalisch* angemessene Interpretation von $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ für große r klar werden. Sie bestimmt hier die Reihenfolge von Grenzübergängen. Der Ansatz $\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ist eine Idealisierung für einen Strahl mit endlichem Radius b , der groß ist gegenüber der de Broglie-Wellenlänge $2\pi/k = \lambda$ und gegenüber der Reichweite des Streupotentials. Der Radius r der betrachteten fiktiven Kugel soll aber groß gegenüber allen Längen im System sein, also auch $r \gg b$. Oder, physikalisch ausgedrückt, der Detektor ist viel weiter vom Target entfernt, als der Strahl breit ist.



Eine erste Idee ist, die Primärwelle als

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \Theta(b^2 - x^2 - y^2) e^{ikz} = \Theta(b^2 - r^2 \sin^2 \vartheta) e^{ikr \cos \vartheta} \quad (4.25)$$

zu schreiben. Der hierdurch beschriebene scharf begrenzte Parallelstrahl ist aber gar keine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung. Andererseits hatten wir schon gesehen, dass Kugelwellen für $r \rightarrow \infty$ Lösungen der Gleichung sind. Nun ist für $r \gg b$ der Parallelstrahl ununterscheidbar von ein- und auslaufenden Kugelwellen, die auf kleine Raumwinkelbereiche um die z -Achse beschränkt sind. Wir machen daher den Ansatz

$$\psi_0(\mathbf{r}) \cong \underbrace{\alpha \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) \frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{auslaufend}} + \underbrace{\beta \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}}) \frac{e^{-ikr}}{r}}_{\text{einlaufend}} \quad (4.26)$$

mit noch zu bestimmenden Koeffizienten α, β . Diese müssen so gewählt werden, dass unser Ansatz für *kleine* r , also im Streubereich, mit der ebenen Welle mit Amplitude eins, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, kompatibel ist. Dazu betrachten wir – *ad hoc* – die über die Oberfläche einer kleinen Kugel des Radius $r < b$ integrierte (oder gemittelte) Wellenfunktion

$$\int d\Omega r^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \stackrel{!}{=} \int d\Omega r^2 \left[\alpha \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) \frac{e^{ikr}}{r} + \beta \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}}) \frac{e^{-ikr}}{r} \right]. \quad (4.27)$$

Die linke Seite ergibt

$$\int d\Omega r^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 2\pi r^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{ikr \cos \vartheta} = 2\pi r^2 \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) e^{ikr \cos \vartheta} = 2\pi r^2 \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr}. \quad (4.28)$$

Die rechte Seite ergibt einfach

$$\dots = r (\alpha e^{ikr} + \beta e^{-ikr}). \quad (4.29)$$

Gleichsetzen liefert

$$\alpha = \frac{2\pi}{ik}, \quad \beta = -\frac{2\pi}{ik}. \quad (4.30)$$

Der Ausdruck für die Primärwelle lautet damit

$$\psi_0(\mathbf{r}) \cong \frac{2\pi}{ikr} e^{ikr} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) - \frac{2\pi}{ikr} e^{-ikr} \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}}). \quad (4.31)$$

Dies setzen wir jetzt in den Interferenz-Beitrag zur radialen Stromdichte ein,

$$\begin{aligned} j_{\text{int},r} &= \frac{\hbar}{2mi} \frac{2\pi}{ik} \left[-\frac{e^{-ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) f(\hat{\mathbf{r}}) \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} + \frac{e^{ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}}) f(\hat{\mathbf{r}}) \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} \right. \\ &\quad + f^*(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) - f^*(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}}) \\ &\quad \left. - \frac{e^{ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) f^*(\hat{\mathbf{r}}) \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} + \frac{e^{-ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}}) f^*(\hat{\mathbf{r}}) \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \end{aligned}$$

$$+ f(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) - f(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} \delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}}) \Big]. \quad (4.32)$$

Nun ist

$$\frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{\pm ikr}}{r} = \left(\pm ik - \frac{1}{r} \right) \frac{e^{\pm ikr}}{r}. \quad (4.33)$$

Die Beiträge mit einem zusätzlichen Faktor $1/r$ fallen für $r \rightarrow \infty$ schneller ab und sind daher vernachlässigbar. Es bleibt

$$\begin{aligned} j_{\text{int},r} &= \frac{\hbar}{2mi} \frac{2\pi}{ik} \frac{ik}{r^2} \left[-\delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}})f(\hat{\mathbf{r}}) + \cancel{\delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}})f(\hat{\mathbf{r}})} + \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}})f^*(\hat{\mathbf{r}}) + \cancel{\delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}})f^*(\hat{\mathbf{r}})} \right. \\ &\quad \left. + \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}})f^*(\hat{\mathbf{r}}) - \cancel{\delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}})f^*(\hat{\mathbf{r}})} - \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}})f(\hat{\mathbf{r}}) - \cancel{\delta(\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{z}})f(\hat{\mathbf{r}})} \right] \\ &= -\frac{\hbar}{m} \frac{4\pi}{r^2} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) \text{Im} f(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{\hbar}{m} \frac{4\pi}{r^2} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) \text{Im} f(\hat{\mathbf{z}}). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Der Interferenzterm tritt also in Vorwärtsrichtung ($\vartheta = 0$) auf, wo ψ_0 und ψ_s denselben Wellenvektor haben und daher in einer festen Phasenbeziehung stehen können. Die radiale Komponente $j_{\text{int},r}$ ist *negativ*, falls $f(\vartheta = 0) > 0$, d. h. der Interferenzstrom fließt von rechts nach links. Dies drückt aus, dass \mathbf{j}_{int} eine *Verminderung* der i. A. sehr viel größeren Stromdichte \mathbf{j}_0 in Vorwärtsrichtung beschreibt. Der Interferenz-Beitrag zum Gesamtstrom durch die große Kugel ist damit

$$I_{\text{int}} = \int d\Omega r^2 j_{\text{int},r}(\mathbf{r}) = -4\pi \frac{\hbar}{m} \text{Im} f(\hat{\mathbf{z}}) = -4\pi \frac{\hbar}{m} \text{Im} f(\vartheta = 0). \quad (4.35)$$

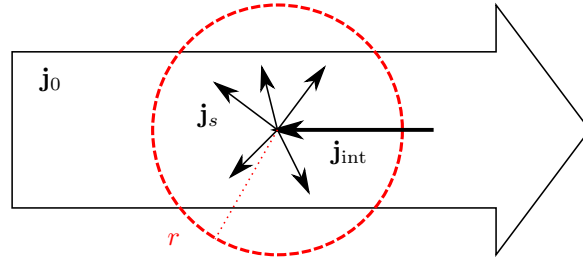
Der Gesamtstrom muss verschwinden,

$$I = \underbrace{I_0}_{=0} + I_s + I_{\text{int}} = \frac{\hbar k}{m} \sigma_{\text{tot}} - 4\pi \frac{\hbar}{m} \text{Im} f(\vartheta = 0) \stackrel{!}{=} 0. \quad (4.36)$$

Es folgt

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\vartheta = 0). \quad (4.37)$$

□



Während das Optische Theorem aus einem einfachen Prinzip, der Teilchenzahlerhaltung, folgt, ist die Herleitung recht subtil. Wir werden sehen, dass es sich im Rahmen der im Folgenden betrachteten Partialwellenmethode einfacher begründen lässt.

4.2 Partialwellen und Streuphasen

Hier entwickeln wir eine Methode zur praktischen Lösung von Streuproblemen. Sie beinhaltet eine Entwicklung der Streuwelle nach Kugelflächenfunktionen und ist mit der Multipolentwicklung in der Elektrodynamik und mit der Lösung des Wasserstoff-Problems in der Quantentheorie 1 verwandt. Anschließend wenden wir diese Methode auf wichtige Beispiele an.

Wir haben gesehen, dass für das Streuproblem die Verwendung von Kugelkoordinaten bzgl. des Streuzentrums als Koordinatenursprung nützlich ist. Dies legt nahe, die Wellenfunktion nach *Kugelflächenfunktionen* $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ zu entwickeln, die die natürliche Basis des winkelabhängigen Anteils bilden. Das ist ganz ähnlich zur Lösung für die gebundenen Zustände (Wasserstoff-Problem). Wir beschränken uns auf den Fall eines Zentralpotentials $V(\mathbf{r}) = V(r)$ und wählen wie gewöhnlich die z -Achse parallel zur Einfallrichtung. Dann ist das System rotationssymmetrisch um die z -Achse und in der Entwicklung treten nur Terme mit $m = 0$ auf,

$$Y_{l0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta) \quad (4.38)$$

mit den Legendre-Polynomen $P_l(u)$. Die Legendre-Polynome niedrigster Ordnung lauten

$$P_0(u) = 1, \quad (4.39)$$

$$P_1(u) = u, \quad (4.40)$$

$$P_2(u) = \frac{3u^2 - 1}{2}, \quad (4.41)$$

⋮

Wir schreiben also

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \vartheta) \quad (4.42)$$

und nennen dies die Zerlegung nach *Partialwellen*. Die Beiträge von $l = 0, 1, 2, \dots$ nennt man *s*-, *p*-, *d*- usw. Wellen-Streuung. Insbesondere ist die *s*-Wellen-Streuung unabhängig vom Streuwinkel ϑ , da $P_0(u) = 1 = \text{const.}$

Der explizite Faktor $1/r$ in Gl. (4.42) wird sich später als nützlich erweisen; dies war auch schon bei der Betrachtung gebundener Zustände im Zentralpotential der Fall. Wie dort zerlegen wir die kinetische Energie in Radial- und Winkelanteile und drücken letztere durch den Drehimpuls \mathbf{L} aus,

$$H \psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (4.43)$$

$$\Rightarrow \sum_l \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} u_l''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^3} u_l(r) + \frac{V(r)}{r} u_l(r) \right] P_l(\cos \vartheta) = E \sum_l \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \vartheta) \quad (4.44)$$

$$\Rightarrow \sum_l \left[-\frac{\hbar^2}{2m} u_l''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u_l(r) + V(r) u_l(r) \right] P_l(\cos \vartheta) = E \sum_l u_l(r) P_l(\cos \vartheta). \quad (4.45)$$

Unter Ausnutzung der linearen Unabhängigkeit der $P_l(u)$ erhalten wir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_l''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u_l(r) + V(r) u_l(r) = E u_l(r) \quad (4.46)$$

$$\Rightarrow u_l''(r) + [k^2 - v_{\text{eff}}(r)] u_l(r) = 0 \quad (4.47)$$

mit

$$k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (4.48)$$

$$v_{\text{eff}}(r) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V_{\text{eff}}(r) := \frac{2m}{\hbar^2} V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (4.49)$$

Für große Abstände vom Streuzentrum geht $v_{\text{eff}}(r)$ gegen Null und $u_l(r)$ erfüllt daher asymptotisch die Gleichung

$$u_l''(r) \cong -k^2 u_l(r) \quad (4.50)$$

mit der Lösung

$$u_l(r) \cong \underbrace{A_l e^{-ikr}}_{\text{einlaufend}} + \underbrace{B_l e^{ikr}}_{\text{auslaufend}}. \quad (4.51)$$

Wegen der Teilchenzahl- und Drehimpulserhaltung (letztere folgt aus der Rotationssymmetrie um die z -Achse) muss für jedes l die auslaufende Amplitude gleich der einlaufenden sein:

$$|B_l| = |A_l|. \quad (4.52)$$

Die $u_l(r)$ enthalten sowohl die Primärwelle als auch die Streuwelle. Der asymptotische einlaufende Anteil $A_l e^{-ikr}$ enthält natürlich ausschließlich die Primärwelle.

Diese Beobachtung nutzen wir jetzt aus, um die A_l zu bestimmen. Dazu entwickeln wir die Primärwelle $\psi_0 = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ in Partialwellen. Wir verwenden die Identität (ohne Beweis, vgl. Multipolentwicklung in der Elektrodynamik)

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \quad (4.53)$$

mit den *sphärischen Bessel-Funktionen*

$$j_l(x) := \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x) \quad (4.54)$$

(diese lassen sich für ganzzahlige l durch elementare Funktionen ausdrücken, wir kommen darauf zurück) und den Legendre-Polynomen $P_l(u)$. Für $x \gg 1$ gilt nun aber

$$j_l(x) \cong \frac{\sin\left(x - \frac{\pi}{2}l\right)}{x} \quad (4.55)$$

und für große Abstände vom Streuzentrum, $kr \gg 1$, folgt

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &\cong \sum_l (2l+1) i^l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right)}{kr} P_l(\cos \vartheta) = \sum_l (2l+1) i^l \frac{e^{ikr} e^{-i\frac{\pi}{2}l} - e^{-ikr} e^{i\frac{\pi}{2}l}}{2ikr} P_l(\cos \vartheta) \\ &\stackrel{!}{=} \sum_l \frac{A_l^{(0)} e^{-ikr} + B_l^{(0)} e^{ikr}}{r} P_l(\cos \vartheta). \end{aligned} \quad (4.56)$$

Damit sind die Koeffizienten (beachte $e^{i\pi/2} = i$)

$$A_l^{(0)} = -(2l+1) i^l \frac{e^{i\frac{\pi}{2}l}}{2ik} = -(-1)^l (2l+1) \frac{1}{2ik}, \quad (4.57)$$

$$B_l^{(0)} = (2l+1) i^l \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}l}}{2ik} = (2l+1) \frac{1}{2ik}. \quad (4.58)$$

Der einlaufende Anteil von $\psi(\mathbf{r})$ stammt nur von der Primärwelle, also ist

$$A_l = A_l^{(0)} = -(-1)^l (2l+1) \frac{1}{2ik}. \quad (4.59)$$

Mit $|B_l| = |A_l|$ [Gl. (4.52)] und analog $|B_l^{(0)}| = |A_l^{(0)}|$ (was man auch explizit sieht) folgt

$$|B_l| = |A_l| = |A_l^{(0)}| = |B_l^{(0)}| = \frac{2l+1}{2k}. \quad (4.60)$$

B_l und $B_l^{(0)}$ unterscheiden sich also höchstens in ihrer Phase. In der Partialwellenzerlegung (4.42) mit Gl. (4.51) für große r kennen wir jetzt also alles bis auf die Phasen der B_l .

Wir geben diesen Phasen einen Namen: Wir schreiben

$$B_l = e^{2i\delta_l} B_l^{(0)} \quad (4.61)$$

und nennen die δ_l *Streuphasen*. $2\delta_l$ ist also die Phasenverschiebung der auslaufenden Welle im Kanal l im Vergleich zur Primärwelle. Die Streuphasen hängen i. A. von der Energie ab.

Wir erhalten nun für große r ,

$$\begin{aligned}
u_l(r) &\cong -(-1)^l (2l+1) \frac{e^{-ikr}}{2ik} + (2l+1) \frac{e^{ikr} e^{2i\delta_l}}{2ik} \\
&= \frac{2l+1}{2ik} e^{i\frac{\pi}{2}l} e^{i\delta_l} (e^{ikr} e^{-i\frac{\pi}{2}l} e^{i\delta_l} - e^{-ikr} e^{i\frac{\pi}{2}l} e^{-i\delta_l}) \\
&= \frac{2l+1}{k} i^l e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right).
\end{aligned} \tag{4.62}$$

Wir haben damit die Partialwellen explizit durch die Streuphasen ausgedrückt. Diese Darstellung werden wir später wieder benötigen.

Für große r gilt aber auch

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \tag{4.63}$$

$$\Rightarrow f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \cong \psi(\mathbf{r}) - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{4.64}$$

Wir setzen auch für den Ausdruck auf der rechten Seite die asymptotische Form für große r ein. Dies liefert eine *exakte* Gleichung für die asymptotische Form. Unter Beachtung von $A_l = A_l^{(0)}$ erhalten wir

$$f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l (B_l - B_l^{(0)}) \frac{e^{ikr}}{r} P_l(\cos\vartheta) \tag{4.65}$$

$$\Rightarrow f(\vartheta) = \sum_l \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos\vartheta) = \sum_l \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\vartheta). \tag{4.66}$$

Die Streuphasen δ_l bestimmen also $f(\vartheta)$ und damit das Streuverhalten für große r eindeutig und vollständig. Beachte, dass Änderungen von δ_l um ganzzahlige Vielfache von π (nicht nur von 2π) nicht zu einer Änderung von $f(\vartheta)$ führen.

Insbesondere ergibt sich für den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{tot}} &= \int d\Omega |f(\vartheta)|^2 = 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta f^*(\vartheta) f(\vartheta) \\
&= 2\pi \sum_{ll'} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{k^2} e^{-i\delta_l + i\delta_{l'}} \sin\delta_l \sin\delta_{l'} \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin\vartheta P_l(\cos\vartheta) P_{l'}(\cos\vartheta)}_{= \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}} \\
&= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2\delta_l.
\end{aligned} \tag{4.67}$$

Diese Gleichung beschreibt die Beiträge von verschiedenen Drehimpulsen l zum totalen Wirkungsquerschnitt.

Andererseits erhalten wir für die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung

$$f(\vartheta=0) = \sum_l \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l} \sin\delta_l \underbrace{P_l(1)}_{=1} \Rightarrow \text{Im } f(\vartheta=0) = \sum_l \frac{2l+1}{k} \sin^2\delta_l. \tag{4.68}$$

Daraus folgt das Optische Theorem

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(\vartheta=0) \tag{4.69}$$

ohne weitere Mühe. Dies ist die rigorose Herleitung des Theorems.

Als Beispiel für die Partialwellenmethode betrachten wir zunächst ein Potential der Form

$$V(r) = \frac{\hbar^2 C}{2mr^2} \tag{4.70}$$

mit einer dimensionslosen Konstante $C > 0$, für das sich die Streuphasen exakt bestimmen lassen. Es ist

$$v_{\text{eff}}(r) = \frac{C + l(l+1)}{r^2} =: \frac{C_l}{r^2}. \quad (4.71)$$

Wir erkennen schon, wieso das Potential in Gl. (4.70) besonders einfach ist: Es hat dieselbe Form wie der Winkelanteil der kinetischen Energie. Die Radialgleichung

$$u_l''(r) + \left[k^2 - \frac{C_l}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (4.72)$$

ist vom Bessel-Typ und hat die allgemeine Lösung, für alle r ,

$$u_l(r) = \alpha_l^+ \sqrt{r} H_{\sqrt{1+4C_l}/2}^+(kr) + \alpha_l^- \sqrt{r} H_{\sqrt{1+4C_l}/2}^-(kr) \quad (4.73)$$

mit den *Hankel-Funktionen*

$$H_n^\pm(x) := J_n(x) \pm i Y_n(x). \quad (4.74)$$

Die Hankel-Funktionen sind für unsere Zwecke günstiger als die Funktionen $J_n(x)$ und $Y_n(x)$, da sie für große x eine einfachere asymptotische Form haben:

$$H_n^\pm(x) \cong \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{\pm ix} e^{\mp i \frac{\pi}{2} (n + \frac{1}{2})}. \quad (4.75)$$

Daher finden wir für große r ,

$$\begin{aligned} u_l(r) &\cong \alpha_l^+ \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{ikr} e^{-i \frac{\pi}{4} (\sqrt{1+4C_l} + 1)} + \alpha_l^- \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-ikr} e^{i \frac{\pi}{4} (\sqrt{1+4C_l} + 1)} \\ &\stackrel{!}{=} A_l e^{-ikr} + B_l e^{ikr}, \end{aligned} \quad (4.76)$$

also

$$\alpha_l^- \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{i \frac{\pi}{4} (\sqrt{1+4C_l} + 1)} = A_l = A_l^{(0)} = -(-1)^l (2l+1) \frac{1}{2ik} \quad (4.77)$$

und

$$\alpha_l^+ \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-i \frac{\pi}{4} (\sqrt{1+4C_l} + 1)} = B_l = e^{2i\delta_l} B_l^{(0)} = (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l}}{2ik}. \quad (4.78)$$

Division der beiden Gleichungen durcheinander ergibt

$$\begin{aligned} e^{2i\delta_l} &= -(-1)^l \frac{\alpha_l^+ e^{-i \frac{\pi}{4} (\sqrt{1+4C_l} + 1)}}{\alpha_l^- e^{i \frac{\pi}{4} (\sqrt{1+4C_l} + 1)}} = -(-1)^l \frac{\alpha_l^+}{\alpha_l^-} e^{-i \frac{\pi}{2} \sqrt{1+4C_l}} \underbrace{e^{-i \frac{\pi}{2}}}_{-i} \\ &= i (-1)^l \frac{\alpha_l^+}{\alpha_l^-} e^{-i \frac{\pi}{2} \sqrt{1+4C_l}}. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Nun müssen wir noch die Koeffizienten α_l^\pm bestimmen. Für *kleine* r wird die Radialgleichung (4.72) zu

$$u_l''(r) - \frac{C_l}{r^2} u_l(r) \cong 0 \quad (4.80)$$

mit den beiden Lösungen

$$u_l^\pm(r) \cong \beta_l^\pm r^{\frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{1+4C_l})}. \quad (4.81)$$

Man kann leicht zeigen, dass die Lösungen $u_l^-(r)$ in $\psi(\mathbf{r})$ zu einer Divergenz für $r \rightarrow 0$ führen, wegen der $\psi(\mathbf{r})$ dort nicht beschränkt ist. Also muss gelten $\beta_l^- = 0$ und

$$u_l(r) \cong \beta_l^+ r^{\frac{1}{2}(1 + \sqrt{1+4C_l})} \quad \text{für } r \rightarrow 0 \quad (4.82)$$

$$\Rightarrow \lim_{r \rightarrow 0} \frac{u_l(r)}{\sqrt{r}} = \lim_{r \rightarrow 0} \beta_l^+ r^{\frac{1}{2}\sqrt{1+4C_l}} = 0. \quad (4.83)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{r \rightarrow 0} \frac{u_l(r)}{\sqrt{r}} = \lim_{r \rightarrow 0} [\alpha_l^+ H_{\sqrt{1+4C_l}/2}^+(kr) + \alpha_l^- H_{\sqrt{1+4C_l}/2}^-(kr)] \\ &= \lim_{r \rightarrow 0} [(\alpha_l^+ + \alpha_l^-) J_{\sqrt{1+4C_l}/2}(kr) + i(\alpha_l^+ - \alpha_l^-) Y_{\sqrt{1+4C_l}/2}(kr)]. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Da die Bessel-Funktionen $Y_n(x)$ für $x \rightarrow 0$ divergieren, folgt

$$\alpha_l^+ = \alpha_l^-. \quad (4.85)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} e^{2i\delta_l} &= i(-1)^l e^{-i\frac{\pi}{2}\sqrt{1+4C_l}} = e^{i\frac{\pi}{2}} e^{i\pi l} e^{-i\frac{\pi}{2}\sqrt{1+4C_l}} \\ &= \exp\left(i\pi\left[l + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_l}\right]\right) \end{aligned} \quad (4.86)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \delta_l &= \frac{\pi}{2} \left(l + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_l}\right) = \frac{\pi}{2} \left(l + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1+4l(l+1)+4C}\right) \\ &= \frac{\pi}{2} \left(l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + C}\right), \end{aligned} \quad (4.87)$$

wobei die Streuphasen nur modulo π definiert sind. Als Probe setzen wir $C = 0$ ein, d. h. das Potential verschwindet. Dann ergibt sich $\delta_l = 0$ für alle l . Die auslaufenden Partialwellen sind dann genau die Partialwellen der Primärwelle, wie zu erwarten war.

Jetzt können wir im Prinzip alle interessierenden Größen berechnen, z. B.

$$f(\vartheta) = \sum_l \frac{2l+1}{k} \exp\left(i\frac{\pi}{2}\left[l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + C}\right]\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}\left[l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + C}\right]\right) P_l(\cos \vartheta) \quad (4.88)$$

und

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \underbrace{\sin^2\left(\frac{\pi}{2}\left[l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + C}\right]\right)}_{=\delta_l}. \quad (4.89)$$

Beachte, dass für $l \gg 1$ gilt

$$\begin{aligned} \delta_l &= \frac{\pi}{2} \left[l + \frac{1}{2} - \left(l + \frac{1}{2}\right) \sqrt{1 + \frac{C}{(l+1/2)^2}}\right] \\ &\cong \frac{\pi}{2} \left[l + \frac{1}{2} - \left(l + \frac{1}{2}\right) - \frac{C}{2(l+1/2)}\right] + \mathcal{O}([l+1/2]^{-3}) \\ &= -\frac{\pi}{4} \frac{C}{l+1/2} + \mathcal{O}([l+1/2]^{-3}). \end{aligned} \quad (4.90)$$

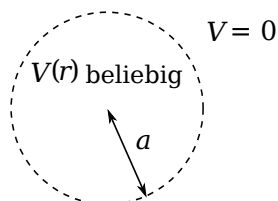
Die Streuphasen verschwinden für $l \rightarrow \infty$ wie $1/l$. Die Beiträge großer Drehimpulse zum totalen Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\text{tot}} \sim \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l$ verschwinden also auch nur wie $l/l^2 = 1/l$ und die Reihe *divergiert*. Das liegt daran, dass das Potential $\sim C/r^2$ langreichweitig ist. $f(\vartheta)$ und damit $d\sigma/d\Omega$ sind jedoch wohldefiniert, wemgleich die l -Reihe sehr langsam konvergiert.

4.2.1 Streupotentiale mit endlichem Träger

Weitere Erkenntnisse lassen sich für den Fall von Zentralpotentialen mit

$$V(r) = 0 \quad \forall r > a \quad (4.91)$$

gewinnen, deren Träger also eine Kugel mit endlichem Radius ist. In diesem Fall konvergieren auch alle auftretenden l -Reihen.



Es sei

$$v(r) := \frac{2m}{\hbar^2} V(r), \quad (4.92)$$

also

$$v_{\text{eff}} = v(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (4.93)$$

Wir wollen die Gleichung

$$u_l''(r) + \left[k^2 - v(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (4.94)$$

mit den Randbedingungen

$$u_l(0) = 0, \quad (4.95)$$

damit $\psi(\mathbf{r})$ bei $\mathbf{r} = 0$ beschränkt ist, und

$$u_l(r) \cong \frac{2l+1}{k} i^l e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right) \quad \text{für große } r \quad (4.96)$$

(exakte asymptotische Form) lösen. Für $r > a$ haben wir die Besselsche Differentialgleichung

$$u_l''(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (4.97)$$

mit der allgemeinen Lösung (s. o.)

$$u_l(r) = \alpha_l^+ \sqrt{r} H_{l+1/2}^+(kr) + \alpha_l^- \sqrt{r} H_{l+1/2}^-(kr). \quad (4.98)$$

Für unseren Fall ist aber eine andere Darstellung günstiger:

$$u_l(r) = \beta_l^{(1)} r j_l(kr) + \beta_l^{(2)} r y_l(kr), \quad (4.99)$$

wobei

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x), \quad y_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{l+1/2}(x) \quad (4.100)$$

sphärische Bessel-Funktionen erster bzw. zweiter Art sind. Diese sind für $l = 0, 1, 2, \dots$ durch *elementare* Funktionen darstellbar:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad (4.101)$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^2}, \quad (4.102)$$

$$j_2(x) = \frac{(3-x^2)\sin x - 3x\cos x}{x^3}, \quad (4.103)$$

$$y_0(x) = -\frac{\cos x}{x}, \quad (4.104)$$

$$y_1(x) = -\frac{\cos x + x\sin x}{x^2}, \quad (4.105)$$

$$y_2(x) = -\frac{(3-x^2)\cos x + 3x\sin x}{x^3}, \quad (4.106)$$

Die Funktionen $j_l(x)$ sind alle für $x \rightarrow 0$ endlich (hebbare Singularität), die Funktionen $y_l(x)$ haben dort jedoch einen Pol.

Für große x gilt

$$j_l(x) \cong \frac{\sin\left(x - \frac{\pi}{2}l\right)}{x}, \quad (4.107)$$

$$y_l(x) \cong -\frac{\cos\left(x - \frac{\pi}{2}l\right)}{x}, \quad (4.108)$$

also

$$u_l(r) \cong \frac{1}{k} \left[\beta_l^{(1)} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) - \beta_l^{(2)} \cos\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) \right]. \quad (4.109)$$

Um die Randbedingungen (4.96) zu erfüllen, setzen wir

$$\beta_l^{(1)} = \beta_l \cos \delta_l, \quad (4.110)$$

$$\beta_l^{(2)} = -\beta_l \sin \delta_l, \quad (4.111)$$

denn dann folgt

$$\begin{aligned} u_l(r) &\cong \frac{\beta_l}{k} \left[\cos \delta_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) + \sin \delta_l \cos\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) \right] \\ &= \frac{\beta_l}{k} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right) \stackrel{!}{=} \frac{2l+1}{k} i^l e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right). \end{aligned} \quad (4.112)$$

Daher muss gelten

$$\beta_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}. \quad (4.113)$$

Die Lösung für $r > a$ lautet also

$$u_l(r) = (2l+1) i^l e^{i\delta_l} r \left[\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l y_l(kr) \right]. \quad (4.114)$$

Sie ist exakt, enthält aber noch die unbekanntten Streuphasen δ_l .

Somit haben wir für $0 \leq r \leq a$ zu lösen

$$u_l''(r) + \left[k^2 - v(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (4.115)$$

mit den Randbedingungen

$$u_l(0) = 0, \quad (4.116)$$

$$u_l(a) = (2l+1) i^l e^{i\delta_l} a \left[\cos \delta_l j_l(ka) - \sin \delta_l y_l(ka) \right], \quad (4.117)$$

$$u_l'(a) = \frac{d}{dr} \left((2l+1) i^l e^{i\delta_l} r \left[\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l y_l(kr) \right] \right) \Big|_{r=a}$$

$$= \frac{2l+1}{2} i^l e^{i\delta_l} \left\{ \cos \delta_l [ka j_{l-1}(ka) + j_l(ka) - ka j_{l+1}(ka)] - \sin \delta_l [ka y_{l-1}(ka) + y_l(ka) - ka y_{l+1}(ka)] \right\}, \quad (4.118)$$

unter Verwendung von Identitäten für sphärische Bessel-Funktionen. Drei Randbedingungen überbestimmen die Lösung der Differentialgleichung, die ja von zweiter Ordnung ist. Die zusätzliche Gleichung legt die noch unbestimmte Streuphase δ_l fest.

Wir betrachten zunächst den Spezialfall $l = 0$ (s -Wellen-Streuung). Hier ist einfach

$$u_0''(r) + [k^2 - v(r)]u_0(r) = 0 \quad (4.119)$$

mit

$$u_0(0) = 0, \quad (4.120)$$

$$u_0(a) = e^{i\delta_0} a \left(\cos \delta_0 \frac{\sin ka}{ka} + \sin \delta_0 \frac{\cos ka}{ka} \right) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin(ka + \delta_0), \quad (4.121)$$

$$u_0'(a) = \frac{d}{dr} \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin(ka + \delta_0) \Big|_{r=a} = e^{i\delta_0} \cos(ka + \delta_0). \quad (4.122)$$

Es folgt

$$\frac{u_0(a)}{u_0'(a)} = \frac{1}{k} \tan(ka + \delta_0) \quad (4.123)$$

$$\Rightarrow \delta_0 = -ka + \arctan \frac{k u_0(a)}{u_0'(a)} + \nu\pi = -ka + \arctan \frac{k}{\frac{d}{dr} \ln u_0(r) \Big|_{r=a}} + \nu\pi \quad (4.124)$$

mit $\nu \in \mathbb{Z}$. Beachte, dass wir hiermit die Lösung für δ_0 nur modulo π bestimmt haben. Wir hatten aber oben schon gesehen, dass sich $f(\vartheta)$ bei einer Verschiebung $\delta_l \rightarrow \delta_l + \pi$ für irgendwelche l nicht ändert. Wir können also $\nu = 0$ setzen. Explizite Berechnung von δ_0 erfordert natürlich die Lösung der Differentialgleichung für ein konkretes Potential $v(r)$.

Für $l > 0$ ist die allgemeine Rechnung mühsam und wir betrachten nur zwei Grenzfälle:

- $0 < l \ll ka$: Wir können die asymptotische Form der sphärischen Bessel-Funktionen für große Argumente verwenden und erhalten, analog zum Fall $l = 0$,

$$\begin{aligned} u_l(a) &\cong (2l+1) i^l e^{i\delta_l} a \left[\cos \delta_l \frac{\sin \left(ka - \frac{\pi}{2}l\right)}{ka} + \sin \delta_l \frac{\cos \left(ka - \frac{\pi}{2}l\right)}{ka} \right] \\ &= \frac{2l+1}{k} i^l e^{i\delta_l} \sin \left(ka - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right), \end{aligned} \quad (4.125)$$

$$u_l'(a) \cong (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \cos \left(ka - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right), \quad (4.126)$$

also (wieder modulo π)

$$\delta_l \cong \frac{\pi}{2}l - ka + \arctan \frac{k u_l(a)}{u_l'(a)} = \frac{\pi}{2}l - ka + \arctan \frac{k}{\frac{d}{dr} \ln u_l(r) \Big|_{r=a}}. \quad (4.127)$$

- $l \gg ka$: Hier können wir die asymptotische Form für *kleine* Argumente verwenden, diese lautet

$$j_l(x) \cong \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad (4.128)$$

$$y_l(x) \cong -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad (4.129)$$

wobei die Doppelfakultät für ungerades n definiert ist durch

$$n!! := 1 \times 3 \times 5 \times \cdots \times n. \quad (4.130)$$

Damit ist

$$u_l(a) \cong (2l+1) i^l e^{i\delta_l} a \left[\cos \delta_l \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} + \sin \delta_l \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \right], \quad (4.131)$$

$$u'_l(a) \cong (2l+1) i^l e^{i\delta_l} ka \left[l \cos \delta_l \frac{(ka)^{l-1}}{(2l+1)!!} - (l+1) \sin \delta_l \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+2}} \right]. \quad (4.132)$$

Es folgt

$$\frac{u_l(a)}{u'_l(a)} \cong \frac{1}{k} \frac{\cos \delta_l \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} + \sin \delta_l \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}}}{l \cos \delta_l \frac{(ka)^{l-1}}{(2l+1)!!} - (l+1) \sin \delta_l \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+2}}} = a \frac{\frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} + \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \tan \delta_l}{l \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} - (l+1) \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \tan \delta_l} \quad (4.133)$$

$$\Rightarrow \tan \delta_l \cong \frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!! (2l-1)!!} \frac{l \frac{u_l(a)}{u'_l(a)} - a}{(l+1) \frac{u_l(a)}{u'_l(a)} + a}. \quad (4.134)$$

Für ein nicht speziell gewähltes Potential $v(r)$ erwarten wir

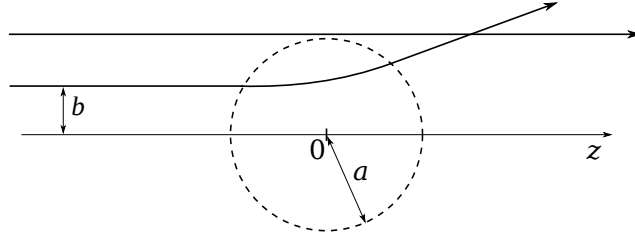
$$\frac{u_l(a)}{u'_l(a)} \cong \mathcal{O}(a) \quad (4.135)$$

und der zweite Faktor auf der rechten Seite ist nicht besonders groß. Der erste Faktor ist jedoch sehr klein für $l \gg ka$. Für $l \gg 1$ ergibt sich dies mittels der Stirling-Formel:

$$\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!! (2l-1)!!} \cong \frac{(ka)^{2l+1}}{\sqrt{2} \left(\frac{2(l+1)}{e}\right)^{l+1} \sqrt{2} \left(\frac{2l}{e}\right)^l} = \frac{1}{2} \left(\frac{eka}{2}\right)^{2l+1} \frac{1}{(l+1)^{l+1} l} \cong \frac{1}{2} \left(\frac{e}{2} \frac{ka}{l}\right)^{2l+1}. \quad (4.136)$$

Das ist wegen $l \gg ka$ klein fällt als Funktion von l schnell ab. Gilt andererseits *nicht* $l \gg 1$, aber weiterhin $l \gg ka$, so muss $ka \ll 1$ sein. Dann ist der Faktor offensichtlich klein für alle l .

Damit wird $\tan \delta_l$ und auch δ_l sehr klein – die Streuung in Kanäle $l \gg ka$ ist *stark unterdrückt*. Im Spezialfall $ka \ll 1$ sind das alle l bis auf $l = 0$ (*s*-Wellen-Streuung). Das ist im Rahmen der klassischen Mechanik verständlich: Klassisch können nur Massenpunkte mit Stoßparametern $b \leq a$ gestreut werden.



Sie haben den (erhaltenen) Drehimpuls $L = bp = b\hbar k$. Der maximale Drehimpuls von Teilchen, die klassisch gestreut werden, ergibt sich für $b = a$, er beträgt

$$L_{\max} = \hbar ka. \quad (4.137)$$

Solange die klassische Näherung gerechtfertigt ist, sollte also die Streuung für

$$l \gtrsim \frac{L_{\max}}{\hbar} = ka \quad (4.138)$$

unterdrückt sein.

Als Beispiel betrachten wir die quantenmechanische *Streuung an einer harten Kugel*. Wir erhalten diesen Spezialfall durch den Grenzübergang

$$v(r) \rightarrow \infty \quad \text{für } r < a. \quad (4.139)$$

Dies können wir praktischer durch die neue Randbedingung

$$u_l(a) = 0 \quad (4.140)$$

ausdrücken. Wir hatten jedoch schon eine Randbedingung für $u_l(a)$, aufgrund unserer Lösung für $r > a$:

$$u_l(a) = (2l + 1) i^l e^{i\delta_l} a [\cos \delta_l j_l(ka) - \sin \delta_l y_l(ka)]. \quad (4.141)$$

Es folgt eine Bestimmungsgleichung für die Streuphase:

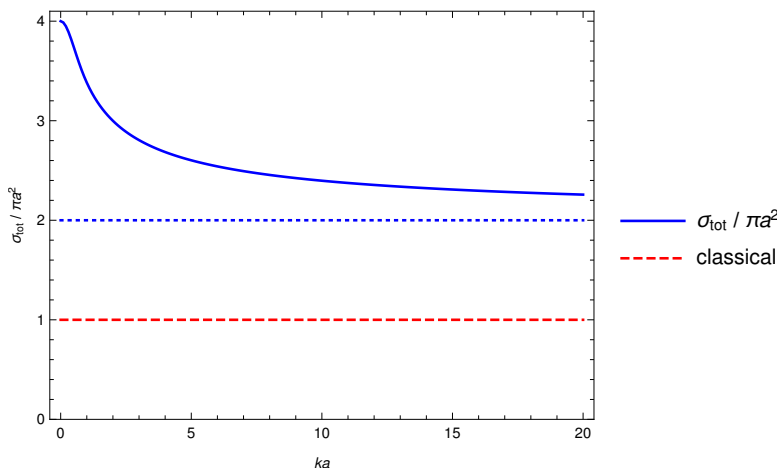
$$\cos \delta_l j_l(ka) - \sin \delta_l y_l(ka) = 0 \quad (4.142)$$

$$\Rightarrow \quad \tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{y_l(ka)} \quad (4.143)$$

$$\Rightarrow \quad \delta_l = \arctan \frac{j_l(ka)}{y_l(ka)} + \nu\pi, \quad \nu \in \mathbb{Z}. \quad (4.144)$$

Damit ist das Problem i. W. gelöst. Wir erhalten den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}} &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) \frac{j_l^2(ka)}{y_l^2(ka) + j_l^2(ka)}. \end{aligned} \quad (4.145)$$



Nun ist $\lambda = 2\pi/k$ die de-Broglie-Wellenlänge der Streuteilchen. Wir betrachten zwei Grenzfälle:

- $ka \ll 1$, also $\lambda \gg a$: Wir spalten den Beitrag für $l = 0$ ab und verwenden für die übrigen die Näherung für kleine Argumente,

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}} &= \frac{4\pi}{k^2} \frac{j_0^2(ka)}{y_0^2(ka) + j_0^2(ka)} + \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l + 1) \frac{(ka)^{2l}}{\frac{(2l+1)!!^2}{(ka)^{2l+2}}} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \frac{\sin^2 ka}{\cos^2 ka + \sin^2 ka} + \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(ka)^{4l+2}}{(2l+1)(2l-1)!!^4} \end{aligned}$$

$$\cong \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 ka + \frac{1}{k^2} \mathcal{O}(ka)^6. \quad (4.146)$$

Bis auf Korrekturen höherer Ordnung ist also

$$\sigma_{\text{tot}} \cong \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 ka \cong 4\pi a^2, \quad (4.147)$$

das ist die *vierfache* Querschnittsfläche der Kugel. Außerdem liegt praktisch *reine s-Wellen-Streuung* ($l = 0$) vor.

- $ka \gg 1$, also $\lambda \ll a$: Naiv könnten wir die Näherung für große Argumente verwenden:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{\sin^2 \left(ka - \frac{\pi}{2}l\right)}{\cos^2 \left(ka - \frac{\pi}{2}l\right) + \sin^2 \left(ka - \frac{\pi}{2}l\right)} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \left(ka - \frac{\pi}{2}l\right). \quad (4.148)$$

Diese Reihe divergiert. Wir haben aber einen Fehler gemacht: Die Näherung für große ka gilt nicht mehr, wenn $l \gtrsim ka$ ist.

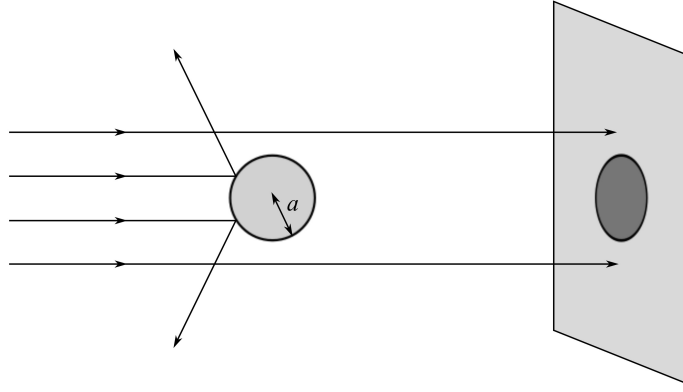
Eine bessere Näherung erhalten wir, wenn wir beachten, dass $\lambda \ll a$ gerade den *klassischen Grenzfall* beschreibt. Daher sollten, wie oben gesehen, nur Drehimpulsquantenzahlen $l \lesssim ka$ beitragen. Sei l_{max} der ganzzahlige Anteil von ka , dann erhalten wir die Abschätzung

$$\sigma_{\text{tot}} \cong \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} (2l+1) \sin^2 \left(ka - \frac{\pi}{2}l\right). \quad (4.149)$$

Wir fassen die l -Terme paarweise zusammen (da $l_{\text{max}} \gg 1$ macht es nur einen vernachlässigbaren Unterschied, ob l_{max} gerade oder ungerade ist),

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}} &\cong \frac{4\pi}{k^2} \sum_{n=0}^{(l_{\text{max}}-1)/2} \left[(4n+1) \sin^2(ka - \pi n) + (4n+2) \sin^2 \left(ka - \pi n - \frac{\pi}{2}\right) \right] \quad \left| \text{wobei } l = 2n \right. \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{n=0}^{(l_{\text{max}}-1)/2} \left[(4n+1) \sin^2 ka + (4n+2) \cos^2 ka \right] \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \underbrace{\sum_{n=0}^{(l_{\text{max}}-1)/2} (4n+1)}_{\mathcal{O}(l_{\text{max}}^2)} + \frac{4\pi}{k^2} \cos^2 ka \underbrace{\sum_{n=0}^{(l_{\text{max}}-1)/2} 1}_{\mathcal{O}(l_{\text{max}})} \cong \frac{16\pi}{k^2} \sum_{n=0}^{(l_{\text{max}}-1)/2} n \\ &= \frac{16\pi}{k^2} \frac{\frac{l_{\text{max}}-1}{2} \left(\frac{l_{\text{max}}-1}{2} + 1\right)}{2} \cong \frac{2\pi}{k^2} l_{\text{max}}^2 \cong 2\pi a^2. \end{aligned} \quad (4.150)$$

Dieses Ergebnis ist *doppelt so groß* wie die Querschnittsfläche. Klassisch berechnet man als totalen Wirkungsquerschnitt aber genau πa^2 . Wieso ist das quantenmechanische Ergebnis im klassischen Limes $\lambda \ll a$ doppelt so groß? Das liegt daran, dass auch für $\lambda \ll a$ die Wellennatur von $\psi(\mathbf{r})$ nicht vernachlässigt werden kann. Tatsächlich ist die Situation analog zur Lichtstreuung an einer perfekt reflektierenden Kugel. Eine Analyse des differentiellen Wirkungsquerschnittes $d\sigma/d\Omega$ zeigt, dass zu $\sigma_{\text{tot}} = 2\pi a^2$ zwei sehr unterschiedliche Effekte beitragen: einerseits isotrope *Reflexion*, die den klassischen, mechanischen Beitrag πa^2 liefert, und andererseits *Beugung*, die stark anisotrop ist und ebenfalls πa^2 zu σ_{tot} beiträgt. Der Beitrag der Beugung ist groß in Vorwärtsrichtung, was vom Optischen Theorem erzwungen wird: Im $f(\vartheta = 0) = (k/4\pi) \sigma_{\text{tot}} \cong ka^2/2 \gg a$. Diese Vorwärtsstreuung führt im klassischen Grenzfall zur totalen Auslöschung der Wellenfunktion im Schatten der Kugel durch destruktive Interferenz mit der Primärwelle. Daher kann man die Vorwärtsstreuung, und damit den resultierenden Zusatzbeitrag πa^2 zu σ_{tot} , im klassischen Grenzfall als Ausdruck der *Ab-schattung* deuten. Beachte auch, dass in σ_{tot} nur $|f(\vartheta)|^2$ eingeht – negative Beiträge zum Strom, wie in Vorwärtsrichtung, tragen positiv zum totalen Wirkungsquerschnitt bei.



4.2.2 Resonanzstreuung

Die Diskussion im vorigen Abschnitt legt nahe, dass für ein Streupotential begrenzter Reichweite a die Streuung in Kanäle mit $l \gtrsim ka$ unterdrückt ist. Für $l \lesssim ka$ ist die Streuung i. A. stark und die Streuphase δ_l hängt vom spezifischen Potential $v(r)$ ab. Die s -Wellen-Streuung ($l = 0$) ist natürlich immer in diesem Regime. Die Schlussfolgerung, dass die Streuung für $l \gtrsim ka$ schwach ist, gilt aber nicht immer, wie wir im Folgenden zeigen.

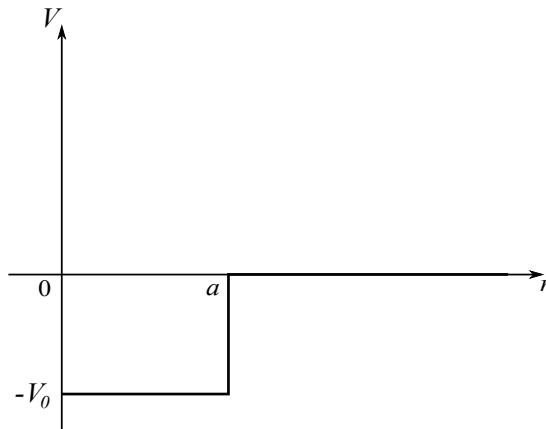
Wir betrachten der Einfachheit halber die Streuung *langsamer*, d. h. energieärmer, Teilchen. Dann ist $ka \ll 1$. Darüberhinaus beschränken wir uns auf die Streuung an einem *sphärischen Potentialtopf*,

$$V(r) = -V_0 \Theta(a - r), \quad (4.151)$$

$$v(r) = -v_0 \Theta(a - r) \quad (4.152)$$

mit

$$v_0 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 > 0. \quad (4.153)$$



Zunächst untersuchen wir die s -Wellen-Streuung: Für $l = 0$ und $r \leq a$ haben wir zu lösen

$$u_0''(r) + (k^2 + v_0) u_0(r) = 0 \quad (4.154)$$

mit $u_0(0) = 0$. Die Lösung ist

$$u_0(r) = \underbrace{c_0}_{\text{Normierungsfaktor}} \sin(\sqrt{k^2 + v_0} r) =: c_0 \sin \kappa r. \quad (4.155)$$

Wir kennen bereits [siehe Gl. (4.124)]

$$\delta_0 = -ka + \arctan \frac{k u_0(a)}{u_0'(a)} + \nu\pi = -ka + \arctan \frac{k \sin \kappa a}{\kappa \cos \kappa a} + \nu\pi$$

$$= -ka + \arctan\left(\frac{k}{\kappa} \tan \kappa a\right) + \nu\pi \quad (4.156)$$

mit $\nu \in \mathbb{Z}$. Wir definieren die *Streulänge*

$$a_S := a \left[1 - \frac{1}{ka} \arctan\left(ka \frac{\tan \kappa a}{\kappa a}\right) \right], \quad (4.157)$$

so dass gilt

$$\delta_0 = -ka_S + \nu\pi. \quad (4.158)$$

Außer sehr nah an den Polen des Tangens ist das Argument des Arcustangens wegen $ka \ll 1$ klein und wir erhalten

$$a_S \cong a \left(1 - \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} \right). \quad (4.159)$$

Der Beitrag von $l = 0$ (s -Welle) zum totalen Wirkungsquerschnitt ist dann

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 ka_S \cong 4\pi a_S^2. \quad (4.160)$$

Die Näherung im letzten Schritt gilt wieder überall, außer in der Nähe der Pole des Tangens.

Hat $\tan \kappa a = \tan \sqrt{k^2 + v_0} a$ dagegen einen Pol bei $k = k_p$, so gilt

$$\begin{aligned} a_S &\cong a \left[1 - \frac{1}{k_p a} \arctan\left(\frac{k_p a}{\sqrt{k_p^2 + v_0} a} \frac{-1}{\sqrt{k^2 + v_0} a - \sqrt{k_p^2 + v_0} a}\right) \right] \\ &= a \left[1 + \frac{1}{k_p a} \arctan\left(\frac{k_p a}{\sqrt{k_p^2 + v_0} a} \frac{1}{\sqrt{k^2 + v_0} a - \sqrt{k_p^2 + v_0} a}\right) \right] \\ &\cong a \left[1 + \frac{1}{k_p a} \frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}\left(\sqrt{k^2 + v_0} a - \sqrt{k_p^2 + v_0} a\right) \right] = a \left[1 + \frac{\pi}{2k_p a} \operatorname{sgn}(k - k_p) \right]. \end{aligned} \quad (4.161)$$

Da $k_p a \ll 1$ gilt, folgt

$$a_S \cong \frac{\pi}{2k_p} \operatorname{sgn}(k - k_p) \quad (4.162)$$

und der Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt ist

$$\sigma_0 \cong \frac{4\pi}{k_p^2} \sin^2 k_p a_S \cong \frac{4\pi}{k_p^2}. \quad (4.163)$$

Dieser Beitrag ist endlich, aber groß gegenüber $4\pi a^2$. [Wegen $k_p^2 \cong \pi^2/4a_S^2$ gemäß Gl. (4.162) lässt er sich auch als $\sigma_0 \cong (16/\pi) a_S^2$ schreiben. Dies ist kleiner als das generische Ergebnis $4\pi a_S^2$ aus Gl. (4.160), aber a_S selbst ist jetzt groß.]

Uns interessiert hier aber vor allem der Fall $l \geq 1$. Hier müssen wir lösen

$$u_l''(r) + \left[k^2 + v_0 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (4.164)$$

mit $u_l(0) = 0$. Die allgemeine Lösung lautet, wie bekannt,

$$u_l(r) = \beta_l^{(1)} r j_l(\kappa r) + \beta_l^{(2)} r y_l(\kappa r). \quad (4.165)$$

Jedoch divergieren die Funktionen $y_l(x)$ für $x \rightarrow 0$ wie $1/x^{l+1}$. Die Randbedingung $u_l(0) = 0$ erfordert daher $\beta_l^{(2)} = 0$ und wir erhalten

$$u_l(r) = \beta_l^{(1)} r j_l(\kappa r). \quad (4.166)$$

Für $ka \ll 1$ gilt offensichtlich auch $ka \ll l \forall l \geq 1$. Für diesen Fall hatten wir schon gefunden [siehe Gl. (4.134)]

$$\tan \delta_l \cong \frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{l \frac{u_l(a)}{u_l'(a)} - a}{(l+1) \frac{u_l(a)}{u_l'(a)} + a} = \frac{(2l+1)(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!^2} \frac{l u_l(a) - a u_l'(a)}{(l+1) u_l(a) + a u_l'(a)}. \quad (4.167)$$

Also erhalten wir durch Einsetzen

$$\begin{aligned} \tan \delta_l &\cong \frac{(2l+1)(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!^2} \frac{la j_l(\kappa a) - a j_l(\kappa a) - a^2 \kappa j_l'(\kappa a)}{(l+1)a j_l(\kappa a) + a j_l(\kappa a) + a^2 \kappa j_l'(\kappa a)} \\ &= \frac{(2l+1)(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!^2} \frac{(l-1) j_l(\kappa a) - \kappa a j_l'(\kappa a)}{(l+2) j_l(\kappa a) + \kappa a j_l'(\kappa a)}. \end{aligned} \quad (4.168)$$

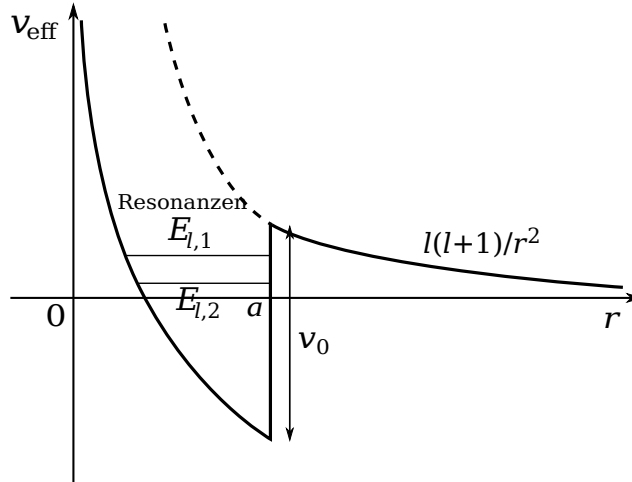
Falls der Nenner nicht aufgrund einer speziellen Wahl von $\kappa a = \sqrt{k^2 + v_0} a$ klein oder sogar Null ist, ist der gesamte Ausdruck wegen des Faktors $(ka)^{2l+1}$ sehr klein und δ_l ist damit ebenfalls sehr klein. Das ist der Fall, den wir oben schon betrachtet haben. Dieses Argument für eine kleine Streuphase δ_l bricht jedoch in der Umgebung der Nullstellen des Nenners zusammen. Diese treten für $k = k_{l,i}$, $i = 1, 2, \dots$ mit

$$(l+2) j_l\left(\sqrt{k_{l,i}^2 + v_0} a\right) + \sqrt{k_{l,i}^2 + v_0} a j_l'\left(\sqrt{k_{l,i}^2 + v_0} a\right) = 0 \quad (4.169)$$

auf, also für Energien $E = E_{l,i} = \hbar^2 k_{l,i}^2 / 2m$. Hier divergiert $\tan \delta_l$ und es folgt $\delta_l = \pi/2 + \nu\pi$, $\nu \in \mathbb{Z}$. Damit ist der Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_l(k = k_{l,i}) = \frac{4\pi}{k_{l,i}^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{k_{l,i}^2} (2l+1) \quad (4.170)$$

Dies ist i. A. groß im Vergleich zur s -Wellen-Streuung σ_0 (beachte $k_{l,i} \ll 1/a$). Diese Erhöhung der Streuung für bestimmte Energien und Drehimpulse $l \geq 1$ nennt man *Resonanzstreuung*. Die physikalische Ursache ist die Kopplung der Streuzustände an *metastabile Zustände* (Resonanzen) im effektiven Potential $v_{\text{eff}}(r) = v(r) + l(l+1)/r^2$. Metastabile Zustände treten auf, wenn der auslaufende und der am Potential – in unserem Beispiel an der Stufe bei $r = a$ – reflektierte Anteil der Wellenfunktion konstruktiv interferieren.



Ein Streuteilchen kann für eine beträchtliche (aber endliche) Zeit im Potentialtopf in einem Drehimpuls- l -Zustand gefangen werden, daher wird die Streuung sehr stark. Eine detailliertere Untersuchung zeigt, dass die Breite ΔE der Streuresonanz in der Energie über $\tau \approx \hbar/\Delta E$ mit der Lebensdauer τ des metastabilen Zustands zusammenhängt. Resonanzstreuung ist z. B. bei der Streuung von Neutronen an Atomkernen zu beobachten.

4.2.3 Integraldarstellung der Streuphasen und Bornsche Näherung

Die bisher besprochenen Methoden erfordern die analytische oder numerische Lösung der Radialgleichungen für $u_l(r)$, um die Streuphasen zu berechnen. Der Zusammenhang ist durch die asymptotische Form in Gl. (4.62) gegeben. In diesem Abschnitt besprechen wir eine explizite Darstellung der Streuphasen durch das Streupotential $v(r)$, die ohne die Bestimmung der Radialfunktionen $u_l(r)$ auskommt. Die Darstellung gilt allerdings nur dann, wenn $v(r)$ als kleine Störung behandelt werden kann.

Wir starten von der bekannten Gleichung

$$u_l''(r) + \left[k^2 + v(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (4.171)$$

mit der Randbedingung $u_l(0) = 0$. Analog erfüllt die freie Lösung (Partialwelle der Primärwelle) $u_l^{(0)}(r)$ die Gleichung

$$u_l^{(0)''}(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l^{(0)}(r) = 0 \quad (4.172)$$

mit $u_l^{(0)}(0) = 0$. Wir multiplizieren Gl. (4.171) mit $u_l^{(0)}(r)$, Gl. (4.172) mit $u_l(r)$, ziehen die Ergebnisse voneinander ab und integrieren über $[0, \infty[$:

$$\int_0^\infty dr [u_l^{(0)}(r) u_l''(r) - u_l(r) u_l^{(0)''}(r) - v(r) u_l^{(0)}(r) u_l(r)] = 0 \quad (4.173)$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty dr [u_l^{(0)}(r) u_l''(r) - u_l(r) u_l^{(0)''}(r)] = \int_0^\infty dr v(r) u_l^{(0)}(r) u_l(r). \quad (4.174)$$

Auf der *rechten Seite* setzen wir die explizit bekannte Lösung für $u_l^{(0)}(r)$ ein und erhalten

$$\dots = i^l (2l+1) \int_0^\infty dr v(r) r j_l(kr) u_l(r), \quad (4.175)$$

der hier verwendete Normierungsfaktor ist so gewählt, dass $u_l(r) \rightarrow u_l^{(0)}(r)$ für $v(r) \rightarrow 0 \forall r$. Die *linke Seite* lässt sich partiell integrieren:

$$\begin{aligned} \dots &= [u_l^{(0)}(r) u_l'(r) - u_l(r) u_l^{(0)'}(r)]_0^\infty - \int_0^\infty dr \underbrace{[u_l^{(0)'}(r) u_l'(r) - u_l'(r) u_l^{(0)'}(r)]}_{=0} \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} [u_l^{(0)}(r) u_l'(r) - u_l(r) u_l^{(0)'}(r)]. \end{aligned} \quad (4.176)$$

Wir setzen nun die asymptotischen Formen von $u_l(r)$ und $u_l^{(0)}(r)$ für große r ein:

$$\begin{aligned} \dots &= \frac{(2l+1)^2}{k^2} i^{2l} \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\sin \left(kr - \frac{\pi}{2} l \right) e^{i\delta_l} k \cos \left(kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l \right) - e^{i\delta_l} \sin \left(kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l \right) k \cos \left(kr - \frac{\pi}{2} l \right) \right] \\ &= \frac{(2l+1)^2}{k} i^{2l} e^{i\delta_l} \sin(-\delta_l) = -i^{2l} \frac{(2l+1)^2}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l. \end{aligned} \quad (4.177)$$

Insgesamt erhalten wir also

$$i^l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l = - \int_0^\infty dr v(r) k r j_l(kr) u_l(r). \quad (4.178)$$

Diese Gleichung ist exakt. Sie ergibt offensichtlich $\delta_l = 0$ für $v \equiv 0$. Für von Null verschiedenes Potential ist die Gleichung für die *exakte* Lösung des Streuproblems aber nicht besonders nützlich, da sie auf der rechten Seite die *unbekannte* Funktion $u_l(r)$ enthält, und zwar für alle r , nicht nur für große r .

Ist das Potential jedoch *hinreichend schwach*, so erhalten wir

$$u_l(r) \cong u_l^{(0)}(r) + \mathcal{O}(v), \quad (4.179)$$

$$\delta_l \cong \mathcal{O}(v), \quad (4.180)$$

was im Nachhinein zu überprüfen ist. Dann können wir in führender Ordnung in v die linke Seite von Gl. (4.178) entwickeln,

$$e^{i\delta_l} \sin \delta_l \cong \delta_l + \mathcal{O}(\delta_l^2), \quad (4.181)$$

und auf der rechten Seite $u_l(r)$ durch $u_l^{(0)}(r)$ ersetzen, da der Ausdruck schon explizit von erster Ordnung in v ist. Damit wird

$$\begin{aligned} \delta_l &\cong -i^{-l} \frac{1}{2l+1} \int_0^\infty dr v(r) kr j_l(kr) u_l^{(0)}(r) \\ &= -i^{-l} \frac{1}{2l+1} \int_0^\infty dr v(r) kr j_l(kr) \cancel{(2l+1)} r j_l(kr) \\ &= -\frac{1}{k} \int_0^\infty dr v(r) [kr j_l(kr)]^2. \end{aligned} \quad (4.182)$$

Dies nennt man die *Bornsche Näherung* für die Streuphasen. Sie ergibt einen expliziten Ausdruck für δ_l . Wir sehen, dass δ_l wie angenommen von erster Ordnung in v ist. Eine besonders einfache Form ergibt sich für s -Wellen-Streuung, da exakt $j_0(x) = \sin x/x$ gilt:

$$\delta_0 \cong -\frac{1}{k} \int_0^\infty dr v(r) \sin^2 kr. \quad (4.183)$$

4.3 Coulomb-Streuung

Hier kommen wir zur Streuung an einem Coulomb-Potential, das bisher ausgeschlossen werden musste, weil es zu langsam abfällt. Die Ideen der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen und der Streuphasen lassen sich aber auf diesen Fall erweitern. Wir werden sehen, dass das sehr langreichweitige Coulomb-Potential den Streuzustand auch weit entfernt vom Streuzentrum beeinflusst, was nicht überraschend ist. Als Anwendung leiten wir die Rutherford'sche Streuformel quantenmechanisch her.

Die offensichtlich wichtige Streuung an einem Coulomb-Potential erfüllt nicht die bisher gestellte Bedingung

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.184)$$

Daher lautet die asymptotische Form der Wellenfunktion für große r *nicht*

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (4.185)$$

wie wir jetzt zeigen werden. Die Schrödinger-Gleichung lautet (in SI-Einheiten)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (4.186)$$

mit den Ladungen q_1, q_2 von Streuteilchen und Streuzentrum. Wir definieren $k := \sqrt{2mE}/\hbar$ und

$$\gamma := \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{m}{\hbar^2 k}. \quad (4.187)$$

Damit lautet das Potential

$$V(r) = \frac{\gamma \hbar^2 k}{m} \frac{1}{r} \quad (4.188)$$

bzw.

$$v(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) = \frac{2\gamma k}{r}. \quad (4.189)$$

Die Schrödinger-Gleichung lässt sich nun schreiben als

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \left(k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.190)$$

Physikalische Lösungen müssen – trotz des Pols des Coulomb-Potentials – am Ursprung $\mathbf{r} = 0$ regulär sein. Die Schrödinger-Gleichung kann man mit dem Ansatz

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} g(r - z) \quad (4.191)$$

lösen, wobei die spezielle Wahl des Koordinatensystems einem entlang der negativen z -Achse einlaufenden Teilchenstrahl entspricht. Das Argument der unbekannteten Funktion g ist etwas ungewöhnlich: $r - z \equiv \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - z \equiv r(1 - \cos \vartheta)$. Einsetzen in the Schrödinger-Gleichung ergibt

$$\nabla^2 e^{ikz} g(r - z) + \left(k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right) e^{ikz} g(r - z) = 0. \quad (4.192)$$

Wir benötigen

$$\nabla e^{ikz} = ik \hat{\mathbf{z}} e^{ikz}, \quad (4.193)$$

$$\nabla^2 e^{ikz} = -k^2 e^{ikz} \quad (4.194)$$

sowie

$$\nabla g(r - z) = g'(r - z) (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) = (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) g'(r - z), \quad (4.195)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 g(r - z) &= \nabla \cdot [(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) g'(r - z)] = \underbrace{[\nabla \cdot (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}})]}_{= \nabla \cdot \hat{\mathbf{r}} = \nabla \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{2}{r}} g'(r - z) + (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) \cdot (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) g''(r - z). \end{aligned} \quad (4.196)$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} & \cancel{-k^2 e^{ikz} g(r - z)} + 2ik \hat{\mathbf{z}} e^{ikz} \cdot (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) g'(r - z) + \frac{2}{r} e^{ikz} g'(r - z) + (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) \cdot (\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}}) e^{ikz} g''(r - z) \\ & + \left(k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right) e^{ikz} g(r - z) = 0. \end{aligned} \quad (4.197)$$

Division durch e^{ikz} ergibt, unter Verwendung von $\hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \cos \vartheta = z/r$,

$$\begin{aligned} & 2ik \left(\frac{z}{r} - 1 \right) g'(r - z) + \frac{2}{r} g'(r - z) + 2 \left(1 - \frac{z}{r} \right) g''(r - z) - \frac{2\gamma k}{r} g(r - z) \\ & = 2 \left(1 - \frac{z}{r} \right) g''(r - z) + 2 \frac{ikz - ikr + 1}{r} g'(r - z) - \frac{2\gamma k}{r} g(r - z). \end{aligned} \quad (4.198)$$

Multiplikation mit $r/2$ ergibt

$$(r - z) g''(r - z) + (ikz - ikr + 1) g'(r - z) - \gamma k g(r - z) = 0. \quad (4.199)$$

Mit $\zeta := ik(r - z)$ erhalten wir

$$ik\zeta \frac{d^2 g}{d\zeta^2} + ik(1 - \zeta) \frac{dg}{d\zeta} - \gamma k g = 0 \quad (4.200)$$

$$\Rightarrow \zeta \frac{d^2 g}{d\zeta^2} + (1 - \zeta) \frac{dg}{d\zeta} + i\gamma g = 0. \quad (4.201)$$

Dies ist eine sogenannte *Kummersche Differentialgleichung*. Die allgemeine Lösung lautet

$$g(\zeta) = c_1 M(-i\gamma, 1, \zeta) + c_2 U(-i\gamma, 1, \zeta), \quad (4.202)$$

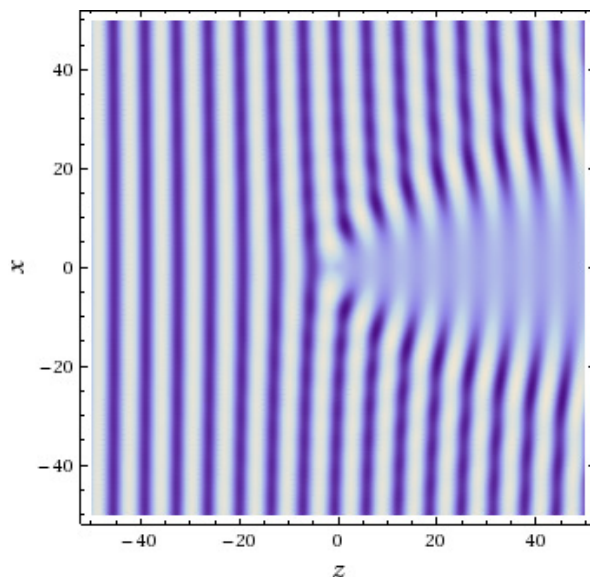
wobei M und U *konfluent hypergeometrische Funktionen* (oder *Kummersche Funktionen*) sind. Die Funktion U ist jedoch nicht regulär; sie hat einen Schnitt auf der negativen ζ -Achse. Die physikalisch sinnvolle Lösung ist daher die Funktion M . Es ist

$$M(\alpha, \beta, x) \equiv {}_1F_1(\alpha; \beta; x) := 1 + \frac{\alpha}{\beta} x + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{x^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\beta(\beta+1)(\beta+2)} \frac{x^3}{3!} + \dots \quad (4.203)$$

Wir haben also mit Hilfe des Ansatzes *eine* Lösung der Schrödinger-Gleichung gefunden:

$$\psi(\mathbf{r}) = c_1 e^{ikz} M(-i\gamma, 1, ik(r-z)), \quad (4.204)$$

mit einer Konstanten c_1 . $\psi(\mathbf{r})$ beschreibt einen Streuzustand, da $E > 0$ angenommen wurde. Es ist aber natürlich nicht garantiert, dass diese spezielle Lösung etwas mit der Streuung einer von negativem z her einlaufenden Welle zu tun hat. Um zu sehen, dass die Lösung tatsächlich diese Situation beschreibt, können wir $\text{Re } \psi(\mathbf{r})$ plotten:



Diese Graphik legt nahe, dass tatsächlich die gewünschte Situation beschrieben wird. Um dies zu beweisen, betrachten wir Orte \mathbf{r} nahe der negativen z -Achse, weit entfernt vom Streuzentrum. Hier ist

$$r \text{ groß, } |z| \text{ groß, } z < 0, \quad (4.205)$$

also auch $r - z > 0$ groß. Für große $\rho := r - z$ ist aber (vgl. Abramowitz, Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*)

$$M(-i\gamma, 1, ik\rho) \cong \frac{e^{\pi\gamma/2} e^{i\gamma \ln k\rho}}{\Gamma(1+i\gamma)} - \gamma \frac{e^{ik\rho}}{k\rho} \frac{e^{\pi\gamma/2} e^{-i\gamma \ln k\rho}}{\Gamma(1-i\gamma)} \quad (4.206)$$

mit der Gammafunktion $\Gamma(x)$, sowie

$$U(-i\gamma, 1, ik\rho) \cong e^{-\pi\gamma/2} e^{i\gamma \ln k\rho}. \quad (4.207)$$

Dies gestattet, die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ durch Addition von Null in zwei Anteile zu zerlegen, von denen einer für große ρ *beinah* eine ebene Welle ist und der andere für große ρ eine rein auslaufende (Streu-) Welle:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= c_1 e^{ikz} M(-i\gamma, 1, ik(r-z)) \\ &= c_1 e^{ikz} \underbrace{\frac{e^{\pi\gamma}}{\Gamma(1+i\gamma)} U(-i\gamma, 1, ik(r-z))}_{=: \psi_0(\mathbf{r})} \end{aligned}$$

$$+ c_1 e^{ikz} \underbrace{\left[M(-i\gamma, 1, ik(r-z)) - \frac{e^{\pi\gamma}}{\Gamma(1+i\gamma)} U(-i\gamma, 1, ik(r-z)) \right]}_{=: \psi_s(\mathbf{r})}. \quad (4.208)$$

Die beiden Anteile lauten nämlich, asymptotisch für große $\rho = r - z$,

$$\psi_0(\mathbf{r}) \cong c_1 \frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+i\gamma)} e^{ikz+i\gamma \ln k(r-z)}, \quad (4.209)$$

$$\begin{aligned} \psi_s(\mathbf{r}) &\cong c_1 e^{ikz} \left[\frac{e^{\pi\gamma/2} e^{i\gamma \ln k(r-z)}}{\Gamma(1+i\gamma)} - \gamma \frac{e^{ik(r-z)}}{k(r-z)} \frac{e^{\pi\gamma/2} e^{-i\gamma \ln k(r-z)}}{\Gamma(1-i\gamma)} - \frac{e^{\pi\gamma/2} e^{i\gamma \ln k(r-z)}}{\Gamma(1+i\gamma)} \right] \\ &= -\gamma c_1 \frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{e^{ikr-i\gamma \ln k(r-z)}}{k(r-z)}. \end{aligned} \quad (4.210)$$

$\psi_0(\mathbf{r})$ hat asymptotisch die Form einer von links einlaufenden ebenen Welle, bis auf den *logarithmischen Term* im Exponenten. Dieser ist zwar klein im Vergleich zum linearen Term ikz , divergiert aber dennoch entlang der negativen z -Achse, nämlich wie $i\gamma \ln 2k|z|$. Diese Korrektur zeigt an, dass das langreichweitige Coulomb-Potential die Primärwelle schon im Unendlichen beeinflusst. Wir wählen die Normierungskonstante als

$$c_1 \frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+i\gamma)} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad c_1 = e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1+i\gamma), \quad (4.211)$$

dann wird die Amplitude von ψ_0 asymptotisch zu eins:

$$\psi_0(\mathbf{r}) \cong e^{ikz+i\gamma \ln k(r-z)}. \quad (4.212)$$

Die *exakte* Lösung des Streuproblems lautet damit

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1+i\gamma) e^{ikz} M(-i\gamma, 1, ik(r-z)). \quad (4.213)$$

In der Streuwelle ψ_s verwenden wir

$$z = r \cos \vartheta \quad (4.214)$$

und erhalten für große $r - z$,

$$\psi_s(\mathbf{r}) \cong -\gamma \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{e^{ikr-i\gamma \ln [kr(1-\cos \vartheta)]}}{kr(1-\cos \vartheta)} = -\gamma \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\exp(ikr - i\gamma \ln 2kr - i\gamma \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2})}{2kr \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (4.215)$$

Wir definieren

$$\Gamma(1+i\gamma) = |\Gamma(1+i\gamma)| e^{i \arg \Gamma(1+i\gamma)} =: |\Gamma(1+i\gamma)| e^{i\sigma_0}, \quad (4.216)$$

dann ist

$$\Gamma(1-i\gamma) = \Gamma(1+i\gamma)^* = |\Gamma(1+i\gamma)| e^{-i\sigma_0} \quad (4.217)$$

und

$$\psi_s(\mathbf{r}) \cong -\gamma \frac{e^{ikr-i\gamma \ln 2kr} \exp(2i\sigma_0 - i\gamma \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2})}{2kr \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (4.218)$$

Dies können wir schließlich schreiben als

$$\psi_s(\mathbf{r}) \cong f_C(\vartheta) \frac{e^{ikr-i\gamma \ln 2kr}}{r} \quad (4.219)$$

mit der *Coulomb-Streuamplitude*

$$f_C(\vartheta) := -\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \exp\left(2i\sigma_0 - i\gamma \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right). \quad (4.220)$$

Beachte, dass f_C nur von ϑ , aber nicht von r abhängt. Die Streuwelle hat, wie angekündigt, für große r nicht die Form

$$f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (4.221)$$

sondern enthält, wie ψ_0 , einen zusätzlichen *logarithmischen Term* aufgrund der langen Reichweite des Coulomb-Potentials. Beachte, dass dieser Term nur eine abstandsabhängige *Phase* repräsentiert. Die Amplitude fällt wie immer für eine Kugelwelle mit $1/r$ ab, was durch die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit erzwungen ist.

Bei genauerem Hinsehen bemerken wir, dass sowohl $\psi_0(\mathbf{r})$ als auch $\psi_s(\mathbf{r})$ auf der positiven z -Achse, wo $r = z$ gilt, singular sind. Die volle, exakte Lösung (4.213) ist dort jedoch regulär. Sie lautet

$$\psi(z\hat{\mathbf{z}}) \stackrel{z>0}{\cong} e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1+i\gamma) e^{ikz} \underbrace{M(-i\gamma, 1, 0)}_{=1} = e^{-\pi\gamma/2} \Gamma(1+i\gamma) e^{ikz}. \quad (4.222)$$

4.3.1 Die Rutherfordsche Streuformel

Die asymptotische Form von $\psi(\mathbf{r})$ für große Abstände reicht aus, um den differentiellen Wirkungsquerschnitt zu berechnen – wir betrachten die Ströme durch eine Kugel des Radius $r \rightarrow \infty$ um das Streuzentrum. Die Primärwelle lautet asymptotisch

$$\psi_0(\mathbf{r}) \cong e^{ikz+i\gamma \ln k(r-z)} \quad (4.223)$$

und nahe der negativen z -Achse insbesondere

$$\psi_0(\mathbf{r}) \cong e^{ikz+i\gamma \ln(-2kz)}. \quad (4.224)$$

Die zugehörige Stromdichte ist

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) &\cong \frac{\hbar}{2mi} \left[e^{-ikz-i\gamma \ln(-2kz)} \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} e^{ikz+i\gamma \ln(-2kz)} - e^{ikz+i\gamma \ln(-2kz)} \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} e^{-ikz-i\gamma \ln(-2kz)} \right] \\ &= \frac{\hbar}{m} \hat{\mathbf{z}} \left(k + \frac{\gamma}{z} \right) \cong \frac{\hbar k}{m} \hat{\mathbf{z}}. \end{aligned} \quad (4.225)$$

Die Korrektur zur einlaufenden Stromdichte aufgrund der langen Reichweite verschwindet also für große $|z|$. Die Streuwelle

$$\psi_s(\mathbf{r}) \cong f_C(\vartheta) \frac{e^{ikr-i\gamma \ln 2kr}}{r} \quad (4.226)$$

hat die Stromdichte

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_s(\mathbf{r}) &\cong \frac{\hbar}{2mi} \left[\hat{\mathbf{r}} |f_C(\vartheta)|^2 \left(\frac{e^{-ikr+i\gamma \ln 2kr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr-i\gamma \ln 2kr}}{r} - \frac{e^{ikr-i\gamma \ln 2kr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{-ikr+i\gamma \ln 2kr}}{r} \right) \right. \\ &\quad \left. + \hat{\boldsymbol{\vartheta}} \frac{1}{r^3} \left(f_C^*(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} f_C(\vartheta) - f_C(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} f_C^*(\vartheta) \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left[\hat{\mathbf{r}} \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \frac{1}{r^2} 2i \left(k - \frac{\gamma}{r} \right) + \hat{\boldsymbol{\vartheta}} \frac{1}{r^3} \left(f_C^*(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} f_C(\vartheta) - f_C(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} f_C^*(\vartheta) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.227)$$

Wir vernachlässigen Terme von der Ordnung $1/r^3$ gegenüber $1/r^2$ und erhalten

$$\mathbf{j}_s(\mathbf{r}) \cong \frac{\hbar k}{m} \hat{\mathbf{r}} \frac{\gamma^2}{4k^2 r^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (4.228)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist dann exakt (er ist im Grenzfall $r \rightarrow \infty$ definiert) gegeben durch

$$\begin{aligned} d\sigma &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{j}_s(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{r}} r^2 d\Omega}{|\mathbf{j}_0(\mathbf{r})|} \\ \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \quad \left| \gamma = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{m}{\hbar^2 k} \right. \end{aligned} \quad (4.229)$$

$$= \left(\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(4E)^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (4.230)$$

Dies ist die bekannte *Rutherford'sche Streuformel*. Das Ergebnis ist *identisch* mit dem klassischen Resultat, siehe Vorlesung Klassische Mechanik. Daher konnte Rutherford sein Streuexperiment erfolgreich mittels einer klassischen Rechnung erklären. Die klassischen und quantenmechanischen Herleitungen scheinen nichts miteinander zu tun zu haben, insofern ist das identische Ergebnis überraschend. Auch sind die klassischen und quantenmechanischen Voraussagen für *gebundene* Zustände im Coulomb-Potential bekanntlich fundamental verschieden (Wasserstoff-Problem). Die Korrespondenz von klassischer und quantenmechanischer Streuformel wurde von Norcliffe, Percival und Roberts [J. Phys. B **2**, 590 (1969)] untersucht und verallgemeinert. Eine wesentliche Erkenntnis dabei war, dass die klassischen Teilchenbahnen den *Strahlen* der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ der Quantenmechanik entsprechen.

Es ist schon aus der klassischen Mechanik bekannt, dass der totale Wirkungsquerschnitt divergiert.

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (4.231)$$

Der Integrand verhält sich für $\vartheta \rightarrow 0$ wie $1/\vartheta^3$ und damit divergiert das Integral. Das ist wieder eine Konsequenz der langen Reichweite.

4.3.2 Partialwellenzerlegung

Die Zerlegung der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ in Partialwellen ist auch für ein langreichweitiges Potential möglich,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \vartheta). \quad (4.232)$$

Für die *reine* Coulomb-Streuung ist diese Zerlegung nicht besonders nützlich, da wir das Problem ja exakt lösen können. Auch konvergiert die Partialwellenzerlegung sehr langsam. Sie ist aber nützlich, wenn zum Coulomb-Potential ein kurzreichweitiges Potential hinzutritt, z. B. bei der Streuung von Protonen an einem Atomkern. Wir illustrieren das Vorgehen dennoch für das Coulomb-Potential. Die Partialwellen $u_l(r)$ müssen die Gleichung

$$u_l''(r) + \left[k^2 - \frac{2\gamma k}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (4.233)$$

mit der Randbedingung $u_l(0) = 0$ erfüllen. Die allgemeine Lösung lässt sich durch sogenannte *Whittaker-Funktionen* ausdrücken, die ebenfalls mit den Kummer'schen bzw. konfluent hypergeometrischen Funktionen zusammenhängen,

$$u_l(r) = \beta_l^{(1)} M_{i\gamma, (2l+1)/2}(2ikr) + \beta_l^{(2)} W_{i\gamma, (2l+1)/2}(2ikr). \quad (4.234)$$

Es gilt

$$M_{\kappa, \gamma}(z) = e^{-z/2} z^{\mu+1/2} M(\mu - \kappa + 1/2, 1 + 2\mu, z), \quad (4.235)$$

$$W_{\kappa, \gamma}(z) = e^{-z/2} z^{\mu+1/2} U(\mu - \kappa + 1/2, 1 + 2\mu, z). \quad (4.236)$$

Die Funktionen W divergieren für $kr \rightarrow 0$, so dass $\beta_l^{(2)} = 0$ sein muss. Die asymptotische Form für große kr lautet dann

$$\begin{aligned} u_l(r) &= \beta_l^{(1)} M_{i\gamma, (2l+1)/2}(2ikr) \\ &\cong \beta_l^{(1)} (2l+1)! e^{\pi\gamma/2} \left[\frac{\exp(ikr - i\gamma \ln 2kr)}{\Gamma(l+1 - i\gamma)} - (-1)^l \frac{\exp(-ikr + i\gamma \ln 2kr)}{\Gamma(l+1 + i\gamma)} \right]. \end{aligned} \quad (4.237)$$

Wir drücken die komplexe Gammafunktion durch Betrag und Phase aus,

$$u_l(r) \cong \beta_l^{(1)} (2l+1)! e^{\pi\gamma/2} i^l \frac{1}{|\Gamma(l+1 + i\gamma)|}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[(-i)^l \frac{\exp(ikr - i\gamma \ln 2kr)}{\exp(-i \arg \Gamma(l+1+i\gamma))} - i^l \frac{\exp(-ikr + i\gamma \ln 2kr)}{\exp(i \arg \Gamma(l+1+i\gamma))} \right] \\
& = \frac{\beta_l^{(1)} (2l+1)! e^{\pi\gamma/2} i^l}{|\Gamma(l+1+i\gamma)|} \left[\exp\left(ikr - i\gamma \ln 2kr - i\frac{\pi}{2}l + i \arg \Gamma(l+1+i\gamma)\right) \right. \\
& \quad \left. - \exp\left(-ikr + i\gamma \ln 2kr + i\frac{\pi}{2}l - i \arg \Gamma(l+1+i\gamma)\right) \right] \\
& = \underbrace{\frac{2\beta_l^{(1)} (2l+1)! e^{\pi\gamma/2} i^{l+1}}{|\Gamma(l+1+i\gamma)|}}_{=: c_l = \text{const}} \sin\left(kr - \gamma \ln 2kr - \frac{\pi}{2}l + \sigma_l\right) \tag{4.238}
\end{aligned}$$

mit

$$\sigma_l := \arg \Gamma(l+1+i\gamma). \tag{4.239}$$

Wir sehen, dass die asymptotische Form von $u_l(r)$ nicht mit derjenigen für kurzreichweitige Potentiale übereinstimmt. Dort gilt, siehe Gl. (4.62),

$$u_l(r) \cong c'_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right). \tag{4.240}$$

Aufgrund der langen Reichweite des Coulomb-Potentials tritt wieder ein zusätzlicher logarithmischer Term auf. Man kann also keine Streuphase δ_l definieren, die von r unabhängig wäre. Berücksichtigt man den logarithmischen Term explizit, so bleibt die r -unabhängige Phase σ_l übrig. Man nennt sie die *Coulomb-Streuphase*.

Im Prinzip müssen wir noch die Koeffizienten $\beta_l^{(1)}$ bzw. c_l bestimmen. Die Idee ist dieselbe wie für ein kurzreichweitiges Potential: Wir entwickeln die Primärwelle ψ_0 in Partialwellen und nutzen die Drehimpulserhaltung aus. Nur ist die Primärwelle jetzt keine ebene Welle e^{ikz} mehr. Wir kennen aber die asymptotische Form von ψ_0 , wenn der langreichweitige Anteil des Potentials vom Coulomb-Typ ($1/r$) ist: Sie lautet

$$\begin{aligned}
\psi_0(\mathbf{r}) & \cong e^{ikz + i\gamma \ln k(r-z)} = \exp\left(ikr \cos \vartheta + i\gamma \ln[kr(1 - \cos \vartheta)]\right) \\
& = \exp\left(ikr \cos \vartheta + i\gamma \ln 2kr + i\gamma \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right) \\
& = \exp\left(i\gamma \ln 2kr + i\gamma \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right) e^{ikr \cos \vartheta} \\
& \stackrel{(4.56)}{\cong} \exp\left(i\gamma \ln 2kr + i\gamma \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{e^{ikr - i\frac{\pi}{2}l} - e^{-ikr + i\frac{\pi}{2}l}}{2ikr} P_l(\cos \vartheta). \tag{4.241}
\end{aligned}$$

Der einlaufende Anteil muss auf der negativen z -Achse mit dem einlaufenden Anteil der vollen Wellenfunktion asymptotisch identisch sein. Wegen der Drehimpulserhaltung gilt dies für jeden Kanal l für sich:

$$-e^{i\gamma \ln 2kr} (2l+1) i^l \frac{e^{-ikr + i\frac{\pi}{2}l}}{2ikr} P_l(-1) \stackrel{!}{=} \frac{c_l}{r} \frac{e^{-ikr + i\gamma \ln 2kr + i\frac{\pi}{2}l - i\sigma_l}}{2i} P_l(-1) \tag{4.242}$$

$$\Rightarrow -(2l+1) i^l \frac{1}{k} = c_l e^{-i\sigma_l} \Rightarrow c_l = -\frac{(2l+1) i^l e^{i\sigma_l}}{k}. \tag{4.243}$$

Dafür können wir auch schreiben

$$c_l = -\frac{(2l+1) i^l e^{i \arg \Gamma(l+1+i\gamma)}}{k} = -\frac{(2l+1) i^l}{k} \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{|\Gamma(l+1+i\gamma)|}. \tag{4.244}$$

Mit [siehe Gl. (4.238)]

$$c_l = \frac{2\beta_l^{(1)} (2l+1)! e^{\pi\gamma/2} i^{l+1}}{|\Gamma(l+1+i\gamma)|} \tag{4.245}$$

erhalten wir

$$\beta_l^{(1)} = -\frac{|\Gamma(l+1+i\gamma)|}{2(2l+1)! e^{\pi\gamma/2} i^l} \frac{(2l+1) i^l}{k} \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{|\Gamma(l+1+i\gamma)|} = i \frac{e^{-\pi\gamma/2}}{2(2l)!} \frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{k}. \tag{4.246}$$

Die Partialwellenzerlegung für die Coulomb-Streuung lautet schließlich

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{i}{2} e^{-\pi\gamma/2} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l)!} \Gamma(l+1+i\gamma) M_{i\gamma, (2l+1)/2}(2ikr) P_l(\cos\vartheta). \quad (4.247)$$

Wie gesagt ist diese exakte Partialwellenzerlegung für das reine Coulomb-Potential nicht sehr nützlich, da das ebenfalls exakte Resultat in Gl. (4.213) einfacher ist. Die Methode ist nützlich, wenn zusätzliche kurzreichweitige Terme im Potential auftreten.

4.4 Streuung ununterscheidbarer Teilchen

In diesem Abschnitt diskutieren wir zunächst die Streuung von Teilchen aneinander anstatt an einem festen Target. Dann beschäftigen wir uns insbesondere mit der Streuung ununterscheidbarer Teilchen aneinander. Dabei wird die bereits bei der Einführung ununterscheidbarer Teilchen angesprochene Erkenntnis wichtig, dass man die herauskommenden Teilchen nicht eindeutig mit den hineinfliegenden identifizieren kann. Das bedeutet praktisch, dass der Streuzustand die bekannte Symmetrie unter Teilchenaustausch haben muss.

4.4.1 Streuung von Teilchen aneinander

Wir betrachten zunächst die Streuung von zwei *unterscheidbaren* Teilchen mit den Massen m_1 , m_2 aneinander aufgrund der Wechselwirkung $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Spielen andere Teilchen und äußere Felder keine Rolle, so ist $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$. Es ist günstig, zu Schwerpunkts- und Relativkoordinaten überzugehen,

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad (4.248)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad (4.249)$$

so dass gilt

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r}, \quad (4.250)$$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r}. \quad (4.251)$$

Der Hamiltonian lautet

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \right)^2 + V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1). \quad (4.252)$$

Mit

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \quad (4.253)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \quad (4.254)$$

$$(4.255)$$

(Kettenregel!) erhalten wir

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_1} \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 + \frac{1}{m_2} \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 \right] + V(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2} \underbrace{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)}_{=: 1/m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.256)$$

mit der reduzierten Masse

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (4.257)$$

Die Schwerpunkts- und Relativbewegung separieren also. Die Schwerpunktsbewegung ist unbeschleunigt. Für die Relativbewegung können wir die bisher für festes Target eingeführte Theorie anwenden, dabei müssen wir nur die Teilchenmasse durch die reduzierte Masse ersetzen. Typischerweise ist am Ende der Rechnung eine Koordinatentransformation vom Schwerpunktsystem zurück ins Laborsystem notwendig. Damit erhalten wir z. B. aus den Ergebnissen aus Abschnitt 4.3 eine exakte Beschreibung der Elektron-Proton- und Elektron-Positron-Streuung im nichtrelativistischen Limes.

4.4.2 Ununterscheidbare Teilchen

Bei der Streuung zweier *ununterscheidbarer* Teilchen muss der Zweiteilchenzustand unter Vertauschung symmetrisch (für Bosonen) bzw. antisymmetrisch (für Fermionen) sein. Wir betrachten zunächst den Fall, dass der *Spin*-Zustand der beiden Teilchen feste Parität hat, d. h. symmetrisch oder antisymmetrisch ist. Das ist z. B. für spinlose Bosonen trivialerweise der Fall, ebenso für zwei Fermionen mit identischer Spineinstellung. Es ergibt sich eine räumliche Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ mit fester Parität, wie in Kap. 2 besprochen.

Ist die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$ symmetrisch/antisymmetrisch, so gilt für die abseparierte Relativbewegung

$$\psi(-\mathbf{r}) = \pm \psi(\mathbf{r}). \quad (4.258)$$

Dies können wir wieder durch explizite Symmetrisierung/Antisymmetrisierung erreichen. Ist $\tilde{\psi}(\mathbf{r})$ eine ohne Beachtung der Symmetrie gefundene Lösung, so ist

$$\psi(\mathbf{r}) = \tilde{\psi}(\mathbf{r}) \pm \tilde{\psi}(-\mathbf{r}) \quad (4.259)$$

mit geeigneter Normierung eine Lösung mit der geforderten Symmetrie. [Mit $\tilde{\psi}(\mathbf{r})$ ist auch $\tilde{\psi}(-\mathbf{r})$ eine Lösung der Schrödinger-Gleichung, sofern $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ gilt.] Für hinreichend kurze Reichweite von $V(\mathbf{r})$ gilt

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}) \cong e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.260)$$

für große r . (Die Verallgemeinerung auf das Coulomb-Potential ist unproblematisch.) Damit ist

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \pm e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} \pm f(-\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (4.261)$$

wobei wir eine spezifische Wahl für die Amplitude der ebenen Wellen $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ getroffen haben. Ist $V(\mathbf{r}) = V(r)$ ein Zentralpotential, so folgt

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \pm e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + [f(\vartheta) \pm f(\pi - \vartheta)] \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (4.262)$$

Für die Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnitts gehen wir von der Definition in Abschnitt 4.1 aus:

$$d\sigma = \frac{\text{Zahl der gestreuten Teilchen in } d\Omega \text{ pro Zeit}}{\text{Zahl der einlaufenden Teilchen pro Zeit und Fläche}}. \quad (4.263)$$

Da wir ununterscheidbare Teilchen betrachten, können wir aus Prinzip nicht zwischen den beiden gestreuten Teilchen unterscheiden. Zwischen den einlaufenden Teilchen können wir aber unterscheiden – wir präparieren ja einen nach rechts laufenden und einen nach links laufenden Strahl. Wir könnten für die einlaufenden Teilchen (Nenner von $d\sigma$) entweder nur die aus einer Richtung einlaufenden oder die aus beiden Richtungen einlaufenden Teilchen zählen. Die übliche Definition verwendet die aus *einer* Richtung einlaufenden. Dann ist

$$d\sigma = \frac{r^2 d\Omega \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_s}{|\mathbf{j}_0|} \quad (4.264)$$

mit

$$|\mathbf{j}_0| = \frac{\hbar k}{m} \quad (4.265)$$

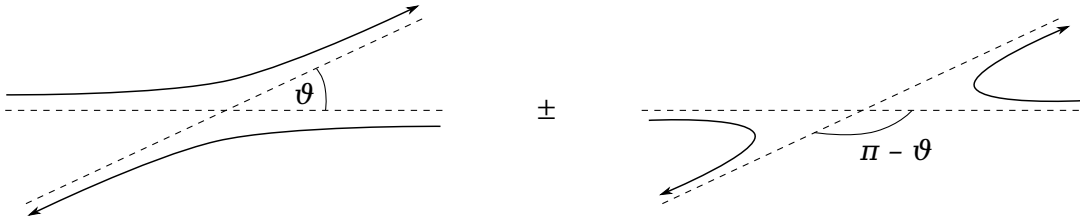
und

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}_s(\mathbf{r}) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\cong} \frac{\hbar}{2mi} \left\{ [f^*(\vartheta) \pm f^*(\pi - \vartheta)] \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} [f(\vartheta) \pm f(\pi - \vartheta)] \frac{e^{ikr}}{r} \right. \\
&\quad \left. - [f(\vartheta) \pm f(\pi - \vartheta)] \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} [f^*(\vartheta) \pm f^*(\pi - \vartheta)] \frac{e^{-ikr}}{r} \right\} \\
&= \frac{\hbar}{2mi} [f^*(\vartheta) \pm f^*(\pi - \vartheta)] [f(\vartheta) \pm f(\pi - \vartheta)] \left(\frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3} + \frac{ik}{r^2} + \frac{1}{r^3} \right) \\
&= \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} [|f(\vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta)|^2 \pm 2 \operatorname{Re} f^*(\vartheta) f(\pi - \vartheta)]. \tag{4.266}
\end{aligned}$$

Es folgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta)|^2 \pm 2 \operatorname{Re} f^*(\vartheta) f(\pi - \vartheta). \tag{4.267}$$

Im Vergleich zur Streuung am festen Target oder von unterscheidbaren Teilchen aneinander erhalten wir einen zusätzlichen *Interferenzterm* $\pm 2 \operatorname{Re} f^*(\vartheta) f(\pi - \vartheta)$. Dieser beruht auf der Interferenz der beiden möglichen (und ununterscheidbaren) Zuordnungen von ein- und auslaufenden Teilchen:



Wir erkennen, dass für reine *s*-Wellen-Streuung und antisymmetrische Wellenfunktion der differentielle Wirkungsquerschnitt verschwindet: Es ist dann $f(\vartheta) = f = \text{const}$ und daher

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 + |f|^2 - 2|f|^2 = 0. \tag{4.268}$$

Dieses Ergebnis lässt sich mit Hilfe der Partialwellenzerlegung verallgemeinern.

Die Partialwellenzerlegung lässt sich wie folgt auf ununterscheidbare Teilchen erweitern: Wir schreiben wie vorher

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \vartheta). \tag{4.269}$$

Da jedoch $\psi(-\mathbf{r}) = \pm \psi(\mathbf{r})$ gelten soll und

$$P_l(\cos(\pi - \vartheta)) = P_l(-\cos \vartheta) = (-1)^l P_l(\cos \vartheta) \tag{4.270}$$

ist, können nur gerade l (für symmetrische Wellenfunktion) bzw. ungerade l (für antisymmetrische Wellenfunktion) vorkommen.

Interessant ist der Fall eines Streupotentials $V(r)$ mit beschränktem Träger mit dem Radius a und $ka \ll 1$. Wie oben gesehen, ist die Streuung in Kanäle mit Drehimpulsquantenzahl $l \gg ka$ stark unterdrückt. Das sind für $ka \ll 1$ aber alle bis auf $l = 0$. Für symmetrische Wellenfunktion ergibt sich nichts wesentliche neues. Für antisymmetrische Wellenfunktion ist jedoch $l = 0$ ausgeschlossen. Der (typischerweise) führende Term hat daher $l = 1$ (*p*-Wellen-Streuung) und ist bereits stark unterdrückt. Man kann dies so deuten, dass sich die Teilchen aufgrund der Antisymmetrie von $\psi(\mathbf{r})$ nicht sehr nahe kommen und daher im Fall $ka \ll 1$ das Streupotential kaum sehen.

4.4.3 Mittelung über Spin-Einstellungen

Im Allgemeinen enthalten die Teilchenstrahlen eine gewisse Verteilung von Spin-Einstellungen. Wir betrachten hier unpolarisierte Strahlen aus Teilchen mit dem Spin $S = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Die Einteilchen-Dichtematrix auf dem Spin-Hilbertraum für unpolarisierte Teilchen ist

$$\rho_S = \frac{1}{2S+1} \mathbb{1}. \quad (4.271)$$

Die beiden Teilchen zusammen haben $(2S+1)^2$ mögliche Spin-Einstellungen. Wir charakterisieren diese durch die beiden Spin- z -Quantenzahlen $m_1, m_2 = -S, \dots, S$ und schreiben die entsprechende Basis des Spin-Hilbertraums als $\{|m_1, m_2\rangle\}$. Aus diesen Basiszuständen können wir die folgenden linear unabhängigen symmetrischen und antisymmetrischen Kombinationen bilden:

- symmetrisch:

$$|m_1, m_1\rangle \quad (4.272)$$

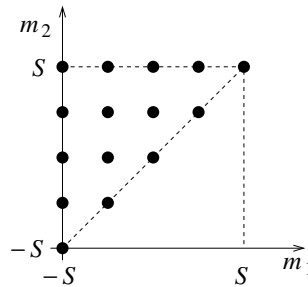
(beide Spins haben dieselbe S_z -Quantenzahl) sowie

$$\frac{|m_1, m_2\rangle + |m_2, m_1\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{für } m_1 < m_2, \quad (4.273)$$

das sind insgesamt soviele Zustände, wie Paare (m_1, m_2) mit $-S \leq m_1 \leq m_2 \leq S$ existieren, also

$$1 + 2 + 3 + \dots + (2S+1) \stackrel{\text{Gauß}}{=} \frac{(1+2S+1)(2S+1)}{2} = (S+1)(2S+1) \quad (4.274)$$

Zustände,



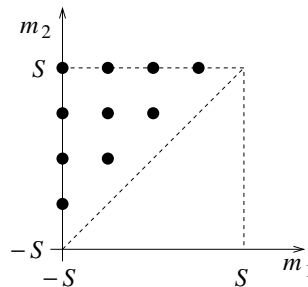
- antisymmetrisch:

$$\frac{|m_1, m_2\rangle - |m_2, m_1\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{für } m_1 < m_2, \quad (4.275)$$

das sind insgesamt soviele Zustände, wie Paare (m_1, m_2) mit $-S \leq m_1 < m_2 \leq S$ existieren, also

$$1 + 2 + 3 + \dots + 2S \stackrel{\text{Gauß}}{=} \frac{(1+2S)2S}{2} = S(2S+1) \quad (4.276)$$

Zustände.



Zusammen erhalten wir offensichtlich $(2S+1)^2$ Zustände, damit haben wir einen vollständigen Satz konstruiert. Da dieser durch eine unitäre Transformation aus $\{|m_1, m_2\rangle\}$ hervorgeht, ist die Dichtematrix auch in dieser neuen Basis

$$\rho_S \otimes \rho_S = \frac{1}{(2S+1)^2} \mathbb{1}, \quad (4.277)$$

d. h. alle Zustände sind gleich wahrscheinlich. Nun müssen wir das vorige Ergebnis Gl. (4.267) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt über alle diese Spin-Zustände mitteln. Es folgt für das Spin-Mittel

$$\begin{aligned} \overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}} &= \frac{(S+1)(2S+1)}{(2S+1)^2} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{sym. Spin-Zustand}} + \frac{S(2S+1)}{(2S+1)^2} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{antisym. Spin-Zustand}} \\ &= |f(\vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta)|^2 \pm \frac{S+1}{2S+1} 2 \operatorname{Re} f^*(\vartheta) f(\pi - \vartheta) \mp \frac{S}{2S+1} 2 \operatorname{Re} f^*(\vartheta) f(\pi - \vartheta) \\ &= |f(\vartheta)|^2 + |f(\pi - \vartheta)|^2 \pm \frac{2}{2S+1} \operatorname{Re} f^*(\vartheta) f(\pi - \vartheta), \end{aligned} \quad (4.278)$$

wobei jetzt das obere (untere) Vorzeichen für Bosonen (Fermionen) gilt. Der quantenmechanische Interferenzterm überlebt also für unpolarisierte Strahlen, nimmt aber für große Spins S ab. Das ist vernünftig, da $S \rightarrow \infty$ dem klassischen Grenzfall für Drehimpulse entspricht.

Zusammengefasst: Gleichung (4.278) gestattet uns, den differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ für die Streuung unpolarisierter Strahlen ununterscheidbarer Teilchen zu bestimmen, wenn wir die Streuamplitude $f(\vartheta)$ kennen. $f(\vartheta)$ berechnen wir im Rahmen der Theorie für die Streuung am festen Target.

4.5 Green-Funktions-Methode

Die Partialwellenzerlegung ist insbesondere für hohe Energien nicht günstig, da die Entwicklung nach Drehimpuls- l -Beiträgen langsam konvergiert. Hier besprechen wir eine alternative Methode unter Verwendung von Green-Funktionen.

4.5.1 Integraldarstellung der Streuamplitude

Mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $v(\mathbf{r}) = 2mV(\mathbf{r})/\hbar^2$ können wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung schreiben als

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad (4.279)$$

wobei wir jetzt *nicht* annehmen, dass $V(\mathbf{r})$ ein Zentralpotential sein muss. Die zugehörige freie Differentialgleichung (die *Helmholtz-Gleichung*) habe die Lösung $\psi_0(\mathbf{r})$:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_0(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.280)$$

Die *Green-Funktion* $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ist definiert als Lösung der Gleichung

$$(\nabla^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.281)$$

die aus der freien Gleichung (4.280) durch Einfügen der Inhomogenität $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ hervorgeht. Sowohl $\psi_0(\mathbf{r})$ als auch $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (als Funktion von \mathbf{r}) sollen dieselben Randbedingungen erfüllen wie $\psi(\mathbf{r})$: Für das Streuproblem sind alle diese Funktionen auf \mathbb{R}^3 definiert und müssen für $r \rightarrow \infty$ beschränkt bleiben. Aus der Translationsinvarianz des Problems folgt dann, dass $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ nur von $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ abhängen kann. Wir schreiben daher $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.

Der Nutzen der Green-Funktion liegt darin, dass jede Lösung $\psi(\mathbf{r})$ der *Integralgleichung*

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int d^3r' G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (4.282)$$

die Schrödinger-Gleichung löst. Beweis:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = \underbrace{(\nabla^2 + k^2) \psi_0(\mathbf{r})}_{=0} + \int d^3r' \underbrace{(\nabla^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}_{=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} v(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = v(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (4.283)$$

Wir wollen nun $\psi_0(\mathbf{r})$ und $G_k(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ explizit bestimmen. Wir betrachten einen entlang der negativen z -Achse einlaufenden Teilchenstrahl. Daher gilt einfach

$$\psi_0(\mathbf{r}) = e^{ikz}. \quad (4.284)$$

Zur Lösung von Gl. (4.281) ersetzen wir zunächst $\mathbf{r} - \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ und schreiben

$$(\nabla^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}). \quad (4.285)$$

Dann machen wir den Ansatz

$$G_k(\mathbf{r}) = e^{\pm ikr} F_k(\mathbf{r}). \quad (4.286)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2) G_k(\mathbf{r}) &= (\nabla^2 + k^2) e^{\pm ikr} F_k(\mathbf{r}) \\ &= \left(\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r e^{\pm ikr} \right) F_k(\mathbf{r}) + 2 \nabla e^{\pm ikr} \cdot \nabla F_k(\mathbf{r}) + e^{\pm ikr} \nabla^2 F_k(\mathbf{r}) + k^2 e^{\pm ikr} F_k(\mathbf{r}) \\ &= 2 \frac{1}{r} (\pm ik) e^{\pm ikr} F_k(\mathbf{r}) - \cancel{k^2 e^{\pm ikr} F_k(\mathbf{r})} \pm 2ik e^{\pm ikr} \frac{\partial}{\partial r} F_k(\mathbf{r}) + e^{\pm ikr} \nabla^2 F_k(\mathbf{r}) + \cancel{k^2 e^{\pm ikr} F_k(\mathbf{r})} \\ &= \pm \frac{2ik}{r} e^{\pm ikr} F_k(\mathbf{r}) \pm 2ik e^{\pm ikr} \frac{\partial}{\partial r} F_k(\mathbf{r}) + e^{\pm ikr} \nabla^2 F_k(\mathbf{r}) \stackrel{!}{=} \delta(\mathbf{r}) \\ \Rightarrow \nabla^2 F_k(\mathbf{r}) \pm 2ik \frac{\partial}{\partial r} F_k(\mathbf{r}) \pm \frac{2ik}{r} F_k(\mathbf{r}) &= e^{\mp ikr} \delta(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.287)$$

Wir wissen aus der Elektrodynamik, dass gilt

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (4.288)$$

(dies ist die Poisson-Gleichung für eine Punktladung) und probieren daher den Ansatz

$$F_k(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi r}. \quad (4.289)$$

Einsetzen in die Gleichung für $F_k(\mathbf{r})$ ergibt

$$\delta(\mathbf{r}) \pm 2ik \frac{1}{4\pi r^2} \mp 2ik \frac{1}{4\pi r^2} = \delta(\mathbf{r}). \quad (4.290)$$

Die Gleichung ist also erfüllt. Damit haben wir zwei Lösungen für die Green-Funktion gefunden:

$$G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (4.291)$$

Im Prinzip können wir noch eine beliebige Lösung der homogenen (Helmholtz-) Gleichung addieren. Man kann aber zeigen, dass dies zu Lösungen der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung führt, die nicht der Streusituation entsprechen. Aus demselben Grund müssen wir die Lösung mit $e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ wählen; damit beschreiben wir auslaufende und nicht einlaufende Kugelwellen. Also erhalten wir

$$G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (4.292)$$

und damit die *Lippmann-Schwinger-Gleichung* in Ortsdarstellung,

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} v(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (4.293)$$

Dies ist nun eine explizite Integralgleichung für $\psi(\mathbf{r})$, die der Streusituation (ebene Primärwelle, auslaufende Kugelwelle) angepasst ist. Es ist aber noch nicht klar, was wir durch die Übersetzung einer partiellen Differentialgleichung für $\psi(\mathbf{r})$ in eine Integralgleichung gewonnen haben. Wir werden gleich sehen, dass die Integralgleichung für bestimmte Näherungen günstig ist.

Wir betrachten zunächst die Gleichung für große Abstände r vom Streuzentrum. Ist $v(\mathbf{r}')$ hinreichend kurzreichweitig, trägt der Integrand

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} v(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \quad (4.294)$$

nur für kleine $r' \ll r$ bei. Dann können wir für $r' \ll r$ entwickeln:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \cong \frac{1}{r} \quad (4.295)$$

und

$$\begin{aligned} e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} &= \exp\left(ik\sqrt{r^2+(r')^2-2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}\right) = \exp\left(ikr\sqrt{1-2\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2}+\left(\frac{r'}{r}\right)^2}\right) \\ &\cong \exp\left(ikr\left[1-\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2}\right]\right) = e^{ikr} e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} \end{aligned} \quad (4.296)$$

mit $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$. (Dass diese Ordnungen ausreichen, kann man prüfen, indem man höhere Terme mitnimmt und zeigt, dass die resultierenden Korrekturen in der Streuamplitude klein sind.) Damit gilt für große r ,

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{ikz} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} v(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (4.297)$$

Vergleich mit der asymptotischen Form

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.298)$$

ergibt für die Streuamplitude

$$f(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} v(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (4.299)$$

Diese Beziehung ist für hinreichend kurzreichweitiges Potential exakt, da $f(\hat{\mathbf{r}})$ durch das asymptotische Verhalten definiert ist. Es sei daran erinnert, dass wir nicht angenommen haben, dass $V(\mathbf{r})$ rotationssymmetrisch (also ein Zentralpotential) ist.

4.5.2 Bornsche Reihe

Die Lippmann-Schwinger-Integralgleichung (4.293) für $\psi(\mathbf{r})$ legt eine iterative Lösung nahe: Wir ersetzen ψ unter dem Integral durch den durch die Lippmann-Schwinger-Gleichung gegebenen Ausdruck. Wir erhalten ein doppeltes Integral, das wiederum ψ enthält. Dies ersetzen wir wieder durch die rechte Seite der Gleichung usw. iterativ. Das Ergebnis ist die *Bornsche Reihe*

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(\mathbf{r}) \quad (4.300)$$

mit

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) = e^{ikz}, \quad (4.301)$$

$$\psi^{(n)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi^{(n-1)}(\mathbf{r}') \quad \text{für } n \geq 1. \quad (4.302)$$

Beachte, dass der Term $\psi^{(n)}(\mathbf{r})$ von n -ter Ordnung im Streupotential $V(\mathbf{r})$ ist, die Bornsche Reihe stellt also eine Störungsentwicklung für kleine Potentiale V dar. Sie ist eine exakte Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung und damit der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung, denn sie erfüllt

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \sum_{n=1}^{\infty} \psi^{(n)}(\mathbf{r}) \\
&= e^{ikz} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi^{(n-1)}(\mathbf{r}') \\
&= e^{ikz} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi^{(n)}(\mathbf{r}') \\
&= e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \tag{4.303}
\end{aligned}$$

Die n -te Bornsche Näherung besteht in diesem Kontext darin, die Reihe für $\psi(\mathbf{r})$ nach dem n -ten Term abzubrechen. In der Praxis ist insbesondere die *erste Bornsche Näherung* von Bedeutung. Hier ist

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{ikz} + \psi^{(1)}(\mathbf{r}) \tag{4.304}$$

mit

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') e^{ikz'}. \tag{4.305}$$

Aus Gl. (4.299) erhalten wir eine analoge Bornsche Reihe für die Streuamplitude,

$$f(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\hat{\mathbf{r}}) \tag{4.306}$$

mit

$$f^{(n)}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi^{(n-1)}(\mathbf{r}'), \tag{4.307}$$

wobei $f^{(n)}(\hat{\mathbf{r}})$ von n -ter Ordnung in V ist. Es tritt kein Term nullter Ordnung auf, da für die ungestreute Welle natürlich $f \equiv 0$ gilt.

Die erste Bornsche Näherung für die Streuamplitude lautet nun

$$f^{(1)}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') e^{ikz'} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-ik(\hat{\mathbf{r}}-\hat{\mathbf{z}})\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}'). \tag{4.308}$$

Dies ist nun eine *explizite* Darstellung der genäherten Streuamplitude. Dasselbe sollte sich ergeben, wenn man in die exakte Darstellung von f durch die Streuphasen δ_l die Bornsche Näherung für die δ_l , Gl. (4.182), einsetzt und bis zur linearen Ordnung in V entwickelt. Beachte, dass wir bei der Herleitung von Gl. (4.182) ein Zentralpotential angenommen haben. Das neue Ergebnis ist insofern allgemeiner und auch einfacher in der Anwendung.

In erster Bornscher Näherung ist die Streuamplitude durch die Fourier-Transformierte des Streupotentials,

$$\tilde{V}(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \tag{4.309}$$

gegeben,

$$f^{(1)}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(k(\hat{\mathbf{r}}-\hat{\mathbf{z}})) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}\left(k \begin{pmatrix} \sin\vartheta \cos\varphi \\ \sin\vartheta \sin\varphi \\ \cos\vartheta - 1 \end{pmatrix}\right). \tag{4.310}$$

Wenn wir die k -Abhängigkeit von $f^{(1)}$ explizit machen und k, ϑ, φ als Kugelkoordinaten des Wellenvektors \mathbf{k} der auslaufenden Teilchen auffassen, können wir schreiben

$$f^{(1)}(\mathbf{k}) \equiv f^{(1)}(k, \vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{k} - k\hat{\mathbf{z}}), \tag{4.311}$$

wobei $k\hat{\mathbf{z}}$ der Wellenvektor der einlaufenden Teilchen ist. Das Argument von \tilde{V} ist also (bis auf einen Faktor \hbar) der *Impulsübertrag*. Wir erkennen, dass die Streuung bei großen (kleinen) Energien der Streuteilchen, also großen (kleinen) k v. a. für das Fourier-transformierte Streupotential $\tilde{V}(\mathbf{q}) = \tilde{V}(\mathbf{k} - k\hat{\mathbf{z}})$ bei großen (kleinen) Impulsüberträgen $|\mathbf{q}|$ empfindlich ist.

Die erste Bornsche Näherung, und tatsächlich *jede* Bornsche Näherung, hat die Schwäche, dass sie das Optische Theorem verletzt. Das ist im Prinzip ein ernstes Problem, da das Optische Theorem aus der Teilchenzahlerhaltung folgt. Daher muss in Bornscher Näherung die Teilchenzahlerhaltung verletzt sein. Wir können leicht sehen, dass das Optische Theorem nicht erfüllt ist:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vartheta = 0) &\equiv f^{(1)}(\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{z}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-ik(\hat{\mathbf{z}} - \hat{\mathbf{z}}) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{q} = 0). \end{aligned} \quad (4.312)$$

Dies ist reell, weshalb das optische Theorem ergibt

$$\sigma_{\text{tot}}^{(1)} = \int d\Omega |f^{(1)}(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f^{(1)}(\vartheta = 0) = 0 \quad (4.313)$$

$$\Rightarrow f^{(1)}(\vartheta, \varphi) = 0 \quad \forall \vartheta, \varphi, \quad (4.314)$$

und das ist ein Widerspruch. Die erste Bornsche Näherung ist dennoch vernünftig, wenn das Streupotential hinreichend schwach ist. Wir hatten ja schon gesehen, dass die erste Bornsche Näherung gerade die Streuamplitude bis zur ersten Ordnung im Streupotential beschreibt. Man sollte aber nicht versuchen, mittels einer Bornschen Näherung die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung zu bestimmen.

Als Beispiel betrachten wir die Coulomb-Streuung. Hier würden wir nicht erwarten, dass etwas Vernünftiges herauskommt, da sich die Wellenfunktion asymptotisch gar nicht wie

$$\psi(\mathbf{r}) \cong e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.315)$$

verhält. Die Abweichung liegt in logarithmischen Termen in den Phasen der ein- und auslaufenden Wellen. Dennoch berechnen wir

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\hat{\mathbf{r}}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{k} - k\hat{\mathbf{z}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{k^2(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{z}})^2} = -\frac{me^2}{2\pi\hbar^2\epsilon_0} \frac{1}{k^2} \frac{1}{2 - 2\cos\vartheta} \\ &= -\frac{me^2}{8\pi\hbar^2\epsilon_0} \frac{1}{k^2} \frac{1}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}} = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{E} \frac{1}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}}. \end{aligned} \quad (4.316)$$

Damit erhalten wir

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{(1)} = |f^{(1)}(\hat{\mathbf{r}})|^2 = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{(4E)^2} \frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}}. \quad (4.317)$$

Das ist tatsächlich die *exakte* Rutherford'sche Streuformel aus Abschnitt 4.3. Das ist erstaunlich, denn die Phase von $f^{(1)}(\hat{\mathbf{r}})$ ist offensichtlich falsch – es fehlt der logarithmische Term. Die höheren Bornschen Näherungen sind ebenfalls falsch und sogar divergent.

4.6 Basisunabhängige Streutheorie

In diesem Abschnitt heben wir die Beschreibung der Streuung auf ein allgemeineres Niveau. Die neue Beschreibung ist unabhängig von einer bestimmten Basis. Der konzeptionelle Schritt ist analog zum Übergang von der Schrödingerschen Wellenmechanik zur Dirac-Notation in der Quantentheorie 1.

Etwas konkreter formuliert ist die bisher entwickelte Streutheorie noch nicht sehr allgemein, da sie

- eine spezielle Art von einlaufenden Zuständen, nämlich ebene Wellen, betrachtet und
- in Ortsdarstellung formuliert ist.

Im Folgenden wollen wir eine allgemeinere Formulierung besprechen.

4.6.1 Die allgemeine Lippmann-Schwinger-Gleichung

Wir arbeiten jetzt mit Zustandsvektoren ohne Bezug auf eine bestimmte Basis. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung laute (in diesem Abschnitt kennzeichnen wir Operatoren mit einem Zirkumflex bzw. Dach)

$$\hat{H} |\psi\rangle \equiv (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad (\hat{H}_0 - E) |\psi\rangle = -\hat{V} |\psi\rangle. \quad (4.318)$$

Die freie Gleichung, d. h. die Gleichung in Abwesenheit von Streuung, laute

$$\hat{H}_0 |\psi_0\rangle = E |\psi_0\rangle \quad \Rightarrow \quad (\hat{H}_0 - E) |\psi_0\rangle = 0, \quad (4.319)$$

wobei \hat{H}_0 nicht unbedingt nur die kinetische Energie enthalten muss – wir haben eine große Freiheit bei der Wahl von \hat{H}_0 . Typischerweise wird es ein Teil von \hat{H} sein, dessen Eigenzustände wir einfach bestimmen können.

Beachte, dass wir in beiden Schrödinger-Gleichungen *dieselbe* Eigenenergie E gewählt haben. Dies können wir tun, wenn \hat{H}_0 und \hat{H} dasselbe kontinuierliche Spektrum haben, was für ein lokales Streupotential \hat{V} erfüllt sein sollte. Es folgt

$$(\hat{H}_0 - E) (|\psi\rangle - |\psi_0\rangle) = -\hat{V} |\psi\rangle. \quad (4.320)$$

Falls $\hat{H}_0 - E \equiv \hat{H}_0 - E\mathbb{1}$ invertierbar ist, können wir folgern

$$|\psi\rangle - |\psi_0\rangle = - \underbrace{\frac{1}{\hat{H}_0 - E}}_{\substack{\text{konventionelle} \\ \text{Schreibweise für} \\ (\hat{H}_0 - E\mathbb{1})^{-1}}} \hat{V} |\psi\rangle \quad (4.321)$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{1}{\hat{H}_0 - E} \hat{V} |\psi\rangle. \quad (4.322)$$

In der Ortsdarstellung ist dies die Lippmann-Schwinger-Gleichung (4.293). Die Herleitung war aber nicht sauber, da $\hat{H}_0 - E$ nicht allgemein invertierbar ist, für Eigenwerte E von \hat{H}_0 nämlich nicht. $|\psi_0\rangle$ soll aber ein ungebundener Zustand sein, also liegt E im kontinuierlichen Spektrum und $\hat{H}_0 - E$ ist für alle E nicht invertierbar.

Wie lösen wir dieses Problem? Dazu betrachten wir die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung. Uns interessiert der Fall, dass der Zustand lange vor der Streuung, für $t \rightarrow -\infty$, ein *freier* Zustand ist, also

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} (|\psi(t)\rangle - |\psi_0(t)\rangle) = 0 \quad (4.323)$$

oder kürzer, aber unsauber,

$$|\psi(-\infty)\rangle = |\psi_0(-\infty)\rangle. \quad (4.324)$$

Hier soll $|\psi(t)\rangle$ eine *stationäre* Lösung des vollen Streuproblems zu einer Eigenenergie E sein. $|\psi_0(t)\rangle$ ist die Lösung der freien Schrödinger-Gleichung, die zu einem frühen Zeitpunkt $t \rightarrow -\infty$ mit $|\psi(t)\rangle$ übereinstimmt. $|\psi_0(t)\rangle$ ist i. A. keine *stationäre* Lösung der freien Gleichung. Unter Verwendung der Zeitentwicklungsoperatoren zu den jeweiligen Hamiltonians \hat{H}_0 und \hat{H} folgt

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle \equiv |\psi_0(0)\rangle &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{-i\hat{H}_0(0-t)/\hbar} |\psi_0(t)\rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{i\hat{H}_0 t} |\psi(t)\rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{H} t/\hbar} |\psi(0)\rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{-iEt/\hbar} |\psi\rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{i(\hat{H}_0 - E)t/\hbar} |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (4.325)$$

Bei der Ersetzung von \hat{H} durch E haben wir verwendet, dass $|\psi(t)\rangle$ stationär sein soll.

Für den Grenzwert für $t \rightarrow -\infty$ können wir folgende Identität ausnutzen:

$$\begin{aligned}
\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \eta \int_{-\infty}^0 dt e^{\eta t} f(t) & \quad \left| \begin{array}{l} \text{Substitution } t = \frac{u}{\eta} \\ \text{beachte } u < 0 \end{array} \right. \\
= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 du e^u f\left(\frac{u}{\eta}\right) = \int_{-\infty}^0 du e^u \lim_{\eta \rightarrow 0^+} f\left(\frac{u}{\eta}\right) \\
= f(-\infty) \int_{-\infty}^0 du e^u = \lim_{t \rightarrow -\infty} f(t).
\end{aligned} \tag{4.326}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
|\psi_0\rangle &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{\eta t/\hbar} e^{i(\hat{H}_0 - E)t/\hbar} |\psi\rangle \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt e^{i(\hat{H}_0 - E - i\eta)t/\hbar} |\psi\rangle \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \underbrace{\frac{\eta}{i(\hat{H}_0 - E - i\eta)}}_{\text{Operatorinverses}} \underbrace{e^{i(\hat{H}_0 - E - i\eta)t/\hbar} \Big|_{-\infty}^0}_{= \mathbb{1} \text{ da } \eta > 0} |\psi\rangle \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{i\eta}{E - \hat{H}_0 + i\eta} |\psi\rangle.
\end{aligned} \tag{4.327}$$

Hierfür findet man oft folgende Schreibweisen: Entweder man lässt $\lim_{\eta \rightarrow 0^+}$ weg (der Grenzübergang ist aber impliziert) oder man schreibt

$$|\psi_0\rangle = \frac{i0^+}{E - \hat{H}_0 + i0^+} |\psi\rangle. \tag{4.328}$$

Eine alternative Herleitung betrachtet ein Streupotential, das adiabatisch, d. h. sehr langsam, eingeschaltet wird, $\hat{V}(t) = e^{\eta t} \hat{V}$. Dies führt auf dieselben Ergebnisse.

Wir definieren den *Greenschen Operator* zu \hat{H}_0 :

$$\hat{G}_0^+ := \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+}. \tag{4.329}$$

Der Operator $E - \hat{H}_0 + i0^+$ ist wegen des Imaginärteils $i0^+$ invertierbar.

Nun folgt

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle - |\psi_0\rangle &= \left(\mathbb{1} - \frac{i0^+}{E - \hat{H}_0 + i0^+} \right) |\psi\rangle \\
&= \left[\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+} (E - \hat{H}_0 + i0^+) - \frac{i0^+}{E - \hat{H}_0 + i0^+} \right] |\psi\rangle \\
&= \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+} (E - \hat{H}_0 + i0^+ - i0^+) |\psi\rangle = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+} (\hat{H} - \hat{H}_0) |\psi\rangle \\
&= \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+} \hat{V} |\psi\rangle,
\end{aligned} \tag{4.330}$$

also

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+} \hat{V} |\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \hat{G}_0^+ \hat{V} |\psi\rangle, \tag{4.331}$$

oder äquivalent

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle - \frac{1}{\hat{H}_0 - (E + i0^+)} \hat{V} |\psi\rangle, \tag{4.332}$$

anstelle von Gl. (4.322). Diese beiden Formen sind die allgemeine, basisunabhängige *Lippmann-Schwinger-Gleichung*.

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung kann wieder durch Iteration gelöst werden, was auf eine *Bornsche Reihe* führt:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\psi_0\rangle + \hat{G}_0^+ \hat{V} |\psi_0\rangle + \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} |\psi_0\rangle + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (\hat{G}_0^+ \hat{V})^n |\psi_0\rangle = \frac{1}{\mathbb{1} - \hat{G}_0^+ \hat{V}} |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (4.333)$$

Wir überprüfen noch, dass das Lippmann-Schwinger-Ergebnis die Schrödinger-Gleichung löst: Es ist

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= (\mathbb{1} - \hat{G}_0^+ \hat{V})^{-1} |\psi_0\rangle = [\mathbb{1} - (E - \hat{H}_0 + i0^+)^{-1} \hat{V}]^{-1} |\psi_0\rangle \\ &= (E - \hat{H}_0 + i0^+ - \hat{V})^{-1} (E - \hat{H}_0 + i0^+) |\psi_0\rangle \\ &= (E - \hat{H} + i0^+)^{-1} i0^+ |\psi_0\rangle \end{aligned} \quad (4.334)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (E - \hat{H}) |\psi\rangle &= (E - \hat{H} + i0^+ - i0^+) |\psi\rangle \\ &= \cancel{(E - \hat{H} + i0^+)} \cancel{(E - \hat{H} + i0^+)^{-1}} i0^+ |\psi_0\rangle - i0^+ (E - \hat{H} + i0^+)^{-1} i0^+ |\psi_0\rangle \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} i\eta \left(\mathbb{1} - \frac{i\eta}{E - \hat{H} + i\eta} \right) |\psi_0\rangle = 0. \end{aligned} \quad (4.335)$$

□

Man schreibt die Lippmann-Schwinger-Gleichung auch in Operatorform mit Hilfe des *Møller-Operators* $\hat{\Omega}^+$. Dieser ist definiert durch die Beziehung

$$|\psi\rangle = \hat{\Omega}^+ |\psi_0\rangle, \quad (4.336)$$

wobei $|\psi\rangle, |\psi_0\rangle$ weiterhin die oben angeführten Bedingungen erfüllen sollen, insbesondere $|\psi(-\infty)\rangle = |\psi_0(-\infty)\rangle$. Dann ist

$$\hat{\Omega}^+ |\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle + \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{\Omega}^+ |\psi_0\rangle. \quad (4.337)$$

Da dies für jeden Zustand $|\psi_0\rangle$ gilt, erhalten wir die *Lippmann-Schwinger-Gleichung in Operatorform*:

$$\hat{\Omega}^+ = \mathbb{1} + \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{\Omega}^+. \quad (4.338)$$

Die explizite Lösung lässt sich leicht finden:

$$(\mathbb{1} - \hat{G}_0^+ \hat{V}) \hat{\Omega}^+ = \mathbb{1} \quad (4.339)$$

$$\Rightarrow \hat{\Omega}^+ = \frac{1}{\mathbb{1} - \hat{G}_0^+ \hat{V}}. \quad (4.340)$$

Eine andere Form der Lösung ergibt sich mit

$$\hat{\Omega}^+ = \mathbb{1} + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+} \hat{V} \hat{\Omega}^+ \quad (4.341)$$

$$\Rightarrow (E - \hat{H}_0 + i0^+) \hat{\Omega}^+ = E - \hat{H}_0 + i0^+ + \hat{V} \hat{\Omega}^+ \quad (4.342)$$

$$\Rightarrow (E - \hat{H} + i0^+) \hat{\Omega}^+ = E - \hat{H}_0 + i0^+ = E - \hat{H} + i0^+ + \hat{V} \quad (4.343)$$

$$\Rightarrow \hat{\Omega}^+ = \mathbb{1} + \frac{1}{E - \hat{H} + i0^+} \hat{V} \quad (4.344)$$

und der Definition des Greenschen Operators zum vollen Hamiltonian \hat{H} ,

$$\hat{G}^+ := \frac{1}{E - \hat{H} + i0^+}, \quad (4.345)$$

(ohne Subskripte „0“) zu

$$\hat{\Omega}^+ = \mathbb{1} + \hat{G}^+ \hat{V}. \quad (4.346)$$

Es ist für formale Manipulationen oft nützlich, Streuzustände $|\psi^-\rangle$ zu betrachten, die im *Endzustand*, nicht im Anfangszustand, mit freien Zuständen $|\psi_0\rangle$ übereinstimmen. Dies ist natürlich keine experimentell leicht zu realisierende Situation. Wir definieren den Møller-Operator $\hat{\Omega}^-$ durch

$$|\psi^-\rangle = \hat{\Omega}^- |\psi_0\rangle, \quad (4.347)$$

wobei der einzige Unterschied ist, dass nun gelten soll

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} (|\psi^-(t)\rangle - |\psi_0(t)\rangle) = 0. \quad (4.348)$$

Völlig analoge Herleitungen ergeben

$$\hat{\Omega}^- = \mathbb{1} + \hat{G}_0^- \hat{V} \hat{\Omega}^-, \quad (4.349)$$

$$\hat{\Omega}^- = \frac{1}{\mathbb{1} - \hat{G}_0^- \hat{V}}, \quad (4.350)$$

$$\hat{\Omega}^- = \mathbb{1} + \hat{G}^- \hat{V} \quad (4.351)$$

mit

$$\hat{G}_0^- := \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i0^+}, \quad (4.352)$$

$$\hat{G}^- := \frac{1}{E - \hat{H} - i0^+}. \quad (4.353)$$

Man nennt \hat{G}_0^+ , \hat{G}^+ *retardierte* und \hat{G}_0^- , \hat{G}^- *avancierte* Greensche Operatoren. Erstere beschreiben die Propagation von Zuständen vorwärts in der Zeit, ausgehend von einem gegebenen Anfangszustand, letztere die Propagation rückwärts in der Zeit, hin zu einem gegebenen Endzustand.

4.6.2 Die S-Matrix

Die gesamte Information über das Verhalten eines Streuers lässt sich mit Hilfe der Streumatrix oder S-Matrix ausdrücken. Wir betrachten Teilchen, die sich für $t \rightarrow -\infty$ im *freien* Zustand $|\psi_{0,n}(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_{0,n}\rangle$ befanden, d. h. ihr Zustand $|\psi_n^+(t)\rangle$ erfüllt

$$|\psi_n^+(-\infty)\rangle = |\psi_{0,n}(-\infty)\rangle. \quad (4.354)$$

n bezeichnet einen geeigneten Satz von Quantenzahlen. Wir wollen nun die Frage beantworten, welcher Anteil der Teilchen sich nach der Streuung, für $t \rightarrow +\infty$, im *freien* Zustand $|\psi_{0,m}(\infty)\rangle$ befindet. Die Antwort wird sicherlich von der *Übergangsamplitude*

$$\langle \psi_{0,m}(\infty) | \psi_n^+(\infty) \rangle \quad (4.355)$$

(mit geeigneter Normierung) bestimmt sein. Diese Übergangsamplitude können wir schreiben als

$$\begin{aligned} \langle \psi_{0,m}(\infty) | \psi_n^+(\infty) \rangle &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi_{0,m}(t) | \psi_n^+(t) \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow -\infty} \langle \psi_{0,m}(t) | e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} | \psi_n^+(t') \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow -\infty} \langle \psi_{0,m}(t) | e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} | \psi_{0,n}(t') \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow -\infty} \underbrace{\langle \psi_{0,m}(0) |}_{\langle \psi_{0,m} |} e^{+i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar} \underbrace{| \psi_{0,n}(0) \rangle}_{| \psi_{0,n} \rangle}. \end{aligned} \quad (4.356)$$

Der hier auftretende Operator ist der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungs- (Dirac-) Bild,

$$\hat{U}_D(t, t') = e^{+i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar}. \quad (4.357)$$

Also ist

$$\langle \psi_{0,m}(\infty) | \psi_n^+(\infty) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow -\infty} \langle \psi_{0,m} | \hat{U}_D(t, t') | \psi_{0,n} \rangle. \quad (4.358)$$

Für die Berechnung sind die Møller-Operatoren $\hat{\Omega}^\pm$ nützlich. Dabei müssen wir jetzt aufpassen, welche Energie E in $\hat{\Omega}^\pm$ auftritt und wir machen diese Energieabhängigkeit von $\hat{\Omega}^\pm(E)$ daher explizit: Die einlaufende (auslaufende) Energie sei E_n (E_m). Da wir einlaufende und auslaufende Zustände betrachten, die für $t \rightarrow -\infty$ bzw. $t \rightarrow \infty$ mit freien Lösungen $|\psi_{0,n}\rangle$ bzw. $|\psi_{0,m}\rangle$ übereinstimmen und wir annehmen können, dass ein Teilchen für $t \rightarrow \pm\infty$ nichts vom Streupotential merkt, können wir E_n (E_m) als *Eigenenergien* von *stationären* freien Lösungen $|\psi_{0,n}\rangle$ ($|\psi_{0,m}\rangle$) auffassen. Eine saubere Herleitung betrachten ein Streupotential $\hat{V}(t)$, das adiabatisch ein- und wieder ausgeschaltet wird.

Ausgehend von der dritten Zeile von Gl. (4.356) schreiben wir nun

$$\begin{aligned} \langle \psi_{0,m}(\infty) | \psi_n^+(\infty) \rangle &= \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi_{0,m}(t) | e^{-i\hat{H}t/\hbar} \lim_{t' \rightarrow -\infty} e^{i\hat{H}t'/\hbar} | \psi_{0,n}(t') \rangle \\ &= \langle \psi_m^-(0) | \psi_n^+(0) \rangle \\ &= \langle \psi_m^- | \psi_n^+ \rangle \\ &= \langle \psi_{0,m} | [\hat{\Omega}^-(E_m)]^\dagger \hat{\Omega}^+(E_n) | \psi_{0,n} \rangle. \end{aligned} \quad (4.359)$$

Hier ist $|\psi_m^-\rangle$ der Zustand, der für $t \rightarrow +\infty$ in den freien Zustand $|\psi_{0,m}\rangle$ übergeht, vgl. den vorigen Abschnitt. Wir definieren nun die *S-Matrix*

$$\hat{S} \equiv \hat{S}(E_m, E_n) := [\hat{\Omega}^-(E_m)]^\dagger \hat{\Omega}^+(E_n). \quad (4.360)$$

Damit lauten die Übergangsamplituden

$$S_{mn} := \langle \psi_{0,m} | \hat{S} | \psi_{0,n} \rangle = \langle \psi_m^- | \psi_n^+ \rangle. \quad (4.361)$$

Wir bestimmen nun S_{mn} mit Hilfe der Ergebnisse des letzten Abschnitts. Es gilt

$$\begin{aligned} |\psi_m^- \rangle - |\psi_m^+ \rangle &= [\hat{\Omega}^-(E_m) - \hat{\Omega}^+(E_m)] | \psi_{0,m} \rangle \\ &= [\mathbb{1} + \hat{G}^-(E_m)\hat{V} - \mathbb{1} - \hat{G}^+(E_m)\hat{V}] | \psi_{0,m} \rangle \\ &= [\hat{G}^-(E_m) - \hat{G}^+(E_m)] \hat{V} | \psi_{0,m} \rangle. \end{aligned} \quad (4.362)$$

Wir multiplizieren diese Gleichung von links mit $\langle \psi_n^+ |$ und erhalten

$$\langle \psi_n^+ | \psi_m^- \rangle - \langle \psi_n^+ | \psi_m^+ \rangle = \langle \psi_n^+ | [\hat{G}^-(E_m) - \hat{G}^+(E_m)] \hat{V} | \psi_{0,m} \rangle \quad (4.363)$$

$$\Rightarrow \langle \psi_m^- | \psi_n^+ \rangle^* - \langle \psi_{0,n}(-\infty) | \psi_{0,m}(-\infty) \rangle = \langle \psi_{0,n} | [\hat{\Omega}^+(E_n)]^\dagger [\hat{G}^-(E_m) - \hat{G}^+(E_m)] \hat{V} | \psi_{0,m} \rangle. \quad (4.364)$$

Im zweiten Term auf der linken Seite haben wir verwendet, dass das Skalarprodukt invariant unter unitären Transformationen ist, hier konkret unter der Zeitentwicklung. Es folgt

$$S_{mn}^* - \delta(m-n) = \langle \psi_{0,n} | [\hat{\Omega}^+(E_n)]^\dagger [\hat{G}^-(E_m) - \hat{G}^+(E_m)] \hat{V} | \psi_{0,m} \rangle. \quad (4.365)$$

Hier bedeutet die δ -Funktion $\delta(m-n)$ ein Produkt von δ -Distributionen für alle kontinuierlichen Quantenzahlen und von Kronecker- δ -Symbolen für alle diskreten Quantenzahlen. Komplexkonjugation der letzten Gleichung liefert

$$S_{mn} = \delta(m-n) + \langle \psi_{0,m} | \hat{V} [\hat{G}^-(E_m) - \hat{G}^+(E_m)]^\dagger \hat{\Omega}^+(E_n) | \psi_{0,n} \rangle. \quad (4.366)$$

Nun ist

$$(\hat{G}^\pm)^\dagger = \left(\frac{1}{E - \hat{H} \pm i0^+} \right)^\dagger = \frac{1}{E - \hat{H} \mp i0^+} = \hat{G}^\mp \quad (4.367)$$

und es folgt

$$S_{mn} = \delta(m-n) + \langle \psi_{0,m} | \hat{V} [\hat{G}^+(E_m) - \hat{G}^-(E_m)] \hat{\Omega}^+(E_n) | \psi_{0,n} \rangle. \quad (4.368)$$

Wir benötigen also die Differenz

$$\hat{G}^+(E_m) - \hat{G}^-(E_m) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{E_m - \hat{H} + i\eta} - \frac{1}{E_m - \hat{H} - i\eta} \right) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{-2i\eta}{(E_m - \hat{H})^2 + \eta^2}. \quad (4.369)$$

Im Ausdruck für S_{mn} wirkt dieser Operator auf $\hat{\Omega}^+(E_n)|\psi_{0,n}\rangle = |\psi_n^+\rangle$, was ein Eigenzustand zu \hat{H} mit der Eigenenergie E_n ist. Wir können also \hat{H} durch den Eigenwert E_n ersetzen und erhalten eine Lorentz-Funktion, die im Grenzfall $\eta \rightarrow 0^+$ in die δ -Distribution übergeht,

$$\dots = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{-2i\eta}{(E_m - E_n)^2 + \eta^2} = -2\pi i \delta(E_m - E_n). \quad (4.370)$$

Damit ist

$$S_{mn} = \delta(m - n) - 2\pi i \delta(E_m - E_n) \langle \psi_{0,m} | \underbrace{\hat{V} \hat{\Omega}^+}_{|\psi_n^+\rangle} |\psi_{0,n}\rangle. \quad (4.371)$$

Dies ist die *Grundformel der Streutheorie* oder auch *Streuformel*. Wir haben das Energieargument von $\hat{\Omega}^+$ weggelassen, da es wegen der δ -Funktion keine Doppeldeutigkeit mehr gibt. Beachte, dass der erste Term einfach die Matrixelemente der Einheitsmatrix darstellt, während die δ -Funktion im zweiten Term Energieerhaltung garantiert. Ohne Streuung hätten wir $S_{mn} = \delta(m - n)$, also wäre der Endzustand gleich dem Anfangszustand (bis auf einen energieabhängigen Phasenfaktor), wie erwartet.

4.6.3 Die T -Matrix

Wir wollen zum Schluss die Grundformel der Streutheorie noch etwas umschreiben. Dadurch wird sie symmetrischer in Anfangs- und Endzustand. Außerdem werden wir eine Verbindung zur zeitabhängigen Störungstheorie erkennen. Es ist

$$\begin{aligned} S_{mn} &= \delta(m - n) - 2\pi i \delta(E_m - E_n) \langle \psi_{0,m} | \hat{V} \hat{\Omega}^+ |\psi_{0,n}\rangle \\ &= \delta(m - n) - 2\pi i \delta(E_m - E_n) \langle \psi_{0,m} | \hat{V} \frac{1}{\mathbb{1} - \hat{G}_0^+ \hat{V}} |\psi_{0,n}\rangle \\ &= \delta(m - n) - 2\pi i \delta(E_m - E_n) \langle \psi_{0,m} | \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \dots |\psi_{0,n}\rangle \end{aligned} \quad (4.372)$$

Wir definieren die *Transfermatrix* oder *T-Matrix* durch ihre Matrixelemente

$$\begin{aligned} T_{mn} &\equiv T_{mn}(E_n) \equiv \langle \psi_{0,m} | \hat{T}(E_n) |\psi_{0,n}\rangle \\ &:= \langle \psi_{0,m} | \hat{V} \hat{\Omega}^+ |\psi_{0,n}\rangle \\ &= \langle \psi_{0,m} | \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} \hat{G}_0^+ \hat{V} + \dots |\psi_{0,n}\rangle. \end{aligned} \quad (4.373)$$

Damit ist

$$S_{mn} = \delta(m - n) - 2\pi i \delta(E_m - E_n) T_{mn}. \quad (4.374)$$

Die letzte Form in Gl. (4.373) gibt \hat{T} als Entwicklung in der Anzahl der Streuungen am Potential \hat{V} wieder. Zwischen den Streuereignissen wird die Propagation der Teilchen durch den *freien* Greenschen Operator \hat{G}_0^+ beschrieben:

$$\hat{T} = \begin{array}{c} \bullet \\ \hat{V} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \nearrow \\ \hat{G}_0^+ \\ \searrow \\ \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \nearrow \quad \searrow \\ \bullet \quad \bullet \end{array} + \dots$$

Hier haben wir T_{mn} und damit S_{mn} explizit durch eine Bornsche Reihe ausgedrückt. Die erste Bornsche Näherung besteht in diesem Formalismus darin, die Reihe nach dem ersten Glied abzubrechen,

$$S_{mn}^{(1)} = \delta(m - n) - 2\pi i \delta(E_m - E_n) T_{mn}^{(1)} \quad (4.375)$$

mit

$$T_{mn}^{(1)} = \langle \psi_{0,m} | \hat{V} |\psi_{0,n}\rangle. \quad (4.376)$$

Dies sind einfach die Matrixelemente des Streupotentials bezüglich der freien Zustände. Diese Näherung erinnert an Fermis Goldene Regel aus der zeitabhängigen Störungstheorie und in der Tat ist die obige erste Bornsche Näherung deren Verallgemeinerung auf Streuzustände.

4.6.4 Zusammenhang mit der Streuamplitude

Die Verbindung zwischen der abstrakten Streutheorie und der vorher betrachteten Streuamplitude $f(\vartheta, \varphi)$ können wir erkennen, wenn wir für $|\psi_{0,m}\rangle, |\psi_{0,n}\rangle$ speziell ebene Wellen einsetzen, die für den Spezialfall

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \quad (4.377)$$

offenbar freie Lösungen sind. Wir schreiben also für die Streuformel

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} &= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - 2\pi i \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \\ &= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - 2\pi i \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m} [(k')^2 - k^2]\right) T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \\ &= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) - 2\pi i \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\delta(k' - k)}{2k} T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \\ &= \underbrace{\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}_{\text{Vektoren!}} - 2\pi i \frac{m}{\hbar^2 k} \underbrace{\delta(k' - k)}_{\text{Beträge!}} T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.378)$$

mit

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}' | \hat{T}(E_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle \quad (4.379)$$

mit Impulseigenzuständen (ebenen Wellen) $|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k}'\rangle$. Nun ist

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}' | \hat{V} \hat{\Omega}^+(E_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle = \int d^3r d^3r' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \hat{V} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{\Omega}^+(E_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle \quad (4.380)$$

und $\hat{\Omega}^+(E_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle$ ist der sich aus der ebenen Welle $|\mathbf{k}\rangle$ für $t \rightarrow -\infty$ entwickelnde Zustand. Also finden wir die Wellenfunktionen

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \psi_0(\mathbf{r}), \\ \langle \mathbf{r} | \hat{\Omega}^+(E_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \psi(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4.381)$$

wobei wir geeignete Normierungsfaktoren eingesetzt haben. Demnach ist

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \langle \mathbf{r}' | \hat{V} | \mathbf{r} \rangle \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'), \quad (4.382)$$

vgl. Gleichungen (2.70) und (2.72). Da die Streuung elastisch ist, gilt $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$. Wir schreiben $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}$, wobei der Einheitsvektor $\hat{\mathbf{r}}$ die betrachtete auslaufende Richtung (Richtung des Detektors) angibt. Damit ist

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (4.383)$$

Jetzt erinnern wir uns an die exakte Darstellung (4.299) der Streuamplitude,

$$f(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'), \quad (4.384)$$

und folgern für diesen Spezialfall

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} f(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} f(\vartheta, \varphi), \quad (4.385)$$

wobei ϑ, φ die Polarwinkel von $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}$ relativ zu \mathbf{k} , also zur Strahlachse, sind. Damit erkennen wir, dass die T -Matrix eine natürliche Verallgemeinerung der Streuamplitude auf das allgemeine Streuproblem ist, in dem \hat{H}_0 praktisch beliebig und der einlaufende Zustand nicht unbedingt eine ebene Welle sind. Abschließend sei erwähnt, dass sich die basisunabhängige Streutheorie mit wenig Mühe auf die relativistische Dirac-Theorie erweitern lässt.

4.7 Anhang: Zeitabhängige Störungstheorie

In diesem Abschnitt wird kurz die *zeitabhängige* Störungstheorie eingeführt bzw. wiederholt. Dies bietet sich an, da sie mit der formalen Streutheorie verwandt ist. Der Abschnitt ist als ergänzende Information gedacht.

Die Aufgabenstellung der zeitabhängigen Störungstheorie besteht darin, die zeitliche Entwicklung eines Systems unter dem Einfluss einer zeitabhängigen Störung zu bestimmen. Der Hamilton-Operator hat die Form (wir verzichten hier auf den Zirkumflex bei Operatoren)

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (4.386)$$

wobei H_0 einfach und zeitunabhängig sein soll und $V(t)$ die zeitabhängige Störung ist. Für diesen Fall ist eine Formulierung nützlich, die sich auf die nichttriviale Zeitentwicklung aufgrund von $V(t)$ konzentriert. Eine solche Formulierung wird durch das Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild) realisiert.

4.7.1 Bildwechsel in der Quantentheorie

Es soll kurz an die Beziehungen zwischen Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungsbild erinnert werden. Die einzigen beobachtbaren Größen in der Quantentheorie sind Matrixelemente von (hermiteschen) Operatoren, $\langle \varphi | A | \psi \rangle$. Diese sind invariant unter unitären Transformationen

$$|\varphi\rangle \rightarrow U |\varphi\rangle, \quad (4.387)$$

$$|\psi\rangle \rightarrow U |\psi\rangle, \quad (4.388)$$

$$A \rightarrow U A U^\dagger \quad (4.389)$$

(U unitär), da unter dieser Transformation

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle \rightarrow \langle \varphi | \underbrace{U^\dagger U}_1 A \underbrace{U^\dagger U}_1 | \psi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle \quad (4.390)$$

gilt. Dies kann man ausnutzen, um eine dem jeweiligen Problem angemessene Darstellung zu konstruieren.

Im *Schrödinger-Bild* haben Operatoren höchstens eine explizite Zeitabhängigkeit (z. B. zeitabhängiges äußeres Potential). Zustände erfüllen die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (4.391)$$

Wir betrachten zunächst einen zeitunabhängigen Hamiltonian H . Das ist nicht konzeptionell notwendig, macht die Diskussion aber klarer. Dann ist die formale Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \quad (4.392)$$

Im *Heisenberg-Bild* verwenden wir eine unitäre Transformation, um die Zustände zeitunabhängig zu machen. Die gesamte Dynamik ist dann in den Operatoren enthalten. Dazu wählen wir, für zeitunabhängiges H , $U = e^{iHt/\hbar}$. Das dreht gerade die Zeitentwicklung der Zustände im Schrödinger-Bild zurück:

$$\underbrace{|\psi(t)\rangle_H}_{\text{Heisenberg}} := e^{iHt/\hbar} \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger (ohne Index)}} = e^{iHt/\hbar} e^{-iHt/\hbar} \underbrace{|\psi(0)\rangle}_{\text{Schrödinger}} = |\psi(0)\rangle \quad (4.393)$$

(zeitunabhängig). Andererseits werden Operatoren zu

$$A_H(t) := e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}. \quad (4.394)$$

Hier ist A ein Operator im Schrödinger-Bild, der explizit zeitabhängig sein kann. Zum einen folgt

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle_H = 0 \quad (4.395)$$

und zum anderen

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} A_H &= \frac{d}{dt} e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} \\
&= \frac{iH}{\hbar} e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} \frac{\partial A}{\partial t} e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} \left(-\frac{iH}{\hbar} \right) \\
&= \frac{i}{\hbar} \left(H \underbrace{e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}}_{A_H} - \underbrace{e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} H}_{A_H} \right) + e^{iHt/\hbar} \frac{\partial A}{\partial t} e^{-iHt/\hbar} \\
&= \frac{i}{\hbar} [H, A_H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H.
\end{aligned} \tag{4.396}$$

Das ist die bekannte *Heisenberg-Gleichung*. Sie ist äquivalent zur Schrödinger-Gleichung.

Im *Wechselwirkungsbild* oder *Dirac-Bild* (es hat nichts mit der relativistischen Dirac-Quantenmechanik zu tun) führen wir eine unitäre Transformation durch, die nur *einen Teil* des Hamiltonians enthält. Es sei

$$H(t) = H_0 + V(t), \tag{4.397}$$

wobei dieser Formalismus wie erwähnt nützlich ist, wenn H_0 zeitunabhängig und einfach ist. $V(t)$ kann explizit von der Zeit abhängen. Wir verwenden $U = e^{iH_0 t/\hbar}$:

$$|\psi(t)\rangle_D \underset{\text{Dirac}}{:=} e^{iH_0 t/\hbar} \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger}} \tag{4.398}$$

und

$$A_D(t) := e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}. \tag{4.399}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_D &= i\hbar \frac{d}{dt} e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle \\
&= -H_0 e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle + e^{iH_0 t/\hbar} H |\psi(t)\rangle \\
&= -H_0 e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle + e^{iH_0 t/\hbar} \overbrace{H e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar}}^{=1} |\psi(t)\rangle \\
&\quad \uparrow \\
&\quad H_0 = e^{iH_0 t/\hbar} H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} = H_{0,D} \\
&= V_D(t) |\psi(t)\rangle_D.
\end{aligned} \tag{4.400}$$

Wir erhalten eine Gleichung von der Form der Schrödinger-Gleichung für $|\psi(t)\rangle_D$, die nur die *Störung* (den komplizierten Anteil) V_D enthält. Die einfache Zeitentwicklung aufgrund von H_0 steckt einzig in den Operatoren. Die Lösung ist von der Form

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D \tag{4.401}$$

mit einem unitären Operator $U_D(t, t_0)$, der natürlich auch nur von V_D abhängen kann. Offensichtlich ist $U_D(t_0, t_0) = \mathbb{1}$.

Wir betrachten zunächst eine zeitunabhängige Störung V . Dann ist auch H zeitunabhängig und es gilt

$$|\psi(t)\rangle_D = e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle. \tag{4.402}$$

Beachte, dass H_0 und H i. A. nicht kommutieren, daher gilt *nicht*

$$e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} \stackrel{?}{=} e^{i(H_0 - H)t/\hbar} = e^{-iVt/\hbar}. \tag{4.403}$$

Man erkennt leicht, dass diese Gleichung für nicht kommutierende Operatoren nicht stimmt:

$$e^A e^B \cong \left(\mathbb{1} + A + \frac{1}{2} A^2 \right) \left(\mathbb{1} + B + \frac{1}{2} B^2 \right)$$

$$\cong \mathbb{1} + A + B + \underline{AB} + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{2}B^2, \quad (4.404)$$

während

$$\begin{aligned} e^{A+B} &\cong \mathbb{1} + A + B + \frac{1}{2}(A+B)^2 \\ &\cong \mathbb{1} + A + B + \frac{1}{2}AB + \frac{1}{2}BA + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{2}B^2. \end{aligned} \quad (4.405)$$

Es folgt auch

$$|\psi(t_0)\rangle_D = e^{iH_0 t_0/\hbar} e^{-iH t_0/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (4.406)$$

$$\Rightarrow |\psi(0)\rangle = e^{iH t_0/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\psi(t_0)\rangle_D, \quad (4.407)$$

also

$$|\psi(t)\rangle_D = e^{iH_0 t/\hbar} \underbrace{e^{-iH t/\hbar} e^{iH t_0/\hbar}} e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\psi(t_0)\rangle_D, \quad (4.408)$$

so dass gilt

$$U_D(t, t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar}. \quad (4.409)$$

Man sieht, dass dieser Operator unitär ist.

Für eine allgemeine, zeitabhängige Störung $V(t)$ setzen wir

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D \quad (4.410)$$

in die Schrödinger-Gleichung ein:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D = V_D(t) U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D \quad \forall |\psi(t_0)\rangle_D \quad (4.411)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} U_D(t, t_0) = V_D(t) U_D(t, t_0) \quad (4.412)$$

mit der Anfangsbedingung $U_D(t_0, t_0) = \mathbb{1}$. Dies ist eine Differentialgleichung für eine operatorwertige Funktion. Integration liefert

$$U_D(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) U_D(t_1, t_0). \quad (4.413)$$

Nun haben wir eine Integralgleichung erhalten. Was haben wir dadurch gewonnen? Wir können die Gleichung iterieren, indem wir $U_D(t, t_0)$ immer wieder rechts einsetzen:

$$U_D(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_D(t_2) + \dots \quad (4.414)$$

Das können wir kompakter schreiben. Der Term n -ter Ordnung enthält

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_D(t_1) \cdots V_D(t_n) &= \underbrace{\int_{t_0}^t dt_1 dt_2 \cdots dt_n}_{\substack{\text{anwachsende Argumente} \\ \text{nur } t_0 \leq t_n \leq t_{n-1} \leq \dots \leq t_2 \leq t_1 \leq t}} V_D(t_1) V_D(t_2) \cdots V_D(t_n) \\ &=: \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 dt_2 \cdots dt_n \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Anzahl der Permutationen}}}{T} V_D(t_1) \cdots V_D(t_n). \end{aligned} \quad (4.415)$$

Der *Zeitordnungsoperator* ist definiert durch

$$T A(t_1) B(t_2) = \begin{cases} A(t_1) B(t_2) & \text{für } t_2 < t_1, \\ B(t_2) A(t_1) & \text{für } t_2 > t_1. \end{cases} \quad (4.416)$$

Es kommt natürlich nicht darauf an, wie wir die Zeitvariablen numerieren, nur dass sie der Größe nach sortiert sind. Es folgt

$$\begin{aligned}
 U_D(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots dt_n T V_D(t_1) \cdots V_D(t_n) \\
 &=: T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_D(t') \right).
 \end{aligned}
 \tag{4.417}$$

Dies definiert die *zeitgeordnete Exponentialfunktion*. Sie ist gegeben durch die Taylor-Reihe, wobei der Zeitordnungsoperator auf jeden Term unter dem Integral anzuwenden ist.

Die Reihenentwicklung für $U_D(t, t_0)$ in Potenzen der Störung V_D lässt sich mit Hilfe von Diagrammen veranschaulichen:

$$U_D(t, t_0) = \begin{array}{c} \uparrow t \\ | \\ | \\ | \\ \downarrow t_0 \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ | \\ \downarrow \end{array} V_D(t_1) + \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \downarrow \end{array} \begin{array}{l} V_D(t_1) \\ V_D(t_2) \end{array} + \dots$$

Ist V_D klein, so kann man die Reihe abbrechen. Es wird oft erst nachträglich klar, ob man ein V_D als klein ansehen kann. Z. B. lautet die Näherung erster Ordnung

$$U_D(t, t_0) \cong \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1).
 \tag{4.418}$$

4.7.2 Fermis Goldene Regel

Fermis Goldene Regel ergibt sich in der zeitabhängigen Störungstheorie als Näherung für die *Übergangsrate* von einem Zustand $|i\rangle$ in einen Zustand $|f\rangle$. Wir definieren die Rate wie folgt: Das System startet zur Zeit t_0 im Zustand

$$|\psi(t_0)\rangle = |i\rangle
 \tag{4.419}$$

(im Schrödinger-Bild). Der Hamiltonian sei

$$H = H_0 + V
 \tag{4.420}$$

mit zeitunabhängigem H_0 . Wir nehmen nun an, dass V langsam eingeschaltet wird. Dazu schreiben wir die Zeitabhängigkeit explizit hin,

$$H(t) = H_0 + V e^{\eta t/\hbar},
 \tag{4.421}$$

wobei $\eta > 0$ klein und V zeitunabhängig ist. Dann ist

$$|\psi(t_0)\rangle_D = e^{iH_0 t_0/\hbar} |\psi(t_0)\rangle = e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle.
 \tag{4.422}$$

Außerdem ist

$$|\psi(t)\rangle_D = U_D(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_D
 \tag{4.423}$$

$$\Rightarrow \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\text{Schrödinger}} = e^{-iH_0 t/\hbar} U_D(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle.
 \tag{4.424}$$

Die *Wahrscheinlichkeitsamplitude* dafür, das System zur Zeit t im Zustand $|f\rangle$ zu finden, ist

$$\langle f | \psi(t) \rangle = \langle f | e^{-iH_0 t/\hbar} U_D(t, t_0) e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle.
 \tag{4.425}$$

Wir betrachten Übergänge zwischen Eigenzuständen $|i\rangle, |f\rangle$ von H_0 mit Energien E_i, E_f und nehmen $|i\rangle \neq |f\rangle$ an. In erster Ordnung in V_D gilt

$$\begin{aligned}
 \dots &\cong \langle f| e^{-iH_0 t/\hbar} \left(\mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) \right) e^{iH_0 t_0/\hbar} |i\rangle \\
 &= \langle f| e^{-iE_f t/\hbar} \left(\underbrace{\mathbb{1}}_{\text{da } \langle f|i\rangle=0} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V_D(t_1) \right) e^{iE_i t_0/\hbar} |i\rangle \\
 &= \langle f| e^{-iE_f t/\hbar} \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{iH_0 t_1/\hbar} \underbrace{V(t_1)}_{V e^{i\eta t_1/\hbar}} e^{-iH_0 t_1/\hbar} e^{iE_i t_0/\hbar} |i\rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \langle f|V|i\rangle e^{-iE_f t/\hbar} \underbrace{\int_{t_0}^t dt_1 e^{i(E_f - E_i)t_1/\hbar} e^{\eta t_1/\hbar}}_{\dots} e^{iE_i t_0/\hbar}. \tag{4.426}
 \end{aligned}$$

Das hier auftretende Integral ist

$$\underbrace{\dots}_{\dots} = \hbar \frac{e^{i(E_f - E_i)t_1/\hbar} e^{\eta t_1/\hbar} \Big|_{t_0}^t}{i(E_f - E_i) + \eta} = \hbar \frac{e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} e^{\eta t/\hbar} - e^{i(E_f - E_i)t_0/\hbar} e^{\eta t_0/\hbar}}{i(E_f - E_i) + \eta}. \tag{4.427}$$

Wir schicken nun t_0 nach $-\infty$, d. h. das System wurde vor beliebig langer Zeit präpariert. Es folgt

$$\langle f|\psi(t)\rangle = -\langle f|V|i\rangle e^{-iE_f t/\hbar} \frac{e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} e^{\eta t/\hbar}}{E_f - E_i - i\eta} e^{iE_i t_0/\hbar} = -\langle f|V|i\rangle \frac{e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar} e^{\eta t/\hbar}}{E_f - E_i - i\eta}. \tag{4.428}$$

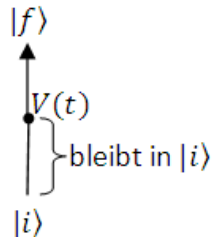
Die *Wahrscheinlichkeit*, das System zur Zeit t im Zustand $|f\rangle$ zu finden, wenn es zur Zeit $t_0 \rightarrow -\infty$ im Zustand $|i\rangle$ präpariert wurde, ist dann $|\langle f|\psi(t)\rangle|^2$. Die *Übergangsrates* Γ_{fi} von $|i\rangle$ nach $|f\rangle$ ist die Änderungsrate dieser Wahrscheinlichkeit mit der Zeit,

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{fi} &:= \frac{d}{dt} |\langle f|\psi(t)\rangle|^2 \\
 &= |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{d}{dt} \frac{e^{2\eta t/\hbar}}{(E_f - E_i)^2 + \eta^2} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} \\
 &= |\langle f|V|i\rangle|^2 \frac{1}{\hbar} \frac{2\eta e^{2\eta t/\hbar}}{(E_f - E_i)^2 + \eta^2} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+}. \tag{4.429}
 \end{aligned}$$

Der letzte Faktor ist eine Darstellung der δ -Funktion. Wir erhalten *Fermis Goldene Regel*

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |\langle f|V|i\rangle|^2. \tag{4.430}$$

Bemerkung: Oft wollen wir eigentlich die Rate für Übergänge nach $|f\rangle$ ausrechnen, mit der Bedingung, dass das System zur Zeit t (oder genauer $t - \delta t, \delta t \rightarrow 0^+$) im Zustand $|i\rangle$ ist. Was wir aber anscheinend ausgerechnet haben, ist die Rate unter der Bedingung, dass das System zur Zeit $-\infty$ im Zustand $|i\rangle$ war. Ist das nicht etwas anderes? Im Allgemeinen schon, aber in erster Ordnung in V kommen wir damit durch, weil vor der Zeit t keine anderen Übergänge stattfinden können – wir brauchen den *einen* Faktor von V schon zur Zeit t :



- $T(E_i)$ scheint merkwürdig asymmetrisch definiert zu sein, da E_i explizit auftritt, nicht aber E_f . Die beiden sind aber wegen der δ -Funktion gleich. Es ist ungünstig, aber üblich, die Abhängigkeit von T von E_i nicht explizit als $T(E_i)$ anzugeben.
- Im T -Matrix-Formalismus beschreibt Γ_{fi} *nicht* die Übergangsrate von $|i\rangle$ zur Zeit $t - \delta t$ nach $|f\rangle$ zur Zeit t , sondern die Änderungsrate der Wahrscheinlichkeit von $|f\rangle$ zur Zeit t , unter der Bedingung, dass das System zur Zeit $-\infty$ im Zustand $|i\rangle$ war. Bei der Interpretation ist also Vorsicht angebracht.

Kapitel 5

Feldquantisierung

In diesem letzten Kapitel sollen in knapper Form wesentliche Grundideen der Quantisierung von Feldern besprochen werden. Wir beginnen mit dem Postulat der kanonischen Quantisierung und wenden es auf verschiedene Feldtheorien an. Dann kommen wir zur Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes und schließlich zu seiner Kopplung an ein fermionisches (Elektronen-) Feld – das Ergebnis ist die Formulierung der Quantenelektrodynamik.

5.1 Von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik

In diesem Abschnitt wiederholen wir das Hamiltonsche Prinzip der klassischen Mechanik und die Herleitung der Lagrange- und Hamilton-Bewegungsgleichungen aus diesem Prinzip. Anschließend wiederholen wir die Postulate hinsichtlich des Ortes und des Impulses, die von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik führen. Der Sinn dieser Wiederholungen ist, dass wir später ganz analoge Schritte für andere Theorien, insbesondere für die Elektrodynamik, durchführen wollen.

In der klassischen Mechanik kann man die Bewegungsgleichungen für ein System (mit bestimmten Eigenschaften) mit N generalisierten Koordinaten q_1, \dots, q_N aus dem *Hamiltonschen Prinzip* erhalten. Dieses Prinzip fordert, dass die *Variation* der *Wirkung* S verschwindet:

$$\delta S = 0, \quad (5.1)$$

wobei

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t) \quad (5.2)$$

ist. L ist die *Lagrange-Funktion*, die von den Koordinaten $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_N)$, den Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{q}} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N)$ und i. A. explizit der Zeit t abhängt. Bei der Variation sind die Anfangs- und Endkonfigurationen $\mathbf{q}(t_1)$, $\mathbf{q}(t_2)$ festzuhalten.

Die Wirkung ist ein *Funktional* $S[\mathbf{q}]$ der Bahnkurven $\mathbf{q}(t)$, d. h. eine Abbildung aus einem Funktionenraum in eine Menge von Zahlen, hier \mathbb{R} . Wir können das Hamiltonsche Prinzip auch mit Hilfe von Funktionalableitungen schreiben, nämlich als

$$\frac{\delta S}{\delta q_i(t)} = 0 \quad \forall i, t, \quad (5.3)$$

wobei die Funktionalableitungen im Sinne von Distributionen definiert sind durch ihr Verhalten unter einem Integral,

$$\int dt \frac{\delta S}{\delta q(t)} f(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{S[q + \epsilon f] - S[q]}{\epsilon} \quad (5.4)$$

mit einer beliebigen Testfunktion $f(t)$, so dass $S[q + \epsilon f]$ existiert.

Wir stellen einige nützliche Beziehungen zusammen: Ein spezielles Funktional, also eine Abbildung aus einem Funktionenraum auf einen Zahlenraum, ist sicherlich die Auswertung einer Funktion an einem festen Argument. Wir betrachten also $S[q] = q(u)$. Dafür erhalten wir mit der Definition (5.4):

$$\int dt \frac{\partial q(u)}{\partial q(t)} f(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{q(u) + \epsilon f(u) - q(u)}{\epsilon} = f(u), \quad (5.5)$$

so dass man schreiben kann

$$\frac{\partial q(u)}{\partial q(t)} = \delta(u - t) \equiv \delta(t - u). \quad (5.6)$$

Das ist eine offensichtliche Verallgemeinerung der partiellen Ableitung $\partial q_i / \partial q_j = \delta_{ij}$. Für Funktionalableitungen von Ableitungen betrachten wir $S[q] = q^{(n)}(u)$ (die n -te Ableitung von q). Dann ist

$$\int dt \frac{\partial q^{(n)}(u)}{\partial q(t)} f(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{q^{(n)}(u) + \epsilon f^{(n)}(u) - q^{(n)}(u)}{\epsilon} = f^{(n)}(u). \quad (5.7)$$

Das kann man durch

$$\frac{\partial q^{(n)}(u)}{\partial q(t)} = \delta^{(n)}(u - t) \equiv (-1)^n \delta^{(n)}(t - u) \quad (5.8)$$

ausdrücken, denn n -fache partielle Integration ergibt

$$\int dt (-1)^n \delta^{(n)}(t - u) f(t) = + \int dt \delta(t - u) f^{(n)}(t) = f^{(n)}(u). \quad (5.9)$$

Mathematisch unsauber aber etwas schneller können wir dieselben Ergebnisse auch erhalten, indem wir als Testfunktion $f(t) = \delta(t - t_0)$ setzen. Dann ist

$$\left. \frac{\delta S}{\delta q(t)} \right|_{t=t_0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{S[q(t) + \epsilon \delta(t - t_0)] - S[q(t)]}{\epsilon}. \quad (5.10)$$

Für $S[q] = q(u)$ erhalten wir

$$\left. \frac{\delta q(u)}{\delta q(t)} \right|_{t=t_0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{q(u) + \epsilon \delta(u - t_0) - q(u)}{\epsilon} = \delta(u - t_0) \quad (5.11)$$

$$\Rightarrow \frac{\delta q(u)}{\delta q(t)} = \delta(u - t) \quad (5.12)$$

und für die n -te Ableitung

$$\left. \frac{\delta q^{(n)}(u)}{\delta q(t)} \right|_{t=t_0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{q^{(n)}(u) + \epsilon \delta^{(n)}(u - t_0) - q^{(n)}(u)}{\epsilon} = \delta^{(n)}(u - t_0) \quad (5.13)$$

$$\Rightarrow \frac{\delta q^{(n)}(u)}{\delta q(t)} = \delta^{(n)}(u - t) \equiv (-1)^n \delta^{(n)}(t - u). \quad (5.14)$$

Außerdem gilt für eine beliebige von q unabhängige Funktion g :

$$\left. \frac{\delta g(u)}{\delta q(t)} \right|_{t=t_0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{g(u) - g(u)}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} 0 = 0 \quad (5.15)$$

$$\Rightarrow \frac{\delta g(u)}{\delta q(t)} = 0. \quad (5.16)$$

Die Funktionalableitung ist eine natürliche Verallgemeinerung der partiellen Ableitung auf Funktionale.

Aus dem Hamiltonschen Prinzip folgen die Lagrange-Gleichungen 2. Art. Diese sind nämlich die Euler-Lagrange-Gleichungen des Hamiltonschen Prinzips. Zur Erinnerung soll hier die Herleitung angegeben werden:

$$0 = \frac{\delta S}{\delta q_i(t)} = \int_{t_1}^{t_2} dt' \frac{\delta L(\mathbf{q}(t'), \dot{\mathbf{q}}(t'), t')}{\delta q_i(t)}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{t_1}^{t_2} dt' \left(\sum_j \frac{\partial L}{\partial q_j} \frac{\delta q_j(t')}{\delta q_i(t)} + \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\delta \dot{q}_j(t')}{\delta q_i(t)} + \underbrace{\frac{\partial L}{\partial t'} \frac{\delta t'}{\delta q_i(t)}}_{=0} \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt' \left(\sum_j \frac{\partial L}{\partial q_j} \delta_{ij} \delta(t' - t) + \sum_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta_{ij} \delta'(t' - t) \right). \tag{5.17}
\end{aligned}$$

Partielle Integration liefert

$$0 = \int_{t_1}^{t_2} dt' \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta(t' - t) - \left(\frac{d}{dt'} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta(t' - t) \right] + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta(t' - t) \Big|_{t_1}^{t_2}. \tag{5.18}$$

Nun müssen aber $q_i(t_1)$ und $q_i(t_2)$ konstant gehalten werden, daher muss der letzte Term, der von der Variation von S mit $q_i(t_1)$ und $q_i(t_2)$ stammt, verschwinden. Formal sind also nur solche Testfunktionen $f(t)$ zugelassen, da mit dem Variationsproblem vereinbar, die für t_1 und t_2 verschwinden. Damit folgt die Lagrange-Gleichung

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad \text{für alle } i. \tag{5.19}$$

Für den Übergang zur Hamilton-Mechanik definieren wir den zu q_i *kanonisch konjugierten Impuls*

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{5.20}$$

und die *Hamilton-Funktion*

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) := \sum_i p_i \dot{q}_i - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t). \tag{5.21}$$

Der Übergang von der klassischen zur *Quantenmechanik* lässt sich natürlich nicht im Rahmen der klassischen Mechanik begründen. Die klassische Mechanik ist schließlich nur ein Grenzfall der Quantenmechanik. Es sind *Postulate* erforderlich, die außerhalb der klassischen Physik liegen. Diese Postulate müssen sich letztlich durch den Vergleich der auf ihnen beruhenden Voraussagen mit Experimenten bewähren. In dieser Hinsicht erfolgreiche Postulate lassen sich wie folgt formulieren:

1. Observable werden durch lineare, hermitesche *Operatoren* auf einem Hilbertraum beschrieben. (In diesem Kapitel notieren wir Operatoren mit einem Dach.)
2. Kanonisch konjugierte Observable \hat{q}_j, \hat{p}_j erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_j] = i\hbar, \tag{5.22}$$

während nicht konjugierte Observable, die klassisch *in Involution* stehen (vgl. Vorlesung Theoretische Mechanik), kommutieren. Also gilt insbesondere

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \tag{5.23}$$

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, \tag{5.24}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \tag{5.25}$$

3. Die Ersetzung der Variablen q_i, p_i in der Hamilton-Funktion durch die Operatoren \hat{q}_i, \hat{p}_i ergibt den Hamilton-Operator \hat{H} . Eventuell sind weitere Postulate erforderlich, um die Reihenfolge nicht kommutierender Operatoren festzulegen. Dabei wird insbesondere postuliert, dass \hat{H} hermitesch ist, das genügt aber nicht immer für eine eindeutige Festlegung des Hamilton-Operators. Der Hamilton-Operator \hat{H} bestimmt die Zeitentwicklung über die Schrödinger- bzw. Heisenberg-Gleichung.

5.2 Lagrange- und Hamilton-Formalismus für Felder

Hier übertragen wir Ideen aus dem vorigen Abschnitt – Hamiltonsches Prinzip, Lagrange-Gleichungen, kanonisch konjugierte Impulse, kanonische Gleichungen – auf Feldtheorien. Wir werden sehen, dass wir viele alte Bekannte auf diese Weise formulieren können, nämlich die Schrödinger-, Klein-Gordon- und Dirac-Quantentheorien sowie die Elektrodynamik.

5.2.1 Lagrange-Formalismus

Es ist bemerkenswert, dass sich die Grundgleichungen praktisch aller Zweige der Physik als Euler-Lagrange-Gleichungen aus Hamiltonschen Prinzipien für geeignete Wirkungen S herleiten lassen. Das gilt insbesondere auch für die Bewegungsgleichungen von Feldern, z. B. die Maxwell-Gleichungen. Ein *Feld* ist eine Größe, die an jedem Raumpunkt \mathbf{r} einen oder mehrere Freiheitsgrade hat. D. h. die Ortsvariable \mathbf{r} tritt an die Stelle des Index $i = 1, \dots, N$ der generalisierten Koordinaten oder zu diesem hinzu. Die Funktionalableitung nach einem Feld $\varphi(\mathbf{r}, t)$ ist analog zur Funktionalableitung nach einer zeitabhängigen Funktion $q(t)$ definiert, wobei nur zu beachten ist, dass φ von zusätzlichen Variablen abhängt. Insbesondere gilt

$$\frac{\delta\varphi(\mathbf{R}, T)}{\delta\varphi(\mathbf{r}, t)} = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \delta(T - t) \quad (5.26)$$

und allgemeiner für einen beliebigen Differentialoperator D , z. B. $\nabla_{\mathbf{R}}$, $\nabla_{\mathbf{R}}^2$, $\partial/\partial T$, \dots ,

$$\frac{\delta D\varphi(\mathbf{R}, T)}{\delta\varphi(\mathbf{r}, t)} = D \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \delta(T - t) \quad (5.27)$$

Für ein Feld φ schreiben wir die Wirkung als

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(t) = \int dt d^3r \mathcal{L}(\mathbf{r}, t) \quad (5.28)$$

mit der *Lagrange-Dichte* \mathcal{L} , die (typischerweise lokal) vom Feld, dessen ersten Ableitungen und evtl. explizit von Ort und Zeit abhängt. Also ist

$$S = \int dt d^3r \mathcal{L}(\varphi, \dot{\varphi}, \nabla\varphi, t, \mathbf{r}), \quad (5.29)$$

was wir auch in Viererschreibweise als

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(\varphi, \partial^0\varphi, \partial^1\varphi, \partial^2\varphi, \partial^3\varphi, x^0, x^1, x^2, x^3) \quad (5.30)$$

schreiben können. Die Wirkung *kann* also ein Lorentz-Skalar sein. Für eine kovariante Theorie ist dies notwendig, sonst natürlich nicht. Wir betrachten einige wichtige Beispiele:

1. *Skalare Wellengleichung*: Mit

$$\mathcal{L} = \frac{\gamma}{2} (\partial_\mu\varphi)(\partial^\mu\varphi) \quad (5.31)$$

für ein *reelles* Feld $\varphi(\mathbf{r}, t)$ lautet das Hamiltonsche Prinzip, mit $\partial'_\mu := \partial/\partial x'^\mu$,

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta S}{\delta\varphi(x)} = \int d^4x' \frac{\gamma}{2} \left[\frac{\delta\partial'_\mu\varphi(x')}{\delta\varphi(x)} \partial'^\mu\varphi(x') + \partial'_\mu\varphi(x') \frac{\delta\partial'^\mu\varphi(x')}{\delta\varphi(x)} \right] \\ &= \frac{\gamma}{2} \int d^4x' [(\partial'_\mu\delta(x' - x))(\partial'^\mu\varphi(x')) + (\partial'_\mu\varphi(x'))(\partial'^\mu\delta(x' - x))] \\ &= -\frac{\gamma}{2} \int d^4x' [\delta(x' - x)\partial'_\mu\partial'^\mu\varphi(x') + (\partial'^\mu\partial'_\mu\varphi(x'))\delta(x' - x)] \\ &= -\gamma \partial_\mu\partial^\mu\varphi(x). \end{aligned} \quad (5.32)$$

Damit erhalten wir als Euler-Lagrange-Gleichung die Wellengleichung

$$\partial_\mu \partial^\mu \varphi \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \nabla^2 \varphi = 0. \quad (5.33)$$

Für ein *komplexes* Feld φ und

$$\mathcal{L} = \gamma (\partial_\mu \varphi^*) (\partial^\mu \varphi) \quad (5.34)$$

lautet das Hamiltonsche Prinzip

$$0 = \frac{\delta S}{\delta \varphi^*(x)} = \int d^4 x' \gamma \frac{\delta \partial'_\mu \varphi^*(x')}{\delta \varphi^*(x)} \partial'^\mu \varphi(x'). \quad (5.35)$$

φ und φ^* sind linear unabhängig, da $\text{Re } \varphi$ und $\text{Im } \varphi$ es sind, vgl. Abschnitt 2.5.2. Es folgt

$$0 = \gamma \int d^4 x' (\partial'_\mu \delta(x' - x)) (\partial'^\mu \varphi(x')) = -\gamma \int d^4 x' \delta(x' - x) \partial'_\mu \partial'^\mu \varphi(x') = -\gamma \partial_\mu \partial^\mu \varphi(x). \quad (5.36)$$

Daher erhalten wir wieder

$$\partial_\mu \partial^\mu \varphi \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \nabla^2 \varphi = 0. \quad (5.37)$$

Die resultierende Euler-Lagrange-Gleichung ist offensichtlich unabhängig von einem globalen Faktor, hier γ . Dieser wird jedoch wichtig, wenn wir zur Quantentheorie übergehen.

2. *Elektromagnetisches Feld*: Hier wird das Feld durch den Vierervektor (A^μ) beschrieben. Wir schreiben die Lagrange-Dichte in Gaußschen Einheiten. Beachte, dass im Kontext der Quantenfeldtheorie oft sogenannte Heaviside-Lorentz-Einheiten verwendet werden. Diese vermeiden unhandliche Faktoren von 4π , die sich bei der Verwendung von Gaußschen Einheiten durch die Rechnung ziehen. Wir wollen wir aber nicht neben SI- und Gauß-Einheiten noch ein drittes Einheitensystem einführen. Die Lagrange-Dichte lautet

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \quad (5.38)$$

mit $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$, wobei \mathcal{L} und S als Funktionale von (A^μ) aufzufassen sind. [In Heaviside-Lorentz-Einheiten ist $\mathcal{L} = -(1/4) F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - (4\pi/c) j^\mu A_\mu$.] Man kann zeigen, dass aus $\delta S = 0$ als Euler-Lagrange-Gleichungen die Maxwell-Gleichungen folgen, vgl. z. B. die Vorlesungen Elektrodynamik und Vielteilchentheorie.

3. *Klein-Gordon-Theorie*: Mit

$$\mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} (\partial_\mu \psi^*) (\partial^\mu \psi) - \frac{mc^2}{2} \psi^* \psi \quad (5.39)$$

folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta S}{\delta \psi^*(x)} = \int d^4 x' \left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta \partial'_\mu \psi^*(x')}{\delta \psi^*(x)} \partial'^\mu \psi(x') - \frac{mc^2}{2} \frac{\delta \psi^*(x')}{\delta \psi^*(x)} \psi(x') \right] \\ &= \int d^4 x' \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\partial'_\mu \delta(x' - x)) (\partial'^\mu \psi(x')) - \frac{mc^2}{2} \delta(x' - x) \psi(x') \right] \\ &= \int d^4 x' \delta(x' - x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial'_\mu \partial'^\mu \psi(x') - \frac{mc^2}{2} \psi(x') \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\partial_\mu \partial^\mu \psi(x) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi(x) \right], \end{aligned} \quad (5.40)$$

also die Klein-Gordon-Gleichung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0. \quad (5.41)$$

Dasselbe Ergebnis erhalten wir aus $\delta S/\delta\psi = 0$ nach Komplexkonjugation.

Beachte, dass es bei dieser Herleitung keine Rolle gespielt hat, dass ψ eine *quantenmechanische* Wellenfunktion, also ein Quantenzustand in der Ortsbasis, ist. Das Hamiltonsche Prinzip stellt sich als mathematische Methode für die kompakte Formulierung von allgemeinen Feldgleichungen dar, für die es egal ist, was das dadurch beschriebene Feld physikalisch repräsentiert.

4. *Dirac-Theorie*: Mit

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\hbar c \gamma^\mu \partial_\mu - mc^2) \psi, \quad (5.42)$$

wobei $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ die Dirac-Adjungierte ist, folgt für den vierkomponentigen Gradienten $\delta S/\delta\bar{\psi}(x)$ im Spinorraum

$$0 = \frac{\delta S}{\delta\bar{\psi}(x)} = \int d^4x' \delta(x' - x) (i\hbar c \gamma^\mu \partial'_\mu - mc^2) \psi(x') = c (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi(x). \quad (5.43)$$

Dies ist die Dirac-Gleichung multipliziert mit c . Dasselbe Ergebnis erhält man aus $\delta S/\delta\psi = 0$ durch hermitesche Konjugation.

5. *Schrödinger-Theorie*: Mit

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi^*) \cdot (\nabla\psi) - V(\mathbf{r}) \psi^* \psi \quad (5.44)$$

folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta S}{\delta\psi^*(\mathbf{r}, t)} = \int dt' d^3r' \left[i\hbar \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(t' - t) \frac{\partial\psi}{\partial t'} - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla' \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(t' - t)) \cdot (\nabla' \psi(\mathbf{r}', t')) \right. \\ &\quad \left. - V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(t' - t) \psi(\mathbf{r}', t') \right] \\ &= i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - V(\mathbf{r}) \psi, \end{aligned} \quad (5.45)$$

also die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi. \quad (5.46)$$

Dasselbe Ergebnis erhält man aus $\delta S/\delta\psi = 0$.

5.2.2 Hamilton-Formalismus

In der Lagrange-Formulierung von Feldtheorien im letzten Abschnitt spielt das Feld die Rolle der generalisierten Koordinaten. Wir können auch das Konzept eines kanonisch konjugierten Impulses auf Felder übertragen. Das zu einem reellen oder komplexen Feld $\varphi(\mathbf{r}, t)$ *kanonisch konjugierte Feld* lautet

$$\pi(\mathbf{r}, t) := \left. \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} \right|_{\mathbf{r}, t}. \quad (5.47)$$

Eine äquivalente Form ist

$$\pi(\mathbf{r}, t) = \frac{\delta S}{\delta\dot{\varphi}} = \int dt' d^3r' \left. \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} \right|_{\mathbf{r}', t'} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(t' - t) = \left. \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}} \right|_{\mathbf{r}, t}. \quad (5.48)$$

Da die Definition von $\pi(\mathbf{r}, t)$ die zeitliche Ableitung des Feldes φ enthält, aber nicht die räumlichen Ableitungen, zeichnet sie offensichtlich die Zeit vor den räumlichen Koordinaten aus. Wir erhalten daher i. A. keine explizit kovariante Formulierung, selbst wenn die betrachtete Theorie eigentlich Lorentz-invariant ist. Analog hatten wir in der Mechanik gefunden, dass die Hamilton-Funktion, die $p_i = \partial L/\partial\dot{q}_i$ enthält, nicht Lorentz-invariant ist.

In den obigen Beispielen erhalten wir jeweils Folgendes für das konjugierte Feld:

1. *Skalare Wellengleichung* (für ein reelles Feld):

$$\pi = \frac{\partial}{\partial\dot{\varphi}} \frac{\gamma}{2} (\partial_\mu\varphi)(\partial^\mu\varphi) = \frac{\partial}{\partial\dot{\varphi}} \frac{\gamma}{2} \left[\frac{1}{c^2} \dot{\varphi}\dot{\varphi} - (\nabla\varphi) \cdot (\nabla\varphi) \right] = \frac{\gamma}{c^2} \dot{\varphi}. \quad (5.49)$$

2. *Elektromagnetisches Feld*: Es ist nützlich, die Lagrange-Dichte umzuschreiben:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &= -\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \\
&= -\frac{1}{16\pi} \sum_{\mu=1}^3 F^{\mu 0} F_{\mu 0} - \frac{1}{16\pi} \sum_{\nu=1}^3 F^{0\nu} F_{0\nu} - \frac{1}{16\pi} \sum_{\mu,\nu=1}^3 F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^0 A_0 - \frac{1}{c} \sum_{\mu=1}^3 j^\mu A_\mu \\
&= \frac{1}{16\pi} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{16\pi} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} - \frac{1}{8\pi} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} - \rho\phi + \frac{1}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} \\
&= \frac{1}{8\pi} (E^2 - B^2) - \rho\phi + \frac{1}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A},
\end{aligned} \tag{5.50}$$

wobei wir daran denken müssen, dass $(A^\mu) = (\phi, \mathbf{A})$ das relevante Feld ist. Also sind $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \dot{\mathbf{A}}/c$ und $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ durch ϕ und \mathbf{A} auszudrücken. Das zu A^μ konjugierte Feld ist

$$\Pi_\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}^\mu}. \tag{5.51}$$

Insbesondere ist das zu $A^0 = \phi$ konjugierte Feld

$$\Pi_0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = 0, \tag{5.52}$$

da $\dot{\phi}$ gar nicht in \mathcal{L} vorkommt. Das bedeutet, dass ϕ keine dynamische Variable ist. Dieses Ergebnis versteht man am besten mit Hilfe der Coulomb-Eichung: Damit gilt nämlich

$$\nabla^2 \phi = -\frac{4\pi}{c} \rho, \tag{5.53}$$

d. h. ϕ ist durch die Ladungsdichte und Randbedingungen eindeutig festgelegt und hat keine eigene Dynamik. Wir finden, dass das vierkomponentige Feld (A^μ) höchstens drei Freiheitsgrade beschreibt.

Andererseits ist das zu \mathbf{A} konjugierte Feld

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Pi} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{A}}} = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{A}}} \frac{1}{8\pi} E^2 \\
&= \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{A}}} \frac{1}{8\pi} \left(-\nabla\phi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \right)^2 \\
&= \frac{1}{4\pi} \left(\nabla\phi + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \right) \frac{1}{c} = -\frac{\mathbf{E}}{4\pi c},
\end{aligned} \tag{5.54}$$

also proportional zum elektrischen Feld. Wir kommen bei der Feldquantisierung darauf zurück.

3. *Klein-Gordon-Theorie*: Hier haben wir es mit einem komplexen Feld ψ zu tun. Das konjugierte Feld

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \tag{5.55}$$

ist dann i. A. auch komplex. Mit der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} (\partial_\mu \psi^*) (\partial^\mu \psi) - \frac{mc^2}{2} \psi^* \psi \tag{5.56}$$

erhalten wir

$$\pi = \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}} \frac{\hbar^2}{2mc^2} \dot{\psi}^* \dot{\psi} = \frac{\hbar^2}{2mc^2} \dot{\psi}^*. \tag{5.57}$$

Das kanonisch konjugierte Feld ist also i. W. die Zeitableitung des komplex konjugierten Feldes. In allen drei bisherigen Beispielen hängt das konjugierte Feld eng mit der Zeitableitung des ursprünglichen Feldes zusammen. Das liegt daran, dass in allen drei Fällen die Lagrange-Dichte von zweiter Ordnung in (ersten) Zeitableitungen ist. Ähnlich ist in der klassischen Mechanik in kartesischen Koordinaten die Lagrange-Funktion quadratisch in der Geschwindigkeit und der Impuls proportional zur Geschwindigkeit.

4. *Dirac-Theorie*: Mit

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\hbar c \gamma^\mu \partial_\mu - mc^2) \psi \quad (5.58)$$

folgt

$$\pi = \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}} \bar{\psi} i\hbar c \gamma^0 \frac{1}{c} \dot{\psi} = i\hbar \bar{\psi} \gamma^0 = i\hbar \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 = i\hbar \psi^\dagger, \quad (5.59)$$

da $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ definiert wurde. $\dot{\psi}$ ist ein vierkomponentiger Dirac-Spinor, daher ist π ein vierkomponentiger Gradient des Skalars \mathcal{L} nach $\dot{\psi}$. Wir finden, dass das zum Spaltenvektor ψ konjugierte Feld der Zeilenvektor $\pi = i\hbar \psi^\dagger$ ist.

5. *Schrödinger-Theorie*: Mit

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) - V(\mathbf{r}) \psi^* \psi \quad (5.60)$$

folgt

$$\pi = \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}} i\hbar \psi^* \dot{\psi} = i\hbar \psi^*. \quad (5.61)$$

Für die Schrödinger- wie auch für die Dirac-Theorie sehen wir, dass das kanonisch konjugierte Feld mit dem komplex konjugierten zusammenhängt, nicht mit der Zeitableitung. Dies liegt daran, dass die Zeitableitung in der Lagrange-Dichte in der Form $\varphi^* \dot{\varphi}$ erscheint. Für diese beiden Theorien sind außerdem Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion zueinander kanonisch konjugiert. Für den Schrödinger-Fall erhalten wir nämlich aus $\psi = \psi_1 + i\psi_2$, $\pi = \pi_1 + i\pi_2$ mit $\psi_1, \psi_2, \pi_1, \pi_2 \in \mathbb{R}$, dass gilt

$$\pi_1 + i\pi_2 = i\hbar (\psi_1 - i\psi_2) = \hbar \psi_2 + i\hbar \psi_1, \quad (5.62)$$

also

$$\pi_1 = \hbar \psi_2, \quad (5.63)$$

$$\pi_2 = \hbar \psi_1. \quad (5.64)$$

ψ_1 und ψ_2 sind damit keine unabhängigen Freiheitsgrade des Feldes.

Es ist jetzt möglich, mittels der Legendre-Transformation

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\varphi} - \mathcal{L} \quad (5.65)$$

eine *Hamilton-Dichte* \mathcal{H} einzuführen und kanonische (Hamiltonsche) Bewegungsgleichungen herzuleiten. Diese sind zu den Lagrangeschen Bewegungsgleichungen äquivalent. Wir kommen auf die Hamiltonsche Formulierung im Zusammenhang mit der Feldquantisierung zurück; dann werden wir \mathcal{H} benötigen, um Hamilton-Operatoren zu konstruieren.

5.3 Kanonische Quantisierung und Quantenfeldtheorien

In diesem letzten Abschnitt übertragen wir die Idee der Orts-Impuls-Quantisierung, die von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik führte, auf Felder. Die Anwendung auf die Einteilchen-Quantenmechanik ergibt – vielleicht erstaunlicherweise – die Mehrteilchen-Quantentheorie. Die wichtigste Anwendung erfolgt dann aber auf die Elektrodynamik, d. h. wir konstruieren eine Quantentheorie des Elektromagnetismus. Hier erhalten wir bereits mehrere nichttriviale Ergebnisse, insbesondere können wir die Eigenschaften des Photons verstehen. Schließlich koppeln wir das elektromagnetische Quantenfeld an das elektronische Quantenfeld, das Ergebnis ist die Quantenelektrodynamik (QED). Wir gehen in dieser Vorlesung aber nicht über die Formulierung der QED hinaus.

Die zentrale Idee bei der Konstruktion von Quantentheorien für Felder ist, die in der Quantenmechanik erfolgreichen kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (5.66)$$

der konjugierten Größen \hat{q}_i, \hat{p}_j auf konjugierte Felder zu übertragen. Man *postuliert* also:

1. Felder werden durch Feldoperatoren $\hat{\varphi}(\mathbf{r}, t)$ auf einem Fock-Raum (siehe Kap. 2) beschrieben. Für komplexe Felder geht die komplexe Konjugation in die hermitesche Konjugation für die Feldoperatoren über, d. h. ψ^* wird zu $\hat{\psi}^\dagger$.
2. Kanonisch konjugierte Felder $\hat{\varphi}_i(\mathbf{r}, t)$, $\hat{\pi}_j(\mathbf{r}, t)$ erfüllen die Vertauschungsrelationen (wir betrachten hier *Bosonen*)

$$[\hat{\varphi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\pi}_j(\mathbf{r}', t)] = i\hbar \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5.67)$$

$$[\hat{\varphi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\varphi}_j(\mathbf{r}', t)] = 0, \quad (5.68)$$

$$[\hat{\pi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\pi}_j(\mathbf{r}', t)] = 0 \quad (5.69)$$

für reelle und komplexe Felder. Beachte, dass die beiden Felder bei *derselben Zeit* t auszuwerten sind, die Ortsargumente aber verschieden sein können. Das ist analog zum Fall der Mechanik, da \mathbf{r} , \mathbf{r}' analog zu i , j in Gl. (5.66) die Freiheitsgrade des Feldes abzählen. Die Indizes i , j in Glg. (5.67)–(5.69) beziehen sich auf die Komponenten von Vektorfeldern wie (A^μ) .

5.3.1 Schrödingersche Wellenfunktion

Wir wenden diese Postulate zunächst auf die Schrödinger-Theorie an, d. h. wir versuchen, die Schrödingersche Wellenfunktion kanonisch zu quantisieren. Das scheint zunächst eine absurde Idee zu sein, da die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ ja bereits einen quantenmechanischen Zustand beschreibt – sie ist ein Zustandsvektor in der Ortsdarstellung. Jetzt tun wir so, als ob $\psi(\mathbf{r}, t)$ ein klassisches Feld analog zum elektromagnetischen sei. Dennoch wollen wir sehen, was bei dieser Übung herauskommt.

Wir hatten $\pi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \psi^*(\mathbf{r}, t)$ gefunden. Demnach fordern wir

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\pi}(\mathbf{r}', t)] = i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.70)$$

$$\Leftrightarrow i\hbar [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] = i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.71)$$

$$\Leftrightarrow [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5.72)$$

Genau dieselbe Relation hatten wir in Abschnitt 2.3 aus der Konstruktion des Fock-Raums erhalten, siehe Gl. (2.188). Diese Konstruktion als direkte Summe von N -Teilchen-Hilberträumen, die nur total symmetrische Zustände enthalten, hat ebenfalls den Charakter eines Postulats, wirkt aber physikalisch naheliegender als die *ad-hoc* Annahme der kanonischen Quantisierung. Es ist interessant, dass beide Wege zu demselben Ziel führen. Für Fermionen wird im Postulat der kanonischen Quantisierung der Kommutator durch den Antikommutator ersetzt:

$$\{\hat{\varphi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\pi}_j(\mathbf{r}', t)\} = i\hbar \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.73)$$

usw. Dies führt im Schrödinger-Fall offensichtlich auf

$$\{\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t)\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5.74)$$

was mit dem Resultat aus Abschnitt 2.3 übereinstimmt.

Ohne kanonische Quantisierung der Wellenfunktion (also „klassisch“) erhalten wir die Hamilton-Dichte

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \pi\dot{\psi} - \mathcal{L} = i\hbar \psi^* \dot{\psi} - i\hbar \psi^* \dot{\psi} + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi^*) \cdot (\nabla\psi) + V(\mathbf{r}) \psi^* \psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi^*) \cdot (\nabla\psi) + V(\mathbf{r}) \psi^* \psi. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Einsetzen der Feldoperatoren und Integration über den Raum ergibt den schon bekannten Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\hat{\psi}^\dagger) \cdot (\nabla\hat{\psi}) + V(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \right]. \quad (5.76)$$

Dieser Weg macht noch deutlicher, wieso die Methode „Zweite Quantisierung“ genannt wird: Wir kommen zur Vielteilchentheorie, indem wir die Schrödinger-Gleichung in erster Quantisierung als „klassische“ Wellengleichung auffassen und dann die Wellenfunktion kanonisch quantisieren.

Diese Erkenntnis ermutigt uns, die kanonische Quantisierung auf weitere Feldtheorien anzuwenden. Für die Klein-Gordon- und Dirac-Theorien funktioniert dies analog. Die resultierenden Theorien werden in der Vorlesung Quantenfeldtheorie besprochen. Wir untersuchen hier zum Abschluss die kanonische Quantisierung der Elektrodynamik.

5.3.2 Elektromagnetisches Feld

Wir hatten bereits gesehen, dass das skalare Potential $A^0 = \phi$ kein dynamisches Feld, sondern durch äußere Ladungen und Randbedingungen determiniert ist. Das zu ϕ konjugierte Feld verschwindet identisch. Daher kann ϕ nicht kanonisch quantisiert werden – der Kommutator ist trivialerweise Null – und bleibt damit klassisch. \mathbf{A} ist dagegen dynamisch und das dazu konjugierte Feld ist

$$-\frac{\mathbf{E}}{4\pi c} = \frac{1}{4\pi c} \nabla\phi + \frac{1}{4\pi c^2} \dot{\mathbf{A}}. \quad (5.77)$$

Wenn wir naiv kanonisch quantisieren, erhalten wir

$$\left[\hat{A}_m(\mathbf{r}, t), -\frac{1}{4\pi c} \hat{E}_n(\mathbf{r}', t) \right] \stackrel{?}{=} i\hbar \delta_{mn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5.78)$$

also

$$[\hat{E}_m(\mathbf{r}, t), \hat{A}_n(\mathbf{r}', t)] \stackrel{?}{=} 4\pi i \hbar c \delta_{mn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5.79)$$

Dieser Ansatz führt aber auf zwei Wegen zu Widersprüchen:

1. Wir dürfen sicherlich die Coulomb-Eichung

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} = 0 \quad (5.80)$$

wählen. Dann folgt aus Gl. (5.79) aber

$$\begin{aligned} 0 &= [\hat{E}_m(\mathbf{r}, t), 0] = \left[\hat{E}_m(\mathbf{r}, t), \sum_n \frac{\partial}{\partial x'_n} \hat{A}_n(\mathbf{r}', t) \right] \\ &= \sum_n \frac{\partial}{\partial x'_n} [\hat{E}_m(\mathbf{r}, t), \hat{A}_n(\mathbf{r}', t)] \\ &= 4\pi i \hbar c \sum_n \frac{\partial}{\partial x'_n} \delta_{mn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= 4\pi i \hbar c \frac{\partial}{\partial x'_m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -4\pi i \hbar c \frac{\partial}{\partial x_m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (5.81)$$

und wir finden einen Widerspruch.

2. Die Quantisierung soll die Maxwell-Gleichungen respektieren. Wir erwarten also

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{E}} = 4\pi\rho \quad (5.82)$$

und insbesondere in Abwesenheit von Ladungen

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{E}} = 0. \quad (5.83)$$

Es folgt

$$0 = [0, \hat{A}_n(\mathbf{r}', t)] = \left[\sum_m \frac{\partial}{\partial x_m} \hat{E}_m(\mathbf{r}, t), \hat{A}_n(\mathbf{r}', t) \right]$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_m \frac{\partial}{\partial x_m} [\hat{E}_m(\mathbf{r}, t), \hat{A}_n(\mathbf{r}', t)] \\
&= 4\pi i \hbar c \sum_m \frac{\partial}{\partial x_m} \delta_{mn} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 4\pi i \hbar c \frac{\partial}{\partial x_n} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{5.84}
\end{aligned}$$

also ebenfalls einen Widerspruch.

In Worten: Das Vektorpotential kann immer transversal (quellenfrei) geeicht werden und das elektrische Feld ist in Abwesenheit von Ladungen notwendig transversal. Daher muss der Kommutator von $\hat{\mathbf{E}}$ und $\hat{\mathbf{A}}$ [die linke Seite von Gl. (5.79)] transversal sein, die rechte Seite ist es aber nicht.

Da die naive kanonische Quantisierung nicht zum Erfolg führt, müssen wir das Quantisierungspostulat anpassen. Wir beschränken uns auf den ladungsfreien Fall ($\rho \equiv 0$) und verwenden die Coulomb-Eichung. Die wesentliche Idee ist, die rechte Seite von Gl. (5.79) durch ihren in \mathbf{r} und \mathbf{r}' transversalen Anteil zu ersetzen. Dies lässt sich bequemer im Impulsraum ausdrücken. Zunächst transformieren wir Gl. (5.79) in den Impulsraum, wobei wir ein endliches, aber großes Volumen \mathcal{V} annehmen und die Faktoren in der Fourier-Transformation symmetrisch zu $1/\sqrt{\mathcal{V}}$ wählen:

$$\begin{aligned}
[\hat{E}_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, \hat{A}_n(\mathbf{k}', t)] &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r d^3r' e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} [\hat{E}_m(\mathbf{r}, t), \hat{A}_n(\mathbf{r}', t)] \\
&\stackrel{?}{=} \frac{4\pi i \hbar c}{\mathcal{V}} \delta_{mn} \int d^3r d^3r' e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\
&= \frac{4\pi i \hbar c}{\mathcal{V}} \delta_{mn} \int d^3r e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \\
&= 4\pi i \hbar c \delta_{mn} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \tag{5.85}
\end{aligned}$$

Wir haben hier angenommen, dass $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t)$ hermitesch ist, da dieses Feld aus dem *reellen* elektrischen Feld hervorgeht. Aus der Transversalität von \mathbf{A} folgt

$$0 = [\hat{E}_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, \mathbf{k}' \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}', t)] \stackrel{?}{=} 4\pi i \hbar c k_m \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tag{5.86}$$

und aus der Transversalität von \mathbf{E} ,

$$0 = [\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)^\dagger, \hat{A}_n(\mathbf{k}', t)] \stackrel{?}{=} 4\pi i \hbar c k_n \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \tag{5.87}$$

also zwei Widersprüche. Wir postulieren jetzt, dass der Kommutator proportional zum in \mathbf{k} und \mathbf{k}' transversalen Anteil von $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ ist:

$$[\hat{E}_m(\mathbf{k}, t)^\dagger, \hat{A}_n(\mathbf{k}', t)] = 4\pi i \hbar c \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \tag{5.88}$$

Jetzt ist die rechte Seite transversal in \mathbf{k} und \mathbf{k}' , denn

$$4\pi i \hbar c \sum_m k_m \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 4\pi i \hbar c \left(k_n - \frac{|\mathbf{k}|^2 k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 0 \tag{5.89}$$

und analog

$$4\pi i \hbar c \sum_n k'_n \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 4\pi i \hbar c \left(k_m - \frac{k_m |\mathbf{k}|^2}{|\mathbf{k}|^2} \right) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 0. \tag{5.90}$$

Die neue Quantisierungsbedingung (5.88) kann auch in den Ortsraum zurücktransformiert werden:

$$[\hat{E}_m(\mathbf{r}, t), \hat{A}_n(\mathbf{r}', t)] = 4\pi i \hbar c \delta_{mn}^T(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{5.91}$$

mit

$$\delta_{mn}^T(\mathbf{r}) := \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left(\delta_{mn} - \frac{k_m k_n}{|\mathbf{k}|^2} \right). \tag{5.92}$$

Es gibt nun *zwei* orthogonale lineare Polarisierungen von \mathbf{A} , da \mathbf{A} transversal ist. Die entsprechenden linearen Polarisationsrichtungen seien $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1}, \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}$; die klassischen Lösungen für \mathbf{A} seien also proportional zu

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)}, \quad s = 1, 2. \quad (5.93)$$

Wir vereinbaren, dass $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1}, \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}$ und \mathbf{k} ein Rechtssystem bilden, also

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2} = \hat{\mathbf{k}} \equiv \frac{\mathbf{k}}{k} \quad (5.94)$$

(beachte, dass der Zirkumflex hier Einheitsvektoren und nicht Operatoren kennzeichnet). Wir können dann nicht $\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},1} = -\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1}$ und $\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},2} = -\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}$ als Polarisationsrichtungen für $-\mathbf{k}$ wählen, da $-\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1}, -\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}$ und $-\mathbf{k}$ ein Linkssystem bilden. Stattdessen vereinbaren wir

$$\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},1} = \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1}, \quad (5.95)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},2} = -\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}. \quad (5.96)$$

Dann ist

$$\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},1} \times \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},2} = \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \times (-\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}) = -\hat{\mathbf{k}} \quad (5.97)$$

und die drei Vektoren bilden ein Rechtssystem.

Für das Folgende ist die Zerlegung des Feldes in entgegengesetzt *zirkular* polarisierte Komponenten günstig oder zumindest üblich. Diese sind durch komplexe Einheitsvektoren

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm} := \frac{\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \pm i \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}}{\sqrt{2}} \quad (5.98)$$

gekennzeichnet. Beachte

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm}^* \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm} = \frac{\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} + \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}}{2} = 1, \quad (5.99)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm}^* \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\mp} = \frac{\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} - \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}}{2} = 0. \quad (5.100)$$

Auch nützlich sind die Identitäten

$$\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},\pm} = \frac{\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},1} \pm i \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},2}}{\sqrt{2}} = \frac{\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \mp i \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}}{\sqrt{2}} = \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\mp} \quad (5.101)$$

und

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm}^* = \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\mp} = \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},\pm}. \quad (5.102)$$

Wir schreiben das *klassische* Feld \mathbf{A} nun als Superposition von ebenen Wellen (d. h. wir schreiben die allgemeine Lösung der freien Maxwell-Gleichungen als Superposition eines vollständigen Satzes linear unabhängiger spezieller Lösungen),

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \sum_{s=\pm} \left[\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} a_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} + \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* a_{\mathbf{k}s}^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \right] \quad (5.103)$$

mit $\omega_{\mathbf{k}} = ck$. Die Koeffizienten $a_{\mathbf{k}s}$ und $a_{\mathbf{k}s}^*$ müssen als zueinander komplex konjugiert gewählt werden, um zu gewährleisten, dass $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ reell ist. Dass ein reeller Faktor $\sqrt{4\pi\hbar c^2/2\omega_{\mathbf{k}}}$ explizit hingeschrieben und nicht in $a_{\mathbf{k}s}, a_{\mathbf{k}s}^*$ absorbiert wurde, ist an dieser Stelle reine Konvention. Diese Schreibweise führt aber nach der Quantisierung zu einfacheren Ergebnissen.

Beim Übergang zum Quantenfeld $\hat{\mathbf{A}}$ müssen wir die Koeffizienten $a_{\mathbf{k}s}, a_{\mathbf{k}s}^*$ durch *Operatoren* $\hat{a}_{\mathbf{k}s}, \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger$ ersetzen:

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{4\pi\hbar c^2}{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}}}} \sum_{s=\pm} \left[\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} + \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \right]. \quad (5.104)$$

Es folgt (beachte $\rho \equiv 0$ und die Coulomb-Eichung)

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = i \sqrt{\frac{4\pi\hbar}{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \sum_{s=\pm} \left[\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} - \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} \right]. \quad (5.105)$$

Wir wollen nun die Operatoren $\hat{a}_{\mathbf{k}s}$, $\hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger$ durch die Feldoperatoren $\hat{\mathbf{A}}$ und $\hat{\mathbf{E}}$ ausdrücken. Dazu transformieren wir die vorigen Gleichungen in den Impulsraum,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \int d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{\sqrt{4\pi\hbar c^2}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}'}}} \sum_s \int d^3r \left[\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s} \hat{a}_{\mathbf{k}'s} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}-i\omega_{\mathbf{k}'}t} + \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s}^* \hat{a}_{\mathbf{k}'s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}+i\omega_{\mathbf{k}'}t} \right] \\ &= \frac{\sqrt{4\pi\hbar c^2}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\mathbf{k}'}}} \sum_s \left(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s} \hat{a}_{\mathbf{k}'s} \mathcal{V} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\omega_{\mathbf{k}'}t} + \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s}^* \hat{a}_{\mathbf{k}'s}^\dagger \mathcal{V} \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} e^{i\omega_{\mathbf{k}'}t} \right) \\ &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}} \sum_s \left(\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},s}^* \hat{a}_{-\mathbf{k},s}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) \\ &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}} \sum_s \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + \hat{a}_{-\mathbf{k},s}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) \end{aligned} \quad (5.106)$$

(wir haben $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm}^* = \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},\pm}$ verwendet) und analog

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = i \sqrt{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \sum_s \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} - \hat{a}_{-\mathbf{k},s}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right). \quad (5.107)$$

Es folgt

$$\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) - i \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = \sqrt{8\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{s'} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s'} \hat{a}_{\mathbf{k}s'} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad (5.108)$$

$$\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) + i \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = \sqrt{8\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{s'} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s'} \hat{a}_{-\mathbf{k},s'}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad (5.109)$$

also

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \cdot \left[\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) - i \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) \right] = \sqrt{8\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad (5.110)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \cdot \left[\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{c} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t) + i \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) \right] = \sqrt{8\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \hat{a}_{-\mathbf{k},s}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad (5.111)$$

und schließlich

$$\hat{a}_{\mathbf{k}s} = \frac{1}{\sqrt{8\pi\hbar}} e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \cdot \left[\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}} \frac{\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)}{c} - \frac{i}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) \right], \quad (5.112)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{8\pi\hbar}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \cdot \left[\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}} \frac{\hat{\mathbf{A}}(-\mathbf{k}, t)}{c} + \frac{i}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{\mathbf{E}}(-\mathbf{k}, t) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{8\pi\hbar}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \cdot \left[\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}} \frac{\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, t)^\dagger}{c} + \frac{i}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (5.113)$$

Die letzte Gleichheit folgt aus der Hermitizität von $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$ und $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t)$. Die Gleichung für $\hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger$ folgt natürlich auch unmittelbar aus derjenigen für $\hat{a}_{\mathbf{k}s}$. Nun berechnen wir den Kommutator

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}s}, \hat{a}_{\mathbf{k}'s'}^\dagger] = \frac{1}{8\pi\hbar} e^{i(\omega_{\mathbf{k}}-\omega_{\mathbf{k}'})t} \sum_{mn} (\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s})_m (\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s'})_n \left\{ \frac{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}'}}}{c^2} \underbrace{[\hat{A}_m(\mathbf{k}, t), \hat{A}_n(\mathbf{k}', t)^\dagger]}_{=0} \right\}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[\left(-i\omega_{\mathbf{k}'} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s'} \hat{a}_{\mathbf{k}'s'} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}'t})} + i\omega_{\mathbf{k}'} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s'}^* \hat{a}_{\mathbf{k}'s'}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}'t})} \right) \right. \\
& \quad \cdot \left(i\omega_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}t})} - i\omega_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}t})} \right) \\
& \quad + c^2 \left(i\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s'} \hat{a}_{\mathbf{k}'s'} e^{i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}'t})} - i\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}'s'}^* \hat{a}_{\mathbf{k}'s'}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}'t})} \right) \\
& \quad \cdot \left(i\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}t})} - i\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}t})} \right) \left. \right] \\
= & \frac{1}{2} \hbar \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{2\sqrt{\omega_{\mathbf{k}'}\omega_{\mathbf{k}}}} \sum_{ss'} \\
& \times \left[-\delta_{\mathbf{k}',-\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},s'} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{-\mathbf{k},s'} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}t}} + \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s'} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^* \hat{a}_{\mathbf{k}s'} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \right. \\
& + \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s'}^* \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s} - \delta_{\mathbf{k}',-\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^2 \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},s'}^* \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{-\mathbf{k},s'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{2i\omega_{\mathbf{k}t}} \\
& - c^2 \delta_{\mathbf{k}',-\mathbf{k}} ((-\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},s'}) \cdot (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}) \hat{a}_{-\mathbf{k},s'} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}t}} \\
& + c^2 \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s'}) \cdot (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^*) \hat{a}_{\mathbf{k}s'} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger + c^2 \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}') \cdot (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}) \hat{a}_{\mathbf{k}s'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s} \\
& \left. - c^2 \delta_{\mathbf{k}',-\mathbf{k}} ((-\mathbf{k}) \times \hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},s'}^*) \cdot (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}^*) \hat{a}_{-\mathbf{k},s'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{2i\omega_{\mathbf{k}t}} \right]. \tag{5.119}
\end{aligned}$$

Nun verwenden wir $\hat{\mathbf{e}}_{-\mathbf{k},\pm} = \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\pm}^*$, $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s'}^* \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s} = \delta_{s's}$ und

$$\begin{aligned}
(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}') \cdot (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}s}) &= \frac{\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \mp is' \mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1} \pm is \mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2}}{\sqrt{2}} \\
&= \frac{k \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2} \pm is' k \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1}}{\sqrt{2}} \cdot \frac{k \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}2} \mp is k \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}1}}{\sqrt{2}} \\
&= \frac{k^2 + s's k^2}{2} = \delta_{s's} k^2. \tag{5.120}
\end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2} \hbar \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{ss'} \left[-\omega_{\mathbf{k}}^2 \delta_{s's} \hat{a}_{-\mathbf{k},s} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}t}} + \omega_{\mathbf{k}}^2 \delta_{s's} \hat{a}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger + \omega_{\mathbf{k}}^2 \delta_{s's} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s} \right. \\
& \quad - \omega_{\mathbf{k}}^2 \delta_{s's} \hat{a}_{-\mathbf{k},s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{2i\omega_{\mathbf{k}t}} + c^2 k^2 \delta_{s's} \hat{a}_{-\mathbf{k},s} \hat{a}_{\mathbf{k}s} e^{-2i\omega_{\mathbf{k}t}} + c^2 k^2 \delta_{s's} \hat{a}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \\
& \quad \left. + c^2 k^2 \delta_{s's} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger + c^2 k^2 \delta_{s's} \hat{a}_{-\mathbf{k},s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger e^{2i\omega_{\mathbf{k}t}} \right]. \tag{5.121}
\end{aligned}$$

Mit $\omega_{\mathbf{k}} = ck$ heben sich jetzt die Terme der Form $\hat{a}\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger$ zwischen den **E**- und **B**-Feld-Beiträgen heraus und es folgt

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2} \hbar \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \sum_s (\hat{a}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s}) = \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} (\hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s} + 1 + \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right). \tag{5.122}
\end{aligned}$$

Der Hamiltonian zerfällt also in eine Summe über nicht wechselwirkende harmonische Oszillatoren. Die durch $\hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger$, $\hat{a}_{\mathbf{k}s}$ beschriebenen Photonen sind für das freie elektromagnetische Feld also wechselwirkungsfreie Bosonen. Der Beitrag $\frac{1}{2} \hbar \omega_{\mathbf{k}}$ ist die *Vakuumenergie* der Mode \mathbf{k}, s . Offenbar divergiert die totale Vakuumenergie. Im Rahmen einer Theorie für Materie und das elektromagnetische Feld, und auch im Standardmodell der Elementarteilchenphysik, ist das nicht kritisch, da man diese unendliche Energie dem Feld nicht entziehen kann. Bezieht man aber die Gravitation mit ein, so ist bisher nicht klar, wieso die Vakuumenergie des elektromagnetischen Feldes und weiterer Felder nicht zu einer zumindest sehr großen kosmologischen Konstanten führt. (Aus der offenbar beschleunigten Ausdehnung des Universums schließt man, dass die kosmologische Konstante zwar nicht Null ist,

aber viel kleiner, als die erwartete Vakuumenergie aufgrund bekannter Felder.) Dies ist ein Aspekt des größeren Problems, dass es an einer konsistenten Quantentheorie des Gravitationsfeldes mangelt.

Der *Casimir-Effekt* wird oft als Beispiel für die Beobachtbarkeit der Vakuumenergie angeführt. Die Idee ist, dass die Randbedingungen an – insbesondere leitenden – Körpern die erlaubten Feldmoden einschränken und damit die Vakuumenergie reduzieren. Dies führt zu einer Kraft zwischen den Körpern. Diese Interpretation ist umstritten; es wird auch behauptet, dass der Casimir-Effekt ohne Rückgriff auf die Vakuumenergie als relativistische van der Waals-Kraft verstanden werden kann.

Analog kann man den Gesamtimpuls des Feldes herleiten und findet

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{p}} &= \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \mathbf{k} \frac{1}{2} (\hat{a}_{\mathbf{k}s} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s}) = \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \mathbf{k} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}s} \hbar \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}s},\end{aligned}\tag{5.123}$$

wobei sich die Vakuumbeiträge von \mathbf{k} und $-\mathbf{k}$ aufheben. Wir folgern, dass Photonen den Impuls $\hbar \mathbf{k}$ tragen. Ähnlich können wir herleiten, dass ihr Spin $S = 1$ ist, siehe z. B. die Vorlesungen Quantenfeldtheorie und Vielteilchentheorie und vgl. auch Abschnitt 3.6.1 zur Theorie massiver Spin-1-Bosonen.

5.3.3 Kopplung an Materie: QED

Addieren wir die Lagrange-Dichten des elektromagnetischen und des Dirac-Feldes und quantisieren sie kanonisch (transversal bosonisch bzw. fermionisch), so erhalten wir sofort die Lagrange-Dichte der Quantenelektrodynamik (QED). Sie lautet in Gaußschen Einheiten

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu + i\hbar c \bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - mc^2 \bar{\psi} \psi\tag{5.124}$$

mit der Ladungsstromdichte

$$j^\mu = cq \bar{\psi} \gamma^\mu \psi.\tag{5.125}$$

Sie unterscheidet sich von der Wahrscheinlichkeitsstromdichte aus Abschnitt 3.3.4 durch einen Faktor der Ladung q . Hier haben wir den Zirkumflex zur Kennzeichnung der Feldoperatoren weggelassen. Es folgt

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= -\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - q \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu \psi + i\hbar c \bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - mc^2 \bar{\psi} \psi \\ &= i\hbar c \bar{\psi} \gamma^\mu \underbrace{\left(\partial_\mu + i \frac{q}{\hbar c} A_\mu \right)}_{= D_\mu} \psi - mc^2 \bar{\psi} \psi - \frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}.\end{aligned}\tag{5.126}$$

Für das Elektronenfeld ist natürlich $q = -e$. Die gesamte QED, eine quantitativ sehr erfolgreiche Theorie, beruht also auf der Lagrange-Dichte, in knappster Form,

$$\mathcal{L} = i\hbar c \bar{\psi} \not{D} \psi - mc^2 \bar{\psi} \psi - \frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}.\tag{5.127}$$

Diese Gleichung ist bemerkenswert kurz. Allein hieraus ergibt z. B. die präzise Berechnung des g -Faktors des Elektrons, $g \approx 2,00231930$. Dies funktioniert so gut, weil die charakteristische Kopplungsstärke der QED, nämlich die Feinstrukturkonstante $\alpha \approx 1/137$ ($\alpha = e^2/\hbar c$ in Gauß-Einheiten), recht klein im Vergleich zu eins ist, was Störungsrechnung mit α als kleinem Parameter gestattet.

Die Quantenfeldtheorien der vereinigten elektroschwachen und der starken Wechselwirkung lassen sich durch konzeptionell ähnliche, aber kompliziertere Lagrange-Dichten charakterisieren. In diesen Fällen sind die Kopplungsstärken aber nicht klein, so dass Störungstheorie weniger präzise Ergebnisse liefert oder ganz versagt.