

Universität Konstanz
Fachbereich Physik

Höhere Quantenmechanik und Elektrodynamik

Wintersemester 2018/19

Prof. Dr. G. Burkard

Ausarbeitung: Matthias Droth (2008/09), Guido Burkard

Herausgeber: Fachbereich Physik, Universität Konstanz

Inhaltsverzeichnis

0	Einleitung	7
I	Nicht-relativistische Quantenmechanik	9
1	Grundlagen	11
1.1	Schrödinger-Gleichung	11
1.2	Drehimpuls	13
1.3	Spin	14
1.4	Symmetrien in der Quantenmechanik	16
1.4.1	Drehgruppe $SO(3)$	17
1.4.2	Permutationsgruppe S_N^*	19
1.4.3	N identische Teilchen mit Spin $1/2^*$	23
2	Addition von Drehimpulsen	27
2.1	Zwei Spin $1/2$ Teilchen	27
2.2	Allgemeiner Fall	29
2.3	Atome mit mehreren Elektronen	32
2.4	Herleitung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten*	34
2.5	Spin und Bahndrehimpuls des Elektrons*	36
3	Näherungsmethoden	39
3.1	Zeitunabhängige (stationäre) Störungstheorie	40
3.2	Zeitabhängige Störungstheorie	40
3.2.1	Übergangswahrscheinlichkeiten	42
3.2.2	Fermis Goldene Regel	46
3.3	Variationsmethoden	46
3.4	Streutheorie	47
3.4.1	Born-Näherung	51
3.4.2	Partialwellenzerlegung	53
4	Nicht-relativistische Vielteilchensysteme	55
4.1	Zweite Quantisierung	55
4.1.1	Identische Teilchen	55

4.1.2	Der (Anti-) Symmetrisierungsoperator	57
4.1.3	Besetzungszahlbasis	59
4.1.4	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Bosonen	60
4.1.5	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen	62
4.1.6	Operatoren in zweiter Quantisierung	64
4.1.7	Feldoperatoren	66
	Bewegungsgleichungen (Feldgleichungen)*	68
4.1.8	Impulsdarstellung	68
4.1.9	Spin	69
4.2	Spin-1/2-Fermionen	70
4.2.1	Nicht-wechselwirkendes Elektronengas	71
	Elementare Anregungen	73
	Dichte und Dichtekorrelation	75
4.2.2	Wechselwirkung in Hartree-Fock Näherung	79
	Änderung der Energieniveaus*	81
4.3	Bosonen	84
4.3.1	Nicht-wechselwirkende Bosonen: Ideales Bose-Gas	84
	Paarverteilungsfunktion	84
	Thermodynamik: Bose-Einstein-Kondensation*	86
4.3.2	Schwach wechselwirkendes, verdünntes Bose-Gas	89
	Bogoliubov-Theorie	90
	Reales Helium: Suprafluidität	96
II Elektrodynamik und Spezielle Relativitätstheorie		99
5	Spezielle Relativitätstheorie	101
5.1	Grundlagen	101
5.2	Lorentz-Transformationen	104
5.3	Physikalische Folgen	109
5.4	Kovarianter vierdimensionaler Formalismus	111
5.5	Klassische Mechanik in kovarianter Form	113
6	Kovariante Formulierung der Elektrodynamik	117
6.1	Maxwell-Gleichungen	117
6.2	Lagrange-Formalismus	120
III Relativistische Quantenmechanik		125
7	Einteilchentheorie: Dirac-Gleichung	127
7.1	Klein-Gordon-Gleichung	128
7.2	Dirac-Gleichung	129
7.3	Lösungen der Dirac-Gleichung für freie Teilchen	137

7.3.1	Ruhende Teilchen mit endlicher Masse	137
7.3.2	Teilchen mit endlichem Impuls und endlicher Masse	138
7.3.3	Masselose Teilchen	139
7.4	Kopplung an das elektromagnetische Feld	142
7.5	Nicht-relativistischer Grenzfall, Pauli-Gleichung	143
7.6	Relativistische Korrekturen	145
7.6.1	Foldy-Wouthuysen-Transformationen	145
7.6.2	Pauli-Gleichung mit relativistischen Korrekturen	149
7.6.3	Diskussion der relativistischen Korrekturen	149
7.7	Interpretation der Dirac-Gleichung	151
8	Quantenelektrodynamik	153
8.1	Elektronen	153
8.1.1	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	153
8.1.2	Feldoperatoren	155
8.1.3	Spin-Statistik-Theorem	157
8.2	Photonen	161
8.2.1	Klassisches Strahlungsfeld	161
	Eichtransformationen	162
	Lagrange-Dichte für das elektromagnetische Feld	163
8.2.2	Feldquantisierung	165
8.3	Licht und Materie: QED	167
8.3.1	Strahlungsübergänge	168
	Berechnung von Emission und Absorption	168
	Einstein A und B Koeffizienten	170
8.3.2	Streuvorgänge	171
	Streumatrix	171
	Prozesse tiefster Ordnung	173

Kapitel 0

Einleitung

Die Grundlagen und wichtigsten Anwendungen der Quantenmechanik (QM) sind aus der ersten QM-Vorlesung (Integrierter Kurs / Physik 4) bekannt. Die bisherige Behandlung der Quantentheorie war aber doch in mehrfacher Hinsicht beschränkt. Das Thema dieser Vorlesung wird die Überwindung dieser Beschränkungen sein. Konkret:

1. Bisher haben wir uns auf die Beschreibung einzelner Teilchen ($N = 1$) beschränkt. Zwar ist Wasserstoff (H) mit einem Elektron das häufigste Element im Universum, und viele Eigenschaften komplexer Atome folgen aus jenen des H-Atoms. Auch können einige Eigenschaften von Festkörpern aufgrund der Quantenphysik einzelner Elektronen verstanden werden. *Aber:* Ohne **Vielteilchenphysik** ($N > 1$) kann man die Welt nicht verstehen, z.B.
 - Stabilität der Materie,
 - Supraleitung,
 - komplexe Atome \rightarrow Chemie, Biologie,
 - relativistische QM braucht $N > 1$ (s. unten).
2. Bisher haben wir die QM auf der nichtrelativistischen Bewegung von Teilchen aufgebaut. In dieser Vorlesung werden wir eine Quantenmechanik entwickeln, die mit den Prinzipien der Speziellen Relativitätstheorie (SRT) kompatibel ist. Die **relativistische QM** ist die Grundlage zur Behandlung folgender Themen:
 - Quantenfeldtheorie, Elementarteilchenphysik,
 - relativistische Effekte in Atomen und Festkörpern: Spin, Spin-Bahn-Kopplung.
3. Bisher haben wir uns in der QM auf eine endliche Anzahl von Freiheitsgraden beschränkt (z.B. 3 Freiheitsgrade für ein Teilchen in 3 Dimensionen). Hier werden wir uns mit **unendlich vielen Freiheitsgraden** befassen, indem wir **Felder quantisieren** (z.B. das elektromagnetische Feld).

4. Auch die bisher zur Verfügung stehenden Methoden zur Lösung von QM Problemen sind beschränkt. Aufgrund der oben genannten Erweiterungen werden die zu lösenden Probleme komplexer und legen eine Reihe von z.T. fortgeschrittenen Methoden zu deren Behandlung nahe:

- Näherungsmethoden,
- zweite Quantisierung,
- kovarianter Formalismus, etc.

Teil I

Nicht-relativistische Quantenmechanik

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Schrödinger-Gleichung

Der *Zustand* eines Systems wird in der Quantenmechanik beschrieben durch die *Wellenfunktion* ψ . Für ein Teilchen ist die komplexe Zahl $\psi(\vec{x}, t)$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass sich das Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{x} befindet. $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ ist die reelle Wahrscheinlichkeitsdichte dafür. Die Menge aller Wellenfunktionen ψ bildet einen Hilbertraum \mathcal{H} . Die Normierung der Wellenfunktion wird durch die Bedingung $\int d\vec{x} |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1$, für beliebige t , bestimmt. Die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems wird beschrieben durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(t)\psi, \quad (1.1)$$

wobei der Hamiltonoperator für ein Teilchen im nichtrelativistischen Fall

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x}, t) \quad (1.2)$$

lautet. Wir werden auch Systeme mit $N > 1$ Teilchen betrachten, mit dem Hamiltonoperator

$$H(t) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + V_i(\vec{x}_i, t) \right) + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t). \quad (1.3)$$

Eine Paarwechselwirkung zwischen den Teilchen wird durch $V = \sum_{i,j=1}^N V(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ beschrieben. Im zeitunabhängigen Fall, wo $H(t) = H$, verwenden wir den Separationsansatz

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-itE/\hbar} \phi(\vec{x}), \quad (1.4)$$

welcher uns auf das Eigenwertproblem

$$H\phi = E\phi \quad (1.5)$$

führt. Die Gleichung (1.5) heißt zeitunabhängige (oder stationäre) Schrödinger-Gleichung.

In der Quantenmechanik entsprechen beobachtbaren Größen (*Observablen*) hermitesche Operatoren O , mit $O^\dagger = O$. Der Erwartungswert dieser Observablen ist gegeben durch die reelle Zahl $\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle$. Für Erhaltungsgrößen gilt $[O, H] = 0$, woraus mit (1.1) folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle O \rangle &= \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} | O | \psi \right\rangle + \langle \psi | O | \frac{\partial \psi}{\partial t} \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} (\langle \psi | HO | \psi \rangle - \langle \psi | OH | \psi \rangle) \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [H, O] | \psi \rangle = 0, \\ \Rightarrow \langle O \rangle &= \text{const.} \end{aligned} \tag{1.6}$$

Falls H zeitunabhängig ist, können O und H gleichzeitig diagonalisiert werden, mit anderen Worten es gibt eine Basis bestehend aus Eigenzuständen sowohl von H als auch von O ,

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow EO|\psi\rangle = OE|\psi\rangle = OH|\psi\rangle = HO|\psi\rangle.$$

Wenn E ein nicht-entarteter Eigenwert von H ist, dann folgt aus $H(O|\psi\rangle) = E(O|\psi\rangle)$, dass

$$O|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle.$$

Falls E entartet ist, dann müssen wir O im entsprechenden Eigenraum diagonalisieren.

Als Beispiel betrachten wir ein freies Teilchen (z.B. in einer Dimension). Die Impulserhaltung kann man sich wie folgt veranschaulichen:

$$[p, H] = \left[p, \frac{p^2}{2m} \right] + [p, V(x)] = 0 - i \frac{dV}{dx}.$$

Also $[p, H] = 0$, falls $\frac{dV}{dx} = 0$, d.h. $V(x) = \text{const.}$ (o.B.d.A. $V(x) = 0$).

Für $V(x) = 0$ hat man ein freies Teilchen mit $H = \frac{p^2}{2m}$ und ($\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} p|\psi\rangle &= k|\psi\rangle, \\ -i \frac{\partial}{\partial x} |\psi\rangle &= k|\psi\rangle \Rightarrow \psi(x) = C e^{ikx}. \end{aligned}$$

Für einen endlichen Kasten der Länge L erhält man die Normierung $C = \frac{1}{\sqrt{L}}$.

1.2 Drehimpuls

Wir betrachten nun ein Zentralpotential in drei Dimensionen, $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x})$ mit $V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$ (z.B. H-Atom). Für den Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ gilt

$$\begin{aligned} [\vec{L}, H] &= \frac{1}{2m} [\vec{x}, p^2] \times \vec{p} + \vec{x} \times [\vec{p}, V(\vec{x})] \\ &= \frac{1}{2m} \underbrace{2i\hbar\vec{p} \times \vec{p}}_{=0} + \vec{x} \times \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}V(\vec{x})\right)}_{=0} = 0. \end{aligned}$$

Der letzte Term verschwindet, da es sich um ein Zentralpotential handelt und somit

$$\vec{\nabla}V(\vec{x}) = \frac{\partial V}{\partial|\vec{x}|} \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}.$$

Im drehsymmetrischen System ist der *Drehimpuls* also eine erhaltene Größe.

(i) Definition des Drehimpulses:

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \quad (1.7)$$

(ii) Vertauschungsrelationen (VR):

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} L_k \quad (1.8)$$

mit $\epsilon_{123} = \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1$, $\epsilon_{321} = \epsilon_{213} = \epsilon_{132} = -1$ und $\epsilon_{ijk} = 0$ sonst. Aus (1.8) folgt mit $L^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$:

$$[L^2, L_i] = 0. \quad (1.9)$$

(iii) Spektrum (Eigenzustände und Eigenwerte):

Mit (1.9) existiert eine Orthonormalbasis (ONB) $\{|l, m\rangle\}$ mit

$$L^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle, \quad (1.10)$$

$$L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle, \quad (1.11)$$

wobei $2l \geq 0$ eine ganze Zahl ist, und

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (1.12)$$

Falls $[\vec{L}, H] = 0$, dann existiert eine ONB $\{|n, l, m\rangle\}$ mit (1.10), (1.11) und

$$H|n, l, m\rangle = \epsilon_n|n, l, m\rangle.$$

(iv) Die Leiteroperatoren

$$L_{\pm} := L_x \pm iL_y$$

gehörchen den VR

$$\begin{aligned} [L_z, L_{\pm}] &= \pm \hbar L_{\pm}, \\ [L_+, L_-] &= 2\hbar L_z. \end{aligned}$$

Die „Leiter-Eigenschaft“ ist

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle, \quad (1.13)$$

wobei

$$\begin{aligned} L_+|l, l\rangle &= 0, \\ L_-|l, -l\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (1.14)$$

1.3 Spin

Teilchen wie das Elektron besitzen neben dem durch die Bewegung erzeugten Drehimpuls \vec{L} noch einen internen Drehimpuls, den sogenannten Spin. (Die Existenz des Spins folgt aus der relativistischen QM, siehe später in Teil III). Der Spin hat nicht die Form (1.7), erfüllt aber (1.8). Deshalb gelten alle Beziehungen (1.9) bis (1.14). Für den Spin 1/2 (z.B. beim Elektron) ersetzen wir $l \rightarrow s = 1/2$ und $m \rightarrow m_s = \pm 1/2$.

Der Gesamtdrehimpuls eines Teilches ist die Summe aus Bahndrehimpuls und Spin,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (1.15)$$

Für den Spin gelten Gln. (1.10) und (1.11),

$$S^2|s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s, m_s\rangle, \quad (1.16)$$

$$S_z|s, m_s\rangle = \hbar m_s|s, m_s\rangle. \quad (1.17)$$

Im Fall von Spin $s = 1/2$, z.B. für Elektronen, benutzt man oft folgende abgekürzte Notation für die Basis,

$$|s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle, \quad (1.18)$$

$$|s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle. \quad (1.19)$$

Die Wirkung des Operators S_z auf diese Basiszustände ist

$$S_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle, \quad (1.20)$$

$$S_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle, \quad (1.21)$$

so dass wir den Operator S_z als Matrix darstellen können,

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (1.22)$$

wobei wir die Pauli-Matrix σ_z eingeführt haben. Allgemeiner gilt

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad (1.23)$$

mit $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ und den drei Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

Einige wichtige Eigenschaften der Pauli-Matrizen sind

(i)

$$\sigma_i^2 = \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.25)$$

(ii)

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \text{ (und zyklisch)}, \quad (1.26)$$

(iii)

$$\{\sigma_x, \sigma_y\} = 0 \text{ (und zyklisch)}, \quad (1.27)$$

$$\text{bzw. } \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x \text{ (und zyklisch)}, \quad (1.28)$$

(iv)

$$\text{Tr}(\sigma_i) = 0 \quad (i = 1, 2, 3). \quad (1.29)$$

1.4 Symmetrien in der Quantenmechanik

Symmetrien spielen eine wichtige Rolle in der QM, deshalb besprechen wir hier die wichtigsten Konzepte in diesem Zusammenhang. Im Allgemeinen sind Symmetrien jene Transformationen, welche ein Objekt wieder in sich selber überführen, z.B. Drehungen oder Spiegelungen im Raum. In der QM werden Transformationen, welche die Bewegungsgleichungen invariant lassen, als Symmetrien bezeichnet. Z.B. beim symmetrischen Potentialtopf in einer Dimension, für welchen gilt $V(-x) = V(x)$. Der Symmetrieoperator auf dem Konfigurationsraum (hier \mathbb{R}) lautet $\tilde{P} : x \mapsto -x$, seine Darstellung auf dem Hilbertraum \mathcal{H} ist

$$P : \psi(x) \mapsto \psi(\tilde{P}x) = \psi(-x). \quad (1.30)$$

Nun folgt

$$[H, P] = HP - PH = 0. \quad (1.31)$$

Beweis: Für beliebige $\psi \in \mathcal{H}$ gilt

$$PH\psi(x) = P(p^2/2m + V(x))\psi(x) = (p^2/2m + V(-x))\psi(-x) = HP\psi(x). \quad (1.32)$$

Im letzten Schritt haben wir $V(-x) = V(x)$ verwendet.

Allgemein gilt: S ist eine Symmetrie, d.h. erhält die Bewegungsgleichungen unter $\psi \mapsto S\psi$, genau dann wenn $[H, S] = 0$. Beweis: Wende S auf beide Seiten der Schrödingergleichung $i\hbar\partial_t\psi = H\psi$ an. Umgekehrt folgt: Falls ψ eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung, dann auch $S\psi$.

Für zeitunabhängige Systeme gilt: Wegen $[H, S] = 0$ können H und S mit dem selben Satz von Eigenzuständen diagonalisiert werden, d.h. man kann die Eigenzustände von H (die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung) immer so wählen, dass diese auch Eigenzustände von S sind. Z.B. können wir die Eigenzustände eines symmetrischen Potentialtopfes in gerade Funktionen (mit Eigenwert $+1$ von P) und ungerade Funktionen (mit Eigenwert -1 von P) einteilen.

Mathematisch gesehen bildet die Menge aller Symmetrieoperatoren eines Systems eine Gruppe¹ G . Oft sind die Symmetrieoperatoren zunächst auf dem Konfigurationsraum definiert, z.B. \tilde{P} (s. oben), oder $R \in SO(3)$ mit der Rotationsgruppe $SO(3)$ bei drehsymmetrischen Systemen.

Eine unitäre *Darstellung* einer Gruppe auf den Hilbertraum \mathcal{H} nennt man eine mit den Gruppenoperationen verträgliche Abbildung

$$D : g \mapsto D(g), \quad (1.33)$$

¹Eine Gruppe ist eine Menge G mit einer Verknüpfung $G \times G \rightarrow G$, $(g, h) \mapsto gh$, in welcher ein neutrales Element und zu jedem Element ein Inverses existiert. Eine Abelsche Gruppe ist eine Gruppe, in welcher $gh = hg$ für alle g, h .

wobei $D(g)$ ein unitärer Operator auf dem Hilbertraum darstellt welcher mit den Gruppenoperationen verträglich ist. Unter der *Dimension* der Darstellung versteht man die Dimension des Zielraums (ein Unterraum von \mathcal{H}). Ein Beispiel einer solchen Darstellung findet man für die Paritätsgruppe $G = \{\mathbb{1}, \tilde{P}\}$, mit $D(\mathbb{1}) = \mathbb{1}$ und $D(\tilde{P}) = P$. Zwei Darstellungen D und D' sind *äquivalent*, falls es einen invertierbaren linearen Operator Π gibt, so dass $D(g) = \Pi D'(g) \Pi^{-1}$ für alle $g \in G$.

Weitere Definitionen: Ein *invarianter Unterraum* U des Hilbertraums besteht aus Vektoren, die von allen Symmetrieoperationen allesamt wieder in denselben Unterraum abgebildet werden, d.h.

$$D(g)\psi \in U \quad \forall g \in G, \psi \in U. \quad (1.34)$$

Eine Darstellung D ist auf einem invarianten Unterraum U

- i) *irreduzibel*, falls U keine invarianten Unterräume enthält ausser die Nullmenge und U selber,
- ii) *reduzibel*, falls nicht irreduzibel,
- iii) *zerlegbar*, falls $U = U_1 \oplus U_2 \oplus \dots$ und U_i invariante Unterräume,
- iv) *vollständig zerlegbar*, falls zerlegbar und D auf allen U_i irreduzibel ist.

Wichtig für uns ist der folgende Satz aus der Darstellungstheorie:

- Jede unitäre Darstellung ist entweder irreduzibel oder vollständig zerlegbar.
- Die Zerlegung ist eindeutig bis auf Äquivalenz.
- Irreduzible Darstellungen von Abelschen Gruppen sind eindimensional.

In der QM kann man aufgrund dieser mathematischen Tatsache den Hilbertraum in die irreduziblen Darstellungsräume U_i der Symmetriegruppe G des Systems zerlegen. Das Studium der irreduziblen Darstellungen von G der relevanten Symmetriegruppe ermöglicht so die Bestimmung des Verhaltens aller Zustände unter G . Die für diese Vorlesung wichtigsten Beispiele sind die Drehgruppe $SO(3)$ und deren Erweiterung $SU(2)$ sowie die Permutationsgruppe S_N .

1.4.1 Drehgruppe $SO(3)$

Drehungen sind lineare orthogonale Abbildungen, welche die Orientierung (rechtshändig / linkshändig) erhalten, d.h.

$$SO(3) = \{R : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \mid R^T R = R R^T = \mathbb{1}, \det R = 1\}. \quad (1.35)$$

Eine unitäre Darstellung von $SO(3)$ auf dem Hilbertraum eines Teilchens im dreidimensionalen Raum \mathbb{R}^3 erhält man durch die Vorschrift

$$D(R)\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r}). \quad (1.36)$$

Diese Abbildung ist ein Gruppenhomomorphismus, falls darauf geachtet wird, dass bei wiederholter Anwendung $D(R_2)D(R_1)\psi(\vec{r})$ die Drehung R_2^{-1} auf das Argument der Funktion $\tilde{\psi}(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$ wirkt und nicht erneut auf das direkte Argument von ψ . Infinitesimale Drehungen um die Achse $\vec{\omega}$ lassen sich als $R_{\vec{\omega}}\vec{r} = \vec{r} + \omega \times \vec{r}$ schreiben, und man findet

$$D(R_{\vec{\omega}})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - \vec{\omega} \times \vec{r} \cdot \vec{\nabla}\psi(\vec{r}). \quad (1.37)$$

Dies kann man durch den Impulsoperator $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ ausdrücken,

$$D(R_{\vec{\omega}})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) - \frac{i}{\hbar}(\vec{\omega} \times \vec{r}) \cdot \vec{p}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}\psi(\vec{r}), \quad (1.38)$$

wobei im Spatprodukt zyklisch vertauscht und die Definition des Drehimpulses Gl. (1.7) verwendet wurde. Somit finden wir für die Darstellung von infinitesimalen Drehungen

$$D(R_{\vec{\omega}}) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\vec{\omega} \cdot \vec{L}. \quad (1.39)$$

Endliche Drehungen um einen Winkel ϕ um die Achse \hat{n} können aus infinitesimalen Drehungen zusammengesetzt werden, wobei $\vec{\phi} = \phi\hat{n}$,

$$D(R_{\vec{\phi}}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(R_{\vec{\phi}/n} \right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{\phi} \cdot \vec{L}}{n} \right)^n = e^{i\vec{\phi} \cdot \vec{L}/\hbar}. \quad (1.40)$$

Man sagt, der Drehimpuls \vec{L} *erzeuge* die Drehungen $R \in SO(3)$. Die irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$ ergeben sich nun aus den Betrachtungen in Abschnitt 1.2 als die Eigenräume \mathcal{H}_l von L^2 mit den Eigenwerten $l(l+1)$ für $l = 0, 1, 2, \dots$. Die Dimension dieser Darstellungen ist $2l+1$. Für den räumlichen Drehimpuls kommen wegen der Stetigkeitsbedingung $\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi)$ an die Wellenfunktion nur die ganzzahligen l vor, während für den Spin auch halbzahlige Werte von l bzw. s möglich sind, $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$. Diese ergeben sich allerdings aus der Darstellungstheorie der Gruppe $SU(2)$ der unitären Operatoren U auf \mathbb{C}^2 mit $\det U = 1$. Die Gruppen $SO(3)$ und $SU(2)$ sind lokal äquivalent, aber $SU(2)$ ist 'doppelt so groß', was man mit dem Gruppenhomomorphismus

$$SU(2) \longrightarrow SO(3) \quad (1.41)$$

$$U \longmapsto \phi(U) \quad (1.42)$$

zeigen kann, wobei

$$\phi(U) : \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \quad (1.43)$$

$$\vec{r} \longmapsto \text{Tr}(\vec{\sigma} [U\vec{r} \cdot \vec{\sigma}U^\dagger]). \quad (1.44)$$

Es gilt $\phi(-U) = \phi(U)$; man sagt $SU(2)$ sei die *Deckgruppe* von $SO(3)$.

1.4.2 Permutationsgruppe S_N^*

Die Permutationsgruppe oder symmetrische Gruppe S_N besteht aus allen Permutationen (Vertauschungen) von N Objekten, d.h.

$$S_N = \{p : \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \{1, 2, \dots, N\} \mid p \text{ bijektiv}\}. \quad (1.45)$$

Man kann eine Permutation als Liste ihrer Werte schreiben,

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ p(1) & p(2) & p(3) & \cdots & p(n) \end{pmatrix}, \quad (1.46)$$

wobei die Reihenfolge keine Rolle spielt, und man die nicht permutierten Elemente mit $p(i) = i$ weglassen kann. Im Gegensatz zu $SO(3)$ ist S_N eine endliche Gruppe mit $|S_N| = N!$ Elementen. Die Anzahl Elemente einer endlichen Gruppe nennt man deren *Ordnung*.

In der Quantenmechanik ist S_N eine Symmetrie eines Systems von N identischen Teilchen, weil deren Vertauschung das System unverändert lässt.

Um die Darstellungen von S_N zu konstruieren, benützt man, dass für alle endlichen Gruppen gilt: Jede irreduzible Darstellung entspricht genau einer Klasse der Gruppe. Somit ist die Anzahl irreduzibler Darstellungen gleich der Anzahl der Klassen der Gruppe.

Die einem Element x der Gruppe G zugehörige *Klasse* einer Gruppe ist die Menge

$$C_x = \{yxy^{-1} \mid y \in G\}, \quad (1.47)$$

d.h. die Menge aller zu x konjugierten Elemente. Mit dieser Definition gilt:

- i) Jede Gruppe zerfällt in disjunkte Klassen.
- ii) Eine Abelsche Gruppe mit n Elementen (der Ordnung n) hat genau n Klassen mit je einem Element.
- iii) $C_1 = \{1\}$.

Die Klassen von S_N erschliessen sich uns mit folgender Definition. Ein *Zyklus* der Länge k ist eine Permutation

$$p = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_{k-1} & a_k & a_{k+1} & \cdots & a_N \\ a_2 & a_3 & \cdots & a_k & a_1 & a_{k+1} & \cdots & a_N \end{pmatrix} =: (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_{k-1} \ a_k). \quad (1.48)$$

Hierbei ist ein Zyklus der Länge 1 gleich der Identität und ein Zyklus der Länge 2 entspricht dem Vertauschen zweier Elemente und heisst *Transposition* $(a_1 a_2)$.

Wir formulieren den folgenden Satz (ohne Beweis):

- i) Disjunkte Zyklen kommutieren (vertauschen).
- ii) Jede Permutation $p \in S_N$ kann als Produkt disjunkter Zyklen dargestellt werden; diese Darstellung ist eindeutig bis auf zyklische Vertauschung der Einträge. Die Länge dieser Zyklen addieren sich zu N , wenn Zyklen der Länge 1 mitgezählt werden.
- iii) Jeder Zyklus kann als Produkt von Transpositionen dargestellt werden (nicht eindeutig).
- iv) Folglich kann jede Permutation als Produkt von Transpositionen dargestellt werden. Diese Zerlegung ist nicht eindeutig, die Parität (gerade oder ungerade) der Anzahl benötigter Transpositionen ist aber eindeutig.
- v) Die Klassen von S_N bestehen aus Permutationen mit derselben *Zyklusstruktur*, d.h. denselben Längen der Zyklen.
- vi) Die Zyklusstruktur einer Permutation wird eindeutig durch eine *Partition* (Zerlegung) von N definiert: $\lambda = [\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_k]$ mit $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_k$ und $\sum_{i=1}^k \lambda_i = N$.
- vii) Eine Partition kann wiederum durch ein *Young-Diagramm* dargestellt werden.

Beispiel zu (ii):

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = (153)(24). \quad (1.49)$$

Beispiel zu (iii): $(153) = (13)(15) = (35)(15)(13)(35)$. Beispiel zu (iv):

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = (13)(15)(24) = (35)(15)(13)(35)(24). \quad (1.50)$$

Ein Young-Diagramm ist eine graphische Darstellung einer Partition, z.B. für $N=5$,

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & \\ \hline \end{array} \quad \text{für } [5], \quad (1.51)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & & \\ \hline & & & \\ \hline & & & \\ \hline \end{array} \quad \text{für } [41], \quad (1.52)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \quad \text{für } [32], \quad (1.53)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \quad \text{für } [311] \equiv [31^2], \quad (1.54)$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \quad \text{für } [2^21], \quad (1.55)$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \quad \text{für } [21^3], \quad (1.56)$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \end{array} \quad \text{für } [1^5]. \quad (1.57)$$

Gemäss dem vorausgegangenen Satz gehört zu jedem Young-Diagramm eine irreduzible Darstellung von S_N . Wie sehen die irreduziblen Darstellungen von S_N in der QM konkret aus? Dazu verwenden wir folgende Vorschrift:

- 1) Durch Einfüllen der Zahlen 1 bis N in ein Young-Diagramm entsteht ein *Young-Tableau*. Falls die Zahlen geordnet sind, spricht man von einem *normalen Young-Tableau*, z.B.

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & 5 & \\ \hline \end{array} \quad (1.58)$$

Auf diese Zahlen können $p \in S_N$ angewendet werden.

- 2) Stellen Permutationen $p \in S_N$ durch Hermitesche Operatoren dar,

$$D(p) \equiv P : \Psi(x_1, \dots, x_N) \mapsto \Psi(x_{p(1)}, \dots, x_{p(N)}), \quad (1.59)$$

wobei $x_i = \vec{r}_i$ ohne Spin oder $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$ mit Spin. Im Folgenden schreiben wir P statt $D(p)$ oder p .²

- 3) Definieren den zur Partition $\lambda = [\lambda_1 \cdots \lambda_k]$ gehörigen Zeilen (Anti-) Symmetrisierungsoperator

$$S_\lambda = \frac{1}{\lambda_1! \lambda_2! \cdots \lambda_l!} \sum_H^\lambda H, \quad (1.60)$$

$$A_\lambda = \frac{1}{\lambda_1! \lambda_2! \cdots \lambda_l!} \sum_H^\lambda (-1)^H H, \quad (1.61)$$

wobei die Summen über alle Permutatationen H mit Zyklenstruktur λ laufen und $(-1)^P$ als $+1$ (-1) definiert ist, falls die Permutation P durch eine gerade (ungerade) Anzahl Transpositionen dargestellt wird (man spricht auch von geraden und ungeraden Permutationen). Entsprechend definieren wir die Spalten (Anti-) Symmetrisierungsoperatoren,

$$\tilde{S}_\lambda = \frac{1}{\tilde{\lambda}_1! \tilde{\lambda}_2! \cdots \tilde{\lambda}_l!} \sum_V^{\tilde{\lambda}} V, \quad (1.62)$$

$$\tilde{A}_\lambda = \frac{1}{\tilde{\lambda}_1! \tilde{\lambda}_2! \cdots \tilde{\lambda}_l!} \sum_V^{\tilde{\lambda}} (-1)^V V, \quad (1.63)$$

wobei hier die *zugeordnete Zerlegung* $\tilde{\lambda}$ zum *zugeordneten Young Diagramm* gehört:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} \longrightarrow \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \quad (1.64)$$

Daraus konstruieren wir die *irreduziblen (Anti-) Symmetrisierungsoperatoren*

$$I_\lambda = S_\lambda \tilde{A}_\lambda, \quad (1.65)$$

$$J_\lambda = \tilde{A}_\lambda S_\lambda. \quad (1.66)$$

- 4) Wir benützen den folgenden Satz über die Darstellungen von S_N :

- i) Die Vektoren $I_\lambda |\Psi\rangle$ für $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, spannen den Darstellungsraum der zu λ gehörigen irreduziblen Darstellung von S_N auf.

²Das Folgende gilt auch allgemein für Darstellungen von S_N , dazu benötigt man aber die zugehörige Gruppenalgebra.

- ii) Vektoren $J_\lambda|\Psi\rangle$ spannen denselben Darstellungsraum auf.
- iii) Für $\lambda \neq \mu$ werden zwei inäquivalente irreduzible Darstellungen aufgespannt.

Es gibt zwei eindimensionale Darstellungen von S_N :

- i) die identische (=symmetrische) Darstellung, in welcher $P\Psi = \Psi$ für alle $P \in S_N$ und $\Psi \in \mathcal{H}$,
- ii) die antisymmetrische $P\Psi = (-1)^P\Psi$ für alle $P \in S_N$ und $\Psi \in \mathcal{H}$.

Allgemeine Darstellungen sind weder symmetrisch noch antisymmetrisch sondern beschreiben eine andere Symmetrieeigenschaft bezgl. Vertauschungen, sog. gemischte Symmetrie. In der QM spielen aber die symmetrische und antisymmetrische Darstellung die wichtigste Rolle.

1.4.3 N identische Teilchen mit Spin $1/2^*$

Wir betrachten N identische Teilchen mit Spin $1/2$, sogenannte Fermionen (s. Kapitel 3). Der Gesamtspin ist

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{S}_i. \quad (1.67)$$

Für den Moment ignorieren wir die Bewegung der Teilchen, beschrieben durch den Bahndrehimpuls \vec{L} . Wir haben zwei Symmetrien, die Drehsymmetrie $SO(3)$ und die Permutationssymmetrie S_N .

Wegen $[H, \vec{S}] = 0$ können wir schreiben

$$S_z|MS\rangle = \hbar M|MS\rangle, \quad (1.68)$$

$$S^2|MS\rangle = \hbar^2 S(S+1)|MS\rangle. \quad (1.69)$$

Weil die Teilchen identisch sind gilt $[H, P] = 0$ für alle $P \in S_N$, ausserdem $[\vec{S}, P] = 0$ für alle $P \in S_N$.

Die relevanten Darstellungen von S_N für feste Werte von S und M erhalten wir aus den entsprechenden Young-Diagrammen. Die Anzahl spin up (down) Teilchen bezeichnen wir mit N_\uparrow und N_\downarrow wobei $N = N_\uparrow + N_\downarrow$ und $M = \frac{1}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow) = -S, -S+1, \dots, S-1, S$. Die Zustände $|SM\rangle$ für festes S und M bilden somit eine Darstellung von S_N zur Partition $[\frac{N}{2} + S, \frac{N}{2} - S]$, d.h. zum Young-Tableau

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow \\ \hline \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array} \dots \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array} \dots \begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \end{array} \quad (1.70)$$

wobei in der oberen Zeile $\frac{N}{2} + S$, und in der unteren Zeile $\frac{N}{2} - S$ Felder enthalten sind.

Als erstes Beispiel betrachten wir den bereits bekannten Fall von $N = 2$ Elektronen in welchem der Hilbertraum gemäss den irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$ und S_2 wie folgt aufgeteilt werden,

$$\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 2} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_0 = 3\mathcal{H}_{\square} \oplus \mathcal{H}_{\square} \quad (1.71)$$

Wir können diese Gleichung auch durch die Dimensionen der beteiligten Darstellungsräume ausdrücken $2^2 = 3 + 1 = 3 \cdot 1 + 1$. Konkret können wir eine Basis der irreduziblen Darstellungsräume bezüglich S_N durch Anwendung des irreduziblen Symmetrisierungsoperators I_λ auf Produktzustände erhalten, was der Symmetrisierung von Zeilen und Antisymmetrisierung von Spalten entspricht. S_2 besitzt nur die beiden eindimensionalen irreduzible Darstellungen, nämlich die symmetrische und die antisymmetrische Darstellung. Zunächst betrachten wir die zur Partition $\lambda = [2]$ gehörige vollständig symmetrische (eindimensionale) Darstellung, welche dreifach vorkommt:

$$\begin{array}{l} \boxed{\uparrow \uparrow} \quad M=1 \\ \boxed{\uparrow \downarrow} \quad M=0 \\ \boxed{\downarrow \downarrow} \quad M = -1 \end{array} \quad (1.72)$$

Als nächstes untersuchen wir die zur Partition $\lambda = [11]$, welche der (eindimensionalen) antisymmetrische Darstellung von S_2 entspricht:

$$\begin{array}{l} \boxed{\uparrow} \\ \boxed{\uparrow} \quad \text{keine Zustände} \\ \boxed{\uparrow} \\ \boxed{\downarrow} \quad M = 0 \\ \boxed{\downarrow} \\ \boxed{\downarrow} \quad \text{keine Zustände} \end{array} \quad (1.73)$$

Für $M = \pm 1$ ergeben sich aus der Antisymmetrisierung über die Spalten keine Zustände.

Als weiteres Beispiel betrachten wir den Fall von $N = 3$ Elektronen, in welchem der Hilbertraum gemäss den irreduziblen Darstellungen von $SO(3)$ und S_3 wie folgt aufgeteilt werden,

$$\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 3} = \mathcal{H}_{3/2} \oplus 2\mathcal{H}_{1/2} = 4\mathcal{H}_{\square} \oplus 2\mathcal{H}_{\square} \quad (1.74)$$

Wir können diese Gleichung auch durch die Dimensionen der beteiligten Darstellungsräume ausdrücken $2^3 = 4 + 2 \cdot 2 = 4 \cdot 1 + 2 \cdot 2$. Wiederum konstruieren wir eine Basis der irreduziblen Darstellungsräume bzegl. S_N durch Anwendung des irreduziblen Symmetrisierungsoperators I_λ auf Produktzustände erhalten. Es gibt drei irreduzible Darstellungen von S_3 , von

denen zwei für Spin $1/2$ vorkommen. Zunächst betrachten wir die zur Partition [3] gehörige vollständig symmetrische (eindimensionale Darstellung, welche vierfach vorkommt:

$$\begin{array}{l}
 \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array} & M = \frac{3}{2} \\
 \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \downarrow \\ \hline \end{array} & M = \frac{1}{2} \\
 \begin{array}{|c|c|c|} \hline \uparrow & \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array} & M = -\frac{1}{2} \\
 \begin{array}{|c|c|c|} \hline \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \hline \end{array} & M = -\frac{3}{2}
 \end{array} \tag{1.75}$$

Als nächstes untersuchen wir die zur Partition [21], welche einer zweidimensionalen Darstellung von S_3 mit gemischter Symmetrie entspricht:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow \\ \hline \uparrow & \\ \hline \end{array} \quad \text{keine Zustände}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow \\ \hline \downarrow & \\ \hline \end{array} \quad M = \frac{1}{2}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \uparrow & \downarrow \\ \hline \downarrow & \\ \hline \end{array} \quad M = -\frac{1}{2}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \downarrow & \downarrow \\ \hline \downarrow & \\ \hline \end{array} \quad \text{keine Zustände}$$

Die $M = \pm 3/2$ Zustände existieren in dieser Darstellung nicht,

das sie beim Antisymmetrisieren über die Zeilen verschwinden, z.B. $|\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\rangle = 0$. Aus demselben Grund gibt es keine antisymmetrischen Zustände (Partition [111]). Dies gilt allgemein für Spin $1/2$ Teilchen für $N > 2$.

Kapitel 2

Addition von Drehimpulsen

Klassisch addieren sich zwei Drehimpulse \vec{J}_1 und \vec{J}_2 vektoriell, $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$. Diese Beziehung gilt auch in der Quantenmechanik, aber die Situation ist insofern komplizierter, als es sich bei \vec{J}_1 , \vec{J}_2 und \vec{J} um Operatoren handelt. Die Anwendung dieser Betrachtung sind Systeme mit mehreren Elektronen im Zentralpotential, z. B. Atome. Wir betrachten als Erstes das einfachste Beispiel, zwei Spin 1/2, z.B. von zwei Elektronen.

2.1 Zwei Spin 1/2 Teilchen

Dieser Fall tritt zum Beispiel bei der Berechnung des Gesamtspins im Heliumatom auf. Die Spins werden durch Operatoren \vec{S}_1 und \vec{S}_2 , beschrieben, wobei

$$[\vec{S}_1, \vec{S}_2] = 0. \quad (2.1)$$

Für jeden Spin existieren zwei linear unabhängige Zustände $|s, m_s\rangle = |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$. Wir schreiben

$$|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle \quad \text{„spin up“}, \quad (2.2)$$

$$\text{und} \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle \quad \text{„spin down“}. \quad (2.3)$$

Für zwei Spins, \vec{S}_1 und \vec{S}_2 , gibt es *vier* linear unabhängige Zustände,

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle, \\ |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle, \\ |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle \equiv |\downarrow\uparrow\rangle, \\ |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle \equiv |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Diese vier Zustände bilden eine Basis des Spinraums der zwei Elektronen, welcher als Tensorprodukt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ der Spinräume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 der beiden Elektronen dargestellt werden

kann. Jetzt brauchen wir den Gesamtspin

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2. \quad (2.5)$$

Hierbei ist mit \vec{S}_1 der Produktoperator $\vec{S}_1 \otimes \mathbb{1}$ gemeint, welcher nur auf den ersten Faktor \mathcal{H}_1 des Produktraums wirkt, und analog für \vec{S}_2 . Aus den VR für \vec{S}_1 und \vec{S}_2 sowie (2.1) folgt, dass für den Gesamtspin (2.5)

$$[S_i, S_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} S_k$$

gilt. Somit hat \vec{S} bzw. S_z und S^2 wiederum Eigenzustände $|s, m_s\rangle$, diese müssen aber nicht mit den Produktzuständen (2.4) übereinstimmen. Wie erhalten wir nun die Zustände $|s, m_s\rangle$? Als Erstes bemerken wir, dass die Zustände (2.4) bereits Eigenzustände von $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ sind,

$$\begin{aligned} S_z |\uparrow\uparrow\rangle &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) |\uparrow\uparrow\rangle = 1 |\uparrow\uparrow\rangle, \\ S_z |\uparrow\downarrow\rangle &= \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) |\uparrow\downarrow\rangle = 0 |\uparrow\downarrow\rangle, \\ S_z |\downarrow\uparrow\rangle &= \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) |\downarrow\uparrow\rangle = 0 |\downarrow\uparrow\rangle, \\ S_z |\downarrow\downarrow\rangle &= \left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) |\downarrow\downarrow\rangle = -1 |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Offensichtlich sind die Eigenwerte von S_z also $+1$, 0 und -1 . Daraus können wir erraten, dass wir es mit einem Triplet ($m_z = -1, 0, +1$; $s = 1$) und einem Singulett ($m_z = 0$; $s = 0$) zu tun haben. Zum Beweis benützen wir die Beziehung

$$\begin{aligned} S^2 &= \vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \\ &= S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} \\ &\quad + \underbrace{S_{1x}S_{2x} - iS_{1x}S_{2y} + iS_{1y}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}}_{=(S_{1x}+iS_{1y})(S_{2x}-iS_{2y})} \\ &\quad + \underbrace{S_{1x}S_{2x} + iS_{1x}S_{2y} - iS_{1y}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}}_{=(S_{1x}-iS_{1y})(S_{2x}+iS_{2y})} \\ &= \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

wobei $S_{i\pm} = S_{ix} \pm iS_{iy}$. Wir haben verwendet, dass für Spin $1/2$ gilt, dass $S_i^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4}$. Nun wenden wir (2.7) auf $|\uparrow\uparrow\rangle$ an und erhalten

$$S^2 |\uparrow\uparrow\rangle = \left(2 \cdot \frac{3}{4} + 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + 0 + 0\right) |\uparrow\uparrow\rangle = 2 |\uparrow\uparrow\rangle = s(s+1) |\uparrow\uparrow\rangle.$$

Damit ist $s = 1$ und

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |s = 1, m_s = 1\rangle, \quad (2.8)$$

wobei $m_s = 1$ aus (2.6) folgt. Analog finden wir

$$|\downarrow\downarrow\rangle = |s = 1, m_s = -1\rangle. \quad (2.9)$$

Anwendung von $S_- = S_{1-} + S_{2-}$ auf $|\uparrow\uparrow\rangle$ führt zu $|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle$. Weil $[S_-, S^2] = 0$ folgt direkt, dass dies wieder ein Eigenzustand von S^2 zum selben Eigenwert $\hbar^2 s(s+1)$ mit $s = 1$ sein muss. Mit Normierung und mit (2.6) folgt

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = |s = 1, m_s = 0\rangle. \quad (2.10)$$

Der vierte orthonormale Zustand ist

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = |s = 0, m_s = 0\rangle, \quad (2.11)$$

was durch Anwendung des Operators S^2 überprüft werden kann. Man kann die Darstellung durch den Gesamtspin auch durch die entsprechenden Darstellungsräume, $\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 2} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1$ ausdrücken, oder verkürzt $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 0 \oplus 1$.

2.2 Allgemeiner Fall

Jetzt addieren wir zwei beliebige Drehimpulse \vec{J}_1 und \vec{J}_2 , wobei wieder $[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0$. Eine Basis des $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ -dimensionalen Hilbertraums des Gesamtdrehimpulses wird durch die Produktzustände

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle := |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (2.12)$$

gebildet. Es gilt

$$\begin{aligned} J_1^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle, \\ J_2^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle, \\ J_{1z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \hbar m_1 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle, \\ J_{2z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Der Gesamtdrehimpuls ist gegeben als

$$\vec{J} := \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (2.14)$$

und erfüllt die Drehimpuls-VR,

$$[J_i, J_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} J_k. \quad (2.15)$$

Wir suchen die Eigenzustände $|j, m\rangle$ von J^2 und J_z . Weil die vier Operatoren

$$J_1^2, \quad J_2^2, \quad J^2, \quad J_z$$

miteinander kommutieren, können wir diese gleichzeitig diagonalisieren und eine ONB

$$\{|j_1, j_2, j, m\rangle\}$$

konstruieren. Jedoch gilt

$$[J^2, J_{1z}] \neq 0 \quad \text{und} \quad [J^2, J_{2z}] \neq 0. \quad (2.16)$$

Somit können die J_{iz} ($i=1,2$) nicht gleichzeitig diagonalisiert werden.

Oft ist man vor das Problem gestellt, die neuen Basiszustände $|j_1, j_2, j, m\rangle$ durch die alten (2.12) auszudrücken, genauso wie die Zustände (2.8) bis (2.11) durch (2.6) ausgedrückt werden. Wir können formal schreiben:

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \underbrace{\sum_{j'_1, j'_2, m'_1, m'_2} |j'_1, j'_2, m'_1, m'_2\rangle \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle}_{=1}. \quad (2.17)$$

Die Zahlen $\langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle$ heißen Clebsch-Gordan-Koeffizienten (CGK). Falls $j_1 \neq j'_1$ oder $j_2 \neq j'_2$, dann sind $|j'_1, j'_2, m'_1, m'_2\rangle$ und $|j_1, j_2, j, m\rangle$ Eigenzustände von J_1^2 (bzw. J_2^2) zu verschiedenen Eigenwerten. Somit müssen die Zustände orthogonal sein; solche CGK sind deshalb Null. Explizit:

$$\begin{aligned} \hbar^2 j'_i(j'_i + 1) \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle &= \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | J_i^2 | j_1, j_2, j, m\rangle \\ &= \hbar^2 j_i(j_i + 1) \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Falls $j_1 \neq j'_1$ oder $j_2 \neq j'_2$ muss also $\langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle = 0$ gelten. Analog sind die CGK nur dann $\neq 0$, falls $m = m'_1 + m'_2$. Beweis:

$$\begin{aligned} \hbar m \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle &= \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | J_z | j_1, j_2, j, m\rangle \\ = \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | J_{1z} + J_{2z} | j_1, j_2, j, m\rangle &= \hbar(m'_1 + m'_2) \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, j, m\rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Die nicht-verschwindenden CGK haben somit die Form

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m_1 + m_2\rangle,$$

so dass sich (2.17) zu

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle \quad (2.20)$$

vereinfacht.

Welche j -Werte sind bei vorgegebenem j_1, j_2 möglich? Der größte Wert von $m = m_1 + m_2$ ist $j_1 + j_2$, so dass auch das größte vorkommende j diesen Wert haben muss. Der kleinstmögliche Wert¹ von j ist $|j_1 - j_2|$. Zur Kontrolle wird die Anzahl der Zustände berechnet, diese sollte wegen (2.12) $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ betragen. Zu jedem j gibt es $(2j + 1)$ Zustände,

$$\begin{aligned} \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) &= 2 \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} j + \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} 1 \\ &\stackrel{(*)}{=} 2 \cdot \frac{1}{2} \left((j_1+j_2)^2 - (j_1-j_2)^2 + |j_1-j_2| + j_1+j_2 \right) + ((j_1+j_2) - |j_1-j_2| + 1) \\ &= 4j_1j_2 + 2(j_1+j_2) + 1 = (2j_1+1)(2j_2+1). \end{aligned}$$

Beim Schritt (*) wurde $\sum_{i=n}^m i = \sum_{i=1}^m i - \sum_{i=1}^{n-1} i = \frac{1}{2} (m(m+1) - n(n-1))$ verwendet. Zusammengefasst gilt

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2, \quad (2.21)$$

wobei die erlaubten Werte von j gegeben sind als $j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$. Auch diese Tatsache kann man durch die Darstellungsräume ausdrücken,

$$\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \mathcal{H}_j. \quad (2.22)$$

Beispiel: Zwei Spin 1/2 (siehe oben):

$$j_1 = j_2 = \frac{1}{2}, \quad j_1 + j_2 = 1, \quad |j_1 - j_2| = 0.$$

Hier sind die CGK aus (2.8) bis (2.11) abzulesen:

$$\begin{aligned} \langle j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, m_1 = \pm \frac{1}{2}, m_2 = \pm \frac{1}{2} | j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, j = 1, m = \pm 1 \rangle &= 1, \\ \langle j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, m_1 = \mp \frac{1}{2}, m_2 = \pm \frac{1}{2} | j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, j = 1, m = 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \langle j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, m_1 = \pm \frac{1}{2}, m_2 = \mp \frac{1}{2} | j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}, j = 0, m = 0 \rangle &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Wir konnten in diesem Fall die CGK einfach berechnen, weil wir die Zustände $|j_1, j_2, j, m\rangle$ schon kannten. Aber wie kann man die CGK *allgemein* berechnen?

¹Kann man sich klassisch vorstellen: Spins parallel $\Rightarrow j_1 + j_2$, Spins antiparallel $\Rightarrow |j_1 - j_2|$.

2.3 Atome mit mehreren Elektronen

Wir können den Hamiltonoperator für ein Atom mit Z Elektronen nach Gl. (1.3) schreiben als

$$H = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + H_{\text{SO}} = H_C + V_1 + V_2, \quad (2.23)$$

wobei

$$H_C = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m} + V_C(r_i) \right) \quad (2.24)$$

den Ein-Elektron-Hamiltonoperator in der *Zentralfeldnäherung* darstellt. Hierbei ist $V_C(\vec{r})$ das elektrostatische Feld des Atomkerns plus das gemittelte Feld der $Z - 1$ anderen Elektronen. V_C kann z.B. mittels der sogenannten Thomas-Fermi Näherung berechnet werden; wir benützen hier aber nur, dass V_C rotationssymmetrisch ist. Die Differenz der Zentralfeldnäherung zur tatsächlichen Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird beschrieben durch

$$V_1 = \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} - \sum_{i=1}^Z V_C(r_i). \quad (2.25)$$

Die zweite Korrektur ist die Spin-Bahn Wechselwirkung (s. später),

$$V_2 = \sum_{i=1}^Z \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r_i} \frac{dV_C(r_i)}{dr} \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i, \quad (2.26)$$

wobei \vec{l}_i und \vec{s}_i der Bahndrehimpuls und Spin des i -ten Elektrons sind. H_C und V_1 sind rotationssymmetrisch und erhalten deshalb den Bahndrehimpuls \vec{l}_i bzw. $\vec{L} = \sum_{i=1}^Z \vec{l}_i$,

$$[H_C, \vec{l}_i] = [H_C, \vec{L}] = 0, \quad [V_1, \vec{L}] = 0. \quad (2.27)$$

Außerdem sind H_C und V_1 spin-unabhängig, und somit gilt dasselbe für den Spin \vec{s}_i und den Gesamtspin, $\vec{S} = \sum_{i=1}^Z \vec{s}_i$. Anders sieht es für den Term V_2 aus, der weder \vec{l}_i noch \vec{s}_i erhält, sondern nur den Gesamtdrehimpuls

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i \quad (2.28)$$

jedes Elektrons und somit auch den Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^Z \vec{j}_i = \vec{L} + \vec{S}, \quad (2.29)$$

d.h., $[V_2, \vec{j}_i] = [V_2, \vec{J}] = 0$. Die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses folgt aus:

$$\begin{aligned} j_i^2 &= (\vec{l}_i + \vec{s}_i)^2 = l_i^2 + s_i^2 + 2\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i, \\ [j_i^2, V_2] &\propto [j_i^2, \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i] = 0, \\ [j_z, V_2] &\propto [j_z, \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i] = \left[l_z + s_z, l_z s_z + \frac{1}{2}(l_+ s_- + l_- s_+) \right] = 0, \end{aligned}$$

wobei die letzte Beziehung analog auch für j_x und j_y gilt. Der Gesamtdrehimpuls eines Elektrons mit Spin $s = 1/2$ kann die Werte $j = |l - 1/2|, \dots, l + 1/2$ annehmen, d.h. im Fall $l = 0$ nur den Wert $j = 1/2$ und sonst $j = l - 1/2$ oder $j = l + 1/2$.

Die Terme V_1 und V_2 sind beide klein gegenüber H_C und können störungstheoretisch behandelt werden (dazu mehr in Kapitel 3). Das Spektrum von H_C ist in der Regel hoch entartet. Diese Entartung wird durch V_1 und V_2 teilweise aufgehoben. Wir müssen nun zwei Fälle unterscheiden:

- (i) $V_1 \gg V_2$: Dann betrachten wir zuerst nur V_1 . Weil $H_C + V_1$ den Bahndrehimpuls \vec{L} und Spin \vec{S} separat erhält, sind die Eigenzustände $(2L + 1)(2S + 1)$ -fach entartet. Danach betrachtet man V_2 als zusätzliche (noch kleinere) Störung, die die Entartung auf $(2J + 1)$ reduziert. Siehe Abbildung 2.1 für Kohlenstoff (C), wobei die Notation $^{2S+1}L_J$ verwendet und $L = S, P, D, F, \dots$ statt $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ geschrieben wird. Diese Situation wird auch als *Russel-Saunders-Kopplung* oder *LS-Kopplung* bezeichnet.

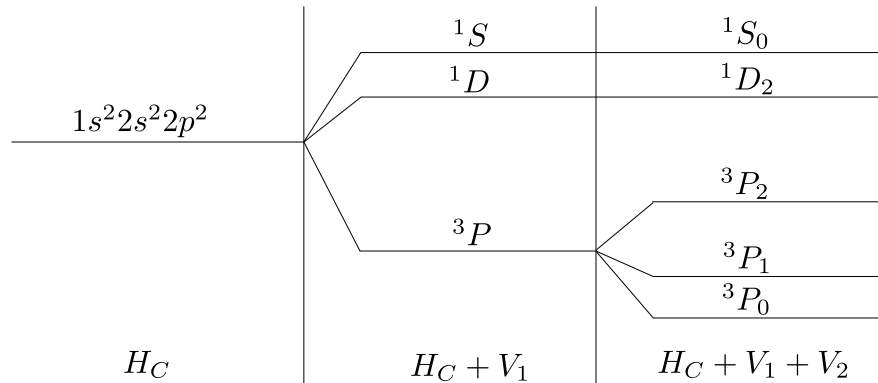


Abbildung 2.1: Termschema von Kohlenstoff ($Z = 6$). Die Korrekturen V_1 und V_2 heben die Entartung der Elektronen teilweise auf.

- (ii) $V_1 \ll V_2$: Hier wird in erster Näherung V_1 vernachlässigt und nur $H_C + V_2$ betrachtet. Damit werden die \vec{j}_i zu Erhaltungsgrößen. Jedes Niveau mit $l \neq 0$ spaltet in zwei Niveaus mit $j = l \pm 1/2$ auf. Erst danach wird V_1 als kleinere Störung berücksichtigt, um diese Niveaus noch weiter aufzuspalten. Diese Konstruktion heißt *jj-Kopplung*.

Da $V_1 \propto \sqrt{Z}$ und $V_2 \propto Z^2$, wendet man für leichtere Atome die *LS-Kopplung* und für schwerere Atome die *jj-Kopplung* an. Die Grenze liegt etwa bei Blei ($Z = 82$).

2.4 Herleitung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten*

Die Definition (2.17) der CGK,

$$|j_1, j_2, j, m\rangle := \underbrace{\sum_{j'_1, j'_2, m'_1, m'_2} |j'_1, j'_2, m'_1, m'_2\rangle \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2|}_{=1} |j_1, j_2, j, m\rangle$$

vereinfacht sich wegen

- $j_i \stackrel{!}{=} j'_i$ ($i = 1, 2$), siehe (2.18) und
- $m \stackrel{!}{=} m'_1 + m'_2$, siehe (2.19)

zu (2.20),

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2|j_1, j_2, j, m\rangle. \quad (2.30)$$

Das Skalarprodukt mit $\langle j_1, j_2, j, m|$ liefert außerdem

$$1 = \langle j_1, j_2, j, m|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} |\langle j_1, j_2, m_1, m_2|j_1, j_2, j, m\rangle|^2. \quad (2.31)$$

Wegen $J_{\pm} = J_{1\pm} + J_{2\pm} = (J_{\mp})^{\dagger}$ folgt die Rekursionsformel

$$\begin{aligned} & \langle j_1, j_2, m_1, m_2|J_{\pm}|j_1, j_2, j, m\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2|j_1, j_2, j, m \pm 1\rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1, j_2, m_1 \mp 1, m_2|j_1, j_2, j, m\rangle \\ & \quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 \mp 1|j_1, j_2, j, m\rangle. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Diese Gleichung, zusammen mit (2.31), erlaubt es uns, die CGK *rekursiv* zu bestimmen: Halte j_1, j_2 und j fest. Die möglichen (m_1, m_2) sind in Abbildung 2.2 gezeigt. Die Relation (2.32) mit dem oberen Vorzeichen erlaubt es uns, in einem Dreieck mit zwei bekannten CGK den dritten zu bestimmen, wie in Abbildung 2.3 gezeigt. Aus (2.32) mit dem unteren Vorzeichen erhalten wir dasselbe für das untere Dreieck. Das Vorgehen zur rekursiven Herleitung der CGK ist nun folgendes: Man beginnt bei $m = m_1 + m_2 = j$ mit $m_1 = j_1$ und $m_2 = j - j_1$ („Start“ in Abb. 2.2). Dann wendet man (2.32) mit dem unteren Vorzeichen an, um entlang der Kante $j_1 = m_1$ alle Koeffizienten zu bestimmen. Man nützt dabei aus, dass $m_1 = j_1 + 1$ kein erlaubter Wert von m_1 ist und deshalb (2.32) nur zwei Terme hat.

Um den Wert von $\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1|j_1, j_2, j, j\rangle$ zu bestimmen, wählt man die bisher beliebige Phase von $|j_1, j_2, j, j\rangle$ so, dass dieser CGK einen reellen, positiven Wert hat. Durch die Rekursionsrelation (2.32) werden dann alle CGK reell. Somit gilt

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2|j_1, j_2, j, m\rangle = \langle j_1, j_2, j, m|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle.$$

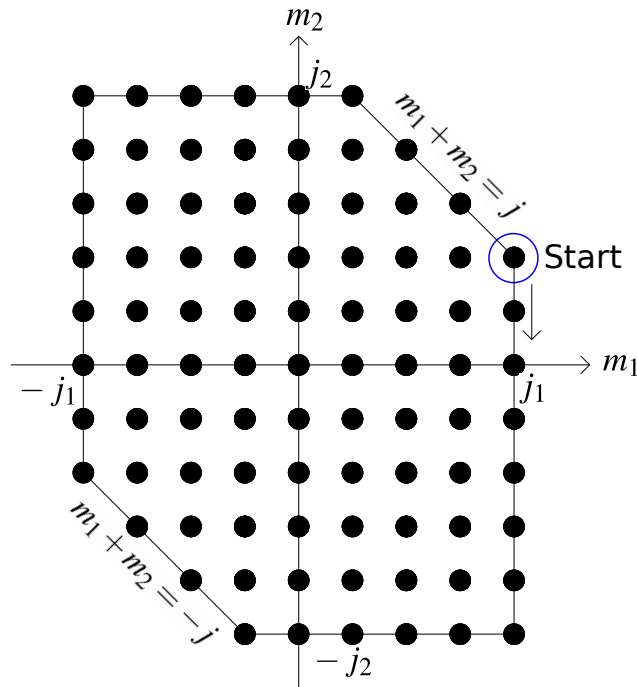


Abbildung 2.2: Rekursive Herleitung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten am Beispiel $j_1 = 4$, $j_2 = 5$, $j = 6$.

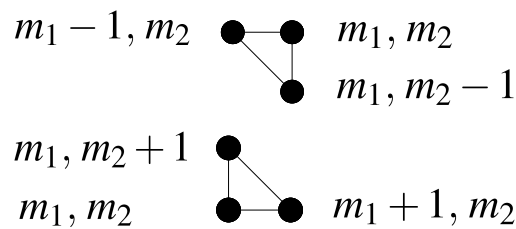


Abbildung 2.3: Aus der Gleichung (2.32) abgeleitete Rekursionsschritte, wobei die obere (untere) Figur für das obere (untere) Vorzeichen steht.

Den Betrag von $\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1 | j_1, j_2, j, j \rangle$ bestimmt man schließlich über die Gleichung (2.31). Mit der Relation (2.32) kann man fortlaufend alle CGK bestimmen. Dies ist ziemlich mühsam, deshalb sind die CGK auch in Büchern tabelliert, wo man sie einfach nachschlagen kann².

²Oder z.B. auf http://en.wikipedia.org/wiki/Table_of_Clebsch-Gordan_coefficients.

2.5 Spin und Bahndrehimpuls des Elektrons*

Hier ist $j_1 = l = 0, 1, 2, \dots$ und $j_2 = s = 1/2$. Der Gesamtdrehimpuls ist

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (2.33)$$

mit $[\vec{L}, \vec{S}] = 0$. Die möglichen j sind laut (2.21)

$$\left| l - \frac{1}{2} \right| \leq j \leq \left| l + \frac{1}{2} \right|, \quad (2.34)$$

wobei j halbzahlig ist. Im Spezialfall $l = 0$ ist $j = s = 1/2$ und ausschliesslich die CGK

$$\langle j_1 = 0, j_2 = \frac{1}{2}, m_1 = 0, m_2 = m = \pm \frac{1}{2} | j_1 = 0, j_2 = \frac{1}{2}, j = \frac{1}{2}, m = \pm \frac{1}{2} \rangle$$

sind verschieden von Null. Für $l \neq 0$ ist $j = l \pm 1/2$. Die CGK findet man wie folgt: Es gibt nur einen Zustand mit $m = l + 1/2$ („Start“ in Abbildung 2.4),

$$|j_1 = l, j_2 = \frac{1}{2}, m_1 = l, m_2 = \frac{1}{2}\rangle = |j_1 = l, j_2 = \frac{1}{2}, j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2}\rangle. \quad (2.35)$$

Deshalb ist der entsprechende CGK

$$\langle j_1 = l, j_2 = \frac{1}{2}, m_1 = l, m_2 = \frac{1}{2} | j_1 = l, j_2 = \frac{1}{2}, j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2} \rangle = 1.$$

Aus (2.32) mit dem unteren Vorzeichen und der Ersetzung $m \rightarrow m + 1$ finden wir dann ($j = l + 1/2, m = m_1 + m_2 = m_1 + 1/2$),

$$\begin{aligned} & \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l + \frac{3}{2}\right) - m(m+1)} \langle l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m \rangle \\ &= \sqrt{l(l+1) - \left(m - \frac{1}{2}\right) \left(m + \frac{1}{2}\right)} \langle l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m + 1 \rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Somit erhalten wir die Rekursionsformel

$$\begin{aligned} & \langle l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m \rangle \\ &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}} \langle l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}, m + 1 \rangle, \end{aligned} \quad (2.37)$$

wobei man den Vorfaktor durch „Ausklammern“ von $l - m + 1/2$ im Zähler und Nenner (unter der Wurzel) erhält. Indem man (2.37) iteriert, findet man:

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

Beweis: Vollständige Induktion mit (2.37) und (2.35).

Analog für $m_2 = -1/2$. Allgemein:

$$\langle l, \frac{1}{2}, m_1 = m \mp \frac{1}{2}, m_2 = \pm \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, j = l + \frac{1}{2}, m \rangle = \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \quad (2.38)$$

$$\langle l, \frac{1}{2}, m_1 = m \mp \frac{1}{2}, m_2 = \pm \frac{1}{2} | l, \frac{1}{2}, j = l - \frac{1}{2}, m \rangle = \mp \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}. \quad (2.39)$$

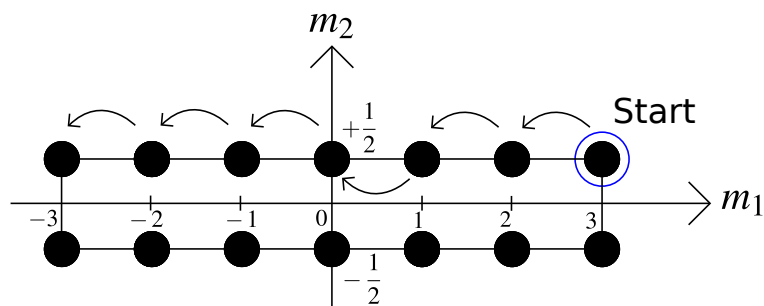


Abbildung 2.4: Berechnung der CGK eines Elektrons mit Spin und Bahndrehimpuls

Kapitel 3

Näherungsmethoden

In der Quantenmechanik geht es sehr oft darum, die Schrödinger-Gleichung (SG)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(t)\psi(t) \quad (3.1)$$

zu lösen (vgl. auch Kapitel 1). Im nicht-relativistischen Fall ist der Hamiltonoperator für ein einzelnes Teilchen im Potential $V(\vec{r}, t)$ gegeben als

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t). \quad (3.2)$$

Im Fall eines zeitunabhängigen Hamiltonoperators $H(t) = H$ ergibt sich die *zeitunabhängige SG*, das Eigenwertproblem

$$H\phi = E\phi, \quad (3.3)$$

wobei $\psi(\vec{r}, t) = \exp(-iEt/\hbar)\phi(\vec{r})$. Für einige Potentiale (H-Atom, harmonischer Oszillator, Potentialmulden) lässt sich (3.3) *exakt* lösen. In den allermeisten Fällen hingegen ist eine exakte Lösung nicht möglich. Dies gilt bereits bei Einteilchenproblemen, und erst recht bei Vielteilchenproblemen. Dann kann man eine *Näherung* an die exakte Lösung machen. Diese ist umso besser, je kleiner der Fehler in der Näherungslösung für $\psi(\vec{r}, t)$ bzw. E ist. Es gibt verschiedene Näherungsverfahren, die je nach Problem besser oder schlechter geeignet sind. Das am häufigsten verwendete Näherungsverfahren ist die *Störungstheorie*. Diese kann angewendet werden, wenn das Problem die Form

$$H = H_0 + H' \quad (3.4)$$

hat, wobei für H_0 eine exakte Lösung bekannt bzw. exakt berechenbar ist und H' eine im Vergleich zu H_0 *kleine Störung* darstellt.

3.1 Zeitunabhängige (stationäre) Störungstheorie

Wir wollen die zeitunabhängige SG (3.3) mit (3.4) approximativ (näherungsweise) lösen. Dazu schreiben wir (3.4) um als

$$H = H_0 + \lambda H' \quad (3.5)$$

mit dem Entwicklungsparameter λ . Später werden wir wieder $\lambda = 1$ setzen. Wir entwickeln nun die Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ und Eigenenergien E_n von H in Potenzen von λ ,

$$|\phi_n\rangle = |n\rangle + \lambda|\phi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\phi_n^{(2)}\rangle + \dots, \quad (3.6)$$

$$E_n = \epsilon_n + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots, \quad (3.7)$$

wobei

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (3.8)$$

und

$$H_0|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle. \quad (3.9)$$

Man findet für nicht-entartete $|n\rangle$,

$$E_n^{(1)} = \langle n|H'|n\rangle, \quad (3.10)$$

$$|\phi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m|H'|n\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |m\rangle, \quad (3.11)$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|H'|n\rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m}. \quad (3.12)$$

Beispiel: Beim H-Atom im (konstanten) elektrischen Feld kann man den Stark-Effekt auf diese Weise behandeln.

3.2 Zeitabhängige Störungstheorie

Bisher haben wir den Fall einer zeitunabhängigen Störung H' betrachtet. Stellen wir uns aber vor, dass die Störung zeitabhängig ist, $H'(t)$, dann müssen wir die zeitabhängige SG (3.1) störungstheoretisch lösen:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t) = (H_0 + H'(t)) \psi(t). \quad (3.13)$$

Beispiel: H_0 beschreibt ein Atom und $H'(t)$ das oszillierende elektrische Feld eines Lichtstrahls, mit dem wir das Atom beleuchten. Wir möchten wissen, welche *Übergänge* durch die Einstrahlung des Lichts hervorgerufen werden.

Wir nehmen an, die Störung werde zur Zeit $t = 0$ eingeschaltet, d.h.

$$H'(t) = 0, \quad \text{für } t < 0. \quad (3.14)$$

Das System soll sich beim Einschalten der Störung ($t = 0$) im Anfangszustand $|\psi(t = 0)\rangle = |\psi_0\rangle$ befinden. Dies kann z.B. ein Eigenzustand von H_0 sein, $|\psi_0\rangle = |n\rangle$ mit $H_0|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle$, wenn dieser zu einer Zeit $t \leq 0$ präpariert wurde. Der Zustand $|\psi(t)\rangle$ nach dem Einschalten der Störung ($t > 0$) wird sich aufgrund von $H_0 + H'(t)$ ändern. Wir können die (bekannte) Zeitentwicklung durch H_0 abseparieren, indem wir ins *Wechselwirkungsbild* übergehen,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-itH_0/\hbar}|\psi_I(t)\rangle. \quad (3.15)$$

Einsetzen in die SG (3.13) ergibt

$$i\hbar \left(\frac{-iH_0}{\hbar} e^{-itH_0/\hbar} |\psi_I(t)\rangle + e^{-itH_0/\hbar} \frac{\partial |\psi_I(t)\rangle}{\partial t} \right) = (H_0 + H'(t)) e^{-itH_0/\hbar} |\psi_I(t)\rangle.$$

Die ersten Terme auf beiden Seiten heben sich weg, nach Multiplikation von links mit $e^{itH_0/\hbar}$ bleibt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = H'_I(t) |\psi_I(t)\rangle, \quad (3.16)$$

d.h. $|\psi_I(t)\rangle$ erfüllt die SG mit dem Hamilton-Operator im Wechselwirkungsbild, nämlich

$$H'_I(t) = e^{itH_0/\hbar} H'(t) e^{-itH_0/\hbar}. \quad (3.17)$$

Man beachte, dass die Anfangsbedingung bei $t = 0$ gemäß (3.15) gegeben ist als

$$|\psi_I(0)\rangle = |\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle. \quad (3.18)$$

Wir können nun (3.16) beiderseits von $t = 0$ bis t integrieren:

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H'_I(t') |\psi_I(t')\rangle. \quad (3.19)$$

Diese Gleichung enthält allerdings die gesuchte Lösung $|\psi_I(t)\rangle$ auf beiden Seiten und ist eine Integro-Differentialgleichung—solche Gleichungen sind meist schwierig zu lösen. Wir können aber ausnützen, dass H' und damit H'_I eine *kleine* Störung ist. Durch Einsetzen von (3.19) in die rechte Seite von (3.19) selbst erhalten wir

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H'_I(t') |\psi_0\rangle + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' H'_I(t') \int_0^{t'} dt'' H'_I(t'') |\psi_I(t'')\rangle. \quad (3.20)$$

Diese Ersetzung kann beliebig fortgesetzt werden. Wir erhalten in jedem weiteren Term eine höhere Potenz von $H'_I(t)$, so dass jeder weitere Term *kleiner* sein sollte als der vorherige. In tiefster Ordnung der Störungstheorie erhalten wir:

$$|\psi_I(t)\rangle \approx |\psi_0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' H'_I(t') |\psi_0\rangle. \quad (3.21)$$

Bemerkung: Wenn wir die Reihe (3.20) durch Einsetzen unendlich fortsetzen, erhalten wir den Ausdruck

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \underbrace{H'_I(t_1)H'_I(t_2)\cdots H'_I(t_n)}_{\text{zeitgeordnetes Produkt}} |\psi_0\rangle \\ &=: T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H'_I(t')} |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Weil die Operatoren $H'_I(t)$ im Produkt nach der Zeit geordnet sind, nennt man diesen Ausdruck *zeitgeordnete Exponentialfunktion*, mit dem Zeitordnungsoperator T . Dieser ist allerdings kein richtiger Operator auf dem Hilbertraum, sondern nur ein Symbol für die unendliche Summe in (3.22). Der Ausdruck (3.22) ist formal die exakte Lösung des Problems. Falls $[H'_I(t), H'_I(t')] = 0$ für beliebige t, t' (z.B. wenn H'_I zeitunabhängig ist), ist T überflüssig. Aus (3.22) ergibt sich dann

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H'_I(t')} |\psi_0\rangle,$$

was die Bezeichnung „Exponentialfunktion“ für den allgemeinen Ausdruck (3.22) rechtfertigt.

3.2.1 Übergangswahrscheinlichkeiten

Im Fall, wo wir bei $t < 0$ den Eigenzustand $|\psi_0\rangle = |i\rangle$ von H_0 präpariert haben, können wir fragen, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, zur Zeit $t > 0$ das System im Eigenzustand $|f\rangle \neq |i\rangle$ zu finden (Übergang):

$$\begin{aligned} p_{i \rightarrow f} &= |\langle f | \psi(t) \rangle|^2 \stackrel{(3.15)}{=} |\langle f | e^{-itH_0/\hbar} |\psi_I(t)\rangle|^2 = |e^{-it\epsilon_f/\hbar} \langle f | \psi_I(t) \rangle|^2 \\ &\stackrel{(3.21)}{\approx} \left| \langle f | i \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle f | H'_I(t') | i \rangle \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \langle f | e^{iH_0 t'/\hbar} H'(t') e^{-iH_0 t'/\hbar} | i \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{it'(\epsilon_f - \epsilon_i)/\hbar} \langle f | H'(t') | i \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Falls die Störung nach dem Anschalten bei $t = 0$ konstant bleibt,

$$H'(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0, \\ H' = \text{const.} & \text{für } t \geq 0, \end{cases} \quad (3.24)$$

kann $\langle f | H' | i \rangle$ als Konstante vor das Integral gezogen werden,

$$\begin{aligned} p_{i \rightarrow f} &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{it'(\epsilon_f - \epsilon_i)/\hbar} \right|^2 |\langle f | H' | i \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{e^{it'(\epsilon_f - \epsilon_i)/\hbar}}{i(\epsilon_f - \epsilon_i)/\hbar} \Big|_0^t \right|^2 |\langle f | H' | i \rangle|^2 \\ &\stackrel{(*)}{=} \left(\frac{\sin(t(\epsilon_f - \epsilon_i)/2\hbar)}{(\epsilon_f - \epsilon_i)/2} \right)^2 |\langle f | H' | i \rangle|^2, \end{aligned} \quad (3.25)$$

siehe Abbildung 3.1. Den Schritt (*) sieht man mit

$$\left| \frac{e^{it(\epsilon_f - \epsilon_i)/\hbar} - 1}{i(\epsilon_f - \epsilon_i)/\hbar} \right|^2 = \hbar^2 \left| \frac{e^{it(\epsilon_f - \epsilon_i)/2\hbar} (e^{it(\epsilon_f - \epsilon_i)/2\hbar} - e^{-it(\epsilon_f - \epsilon_i)/2\hbar})}{\epsilon_f - \epsilon_i} \right|^2$$

ein.

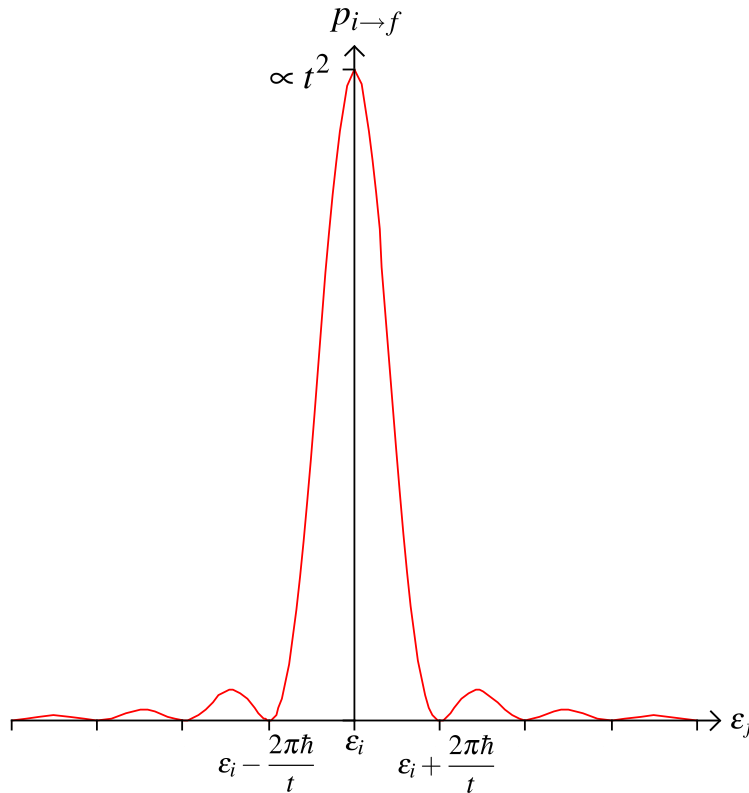


Abbildung 3.1: Plot der Übergangswahrscheinlichkeit $p_{i \rightarrow f}$ für $H'(t) = \text{const.}$, vgl. (3.25)

Wir unterscheiden diskrete und kontinuierliche Endzustände:

(i) Diskreter Endzustand $|f\rangle$: Für $\epsilon_f \neq \epsilon_i$ gilt

- Solange $t < \frac{2\pi\hbar}{|\epsilon_f - \epsilon_i|}$, wächst $p_{i \rightarrow f}$ wie $\propto t^2$.
- Allerdings kann die Wahrscheinlichkeit $p_{i \rightarrow f}$ den Wert 1 nicht überschreiten. Falls dies in unserer Rechnung geschieht, wird das durch Terme höherer Ordnung in der Störungsreihe kompensiert.
- Für $t > \frac{2\pi\hbar}{|\epsilon_i - \epsilon_f|}$ beginnt $p_{i \rightarrow f}$ zu oszillieren und abzuklingen.

Falls $\epsilon_f = \epsilon_i$, ist $p_{i \rightarrow f} \propto t^2$ (aber 1. Ordnung Störungsrechnung bricht zusammen, wenn $p_{i \rightarrow f} \gtrsim 1$).

- (ii) Wenn der Endzustand in einem kontinuierlichen Spektrum liegt, d.h. wenn für die Energieabstände der Endzustände $\delta\epsilon_f \ll \frac{2\pi\hbar}{t}$ gilt, können wir die Übergangswahrscheinlichkeit in ein kleines Intervall $\Delta\epsilon_f$ um ϵ_i herum berechnen (siehe Abbildung 3.2):

$$p_{i \rightarrow f} = \sum_{\epsilon_f: |\epsilon_i - \epsilon_f| < \Delta\epsilon_f} \left(\frac{\sin(t(\epsilon_f - \epsilon_i)/2\hbar)}{(\epsilon_f - \epsilon_i)/2} \right)^2 |\langle f | H' | i \rangle|^2. \quad (3.26)$$

Für ein Kontinuum von Endzuständen können wir zudem die *Zustandsdichte* $\rho(\epsilon)$

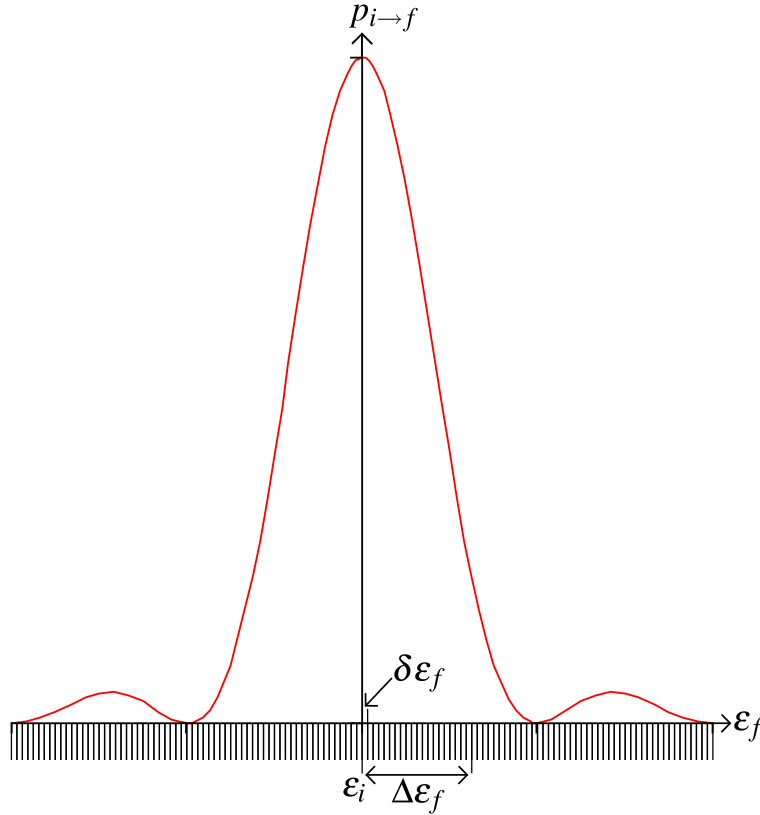


Abbildung 3.2: $\delta\epsilon_f$ und $\Delta\epsilon_f$ beim kontinuierlichen Spektrum

einführen,

$$\sum_{\epsilon} F(\epsilon) \approx \int d\epsilon \rho(\epsilon) F(\epsilon), \quad (3.27)$$

wobei F irgendeine von ϵ abhängige Funktion sei, die auf der Energieskala $\delta\epsilon_f$ ausreichend glatt ist. Damit wird (3.26) zu

$$p_{i \rightarrow f} = \int_{\epsilon_i - \Delta\epsilon_f}^{\epsilon_i + \Delta\epsilon_f} d\epsilon \rho(\epsilon) \left(\frac{\sin(t(\epsilon - \epsilon_i)/2\hbar)}{(\epsilon - \epsilon_i)/2} \right)^2 |\langle f | H' | i \rangle|^2, \quad (3.28)$$

wobei wir $\Delta\epsilon_f$ so klein wählen, dass $|\langle f|H'|i\rangle|^2$ im Integrationsbereich näherungsweise konstant ist und somit vor das Integral gezogen werden kann. Für große t hat der Term

$$\left(\frac{\sin(t(\epsilon - \epsilon_i)/2\hbar)}{(\epsilon - \epsilon_i)/2} \right)^2$$

bei $\epsilon = \epsilon_i$ ein immer höheres und schmaleres Maximum, wie die δ -Distribution. Die Fläche unter dem „Buckel“ ist

$$\frac{2\pi\hbar t^2}{t \hbar^2} = \frac{2\pi t}{\hbar},$$

siehe Abbildung 3.3. Für Funktionen $F(\epsilon)$, die bei $\epsilon = \epsilon_i$ ausreichend glatt sind, gilt

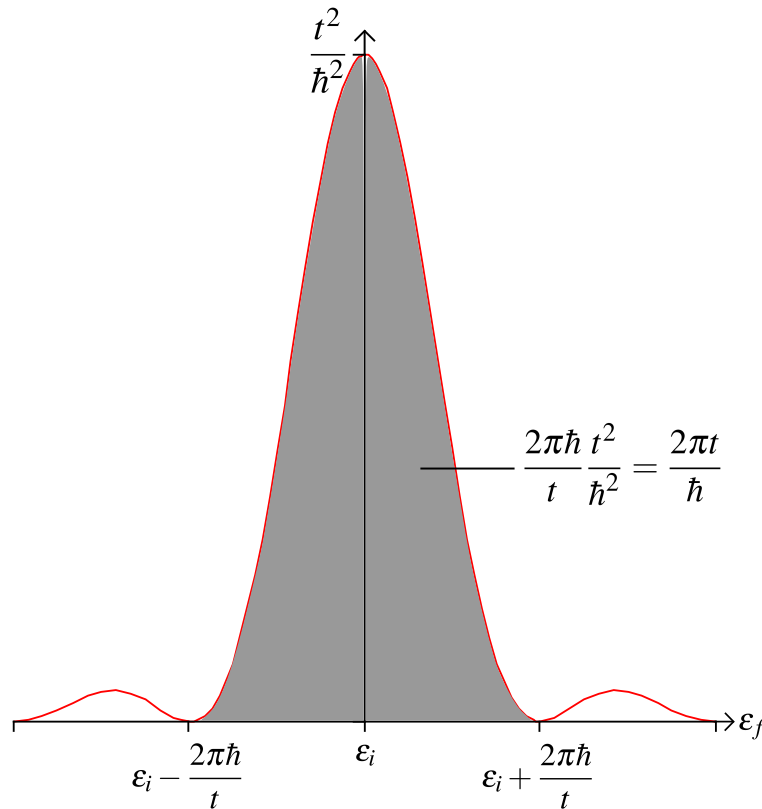


Abbildung 3.3: Für große t nimmt die Übergangswahrscheinlichkeit mehr und mehr die Form einer δ -Distribution an. Die Fläche unter dem Buckel ist jedoch nicht 1 sondern $2\pi t/\hbar$.

deshalb, für hinreichend große t ,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \underbrace{F(\epsilon)}_{\text{glatte Funktion}} \underbrace{\left(\frac{\sin(t(\epsilon - \epsilon_i)/2\hbar)}{(\epsilon - \epsilon_i)/2} \right)^2}_{\rightarrow \delta(\epsilon - \epsilon_i)} \approx F(\epsilon_i) \frac{2\pi t}{\hbar}. \quad (3.29)$$

Dies ist die Definition der δ -Distribution,

$$\left(\frac{\sin(t(\epsilon - \epsilon_i)/2\hbar)}{(\epsilon - \epsilon_i)/2} \right)^2 \approx \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(\epsilon - \epsilon_i) \quad \text{für große } t. \quad (3.30)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten (3.28) sind dann

$$p_{i \rightarrow f} = \begin{cases} \frac{2\pi t}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \rho(\epsilon_i), & \text{falls } |\epsilon_i - \epsilon_f| < \Delta\epsilon_f \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.31)$$

3.2.2 Fermis Goldene Regel

Für die *Übergangsrate*

$$\Gamma := \frac{dp_{i \rightarrow f}}{dt} \quad (3.32)$$

erhalten wir im Falle kontinuierlicher Endzustände aus (3.31),

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \rho(\epsilon_i). \quad (3.33)$$

Diese Gleichung ist bekannt unter dem Namen *Fermis Goldene Regel* (nach Enrico Fermi, 1901-1954). Der Gültigkeitsbereich von Fermis Goldener Regel wird durch folgende Forderungen eingeschränkt:

$$\frac{2\pi\hbar}{\Delta\epsilon_f} < t \ll \frac{2\pi\hbar}{\delta\epsilon_f}, \quad (3.34)$$

wobei die zweite Ungleichung bedeutet, dass die *Kontinuumsnäherung* erfüllt sein muss, und die erste Ungleichung, dass das Intervall $\Delta\epsilon_f$ den gesamten „Buckel“ enthalten muss. (In Abbildung 3.2 liegt das erste Minimum dann *innerhalb* des Intervalls $\Delta\epsilon_f$. Für hinreichend große t ist dies immer der Fall.) Hier hängt Γ nicht mehr vom Intervall $\Delta\epsilon_f$ ab.

Bemerkung: Manchmal schreibt man (3.33) auch mit der δ -Distribution,

$$\Gamma(\epsilon_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H' | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_f). \quad (3.35)$$

3.3 Variationsmethoden

Es gibt auch nicht-störungstheoretische Näherungsmethoden. Als Beispiel dazu besprechen wir hier kurz das *Variationsprinzip* von *Rayleigh-Ritz*. Wir betrachten die Lösungen $\{|\psi_n\rangle\}$ der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

mit $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq E_3 \dots$. Die Energie des Grundzustands ist E_0 . Falls $E_0 = E_1 = E_2 = \dots = E_k < E_{k+1}$, ist dieser k -fach entartet. Die $\{|\psi_n\rangle\}$ bilden eine Orthonormalbasis, in der der Hamiltonoperator H diagonal ist, in der Spektraldarstellung,

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|. \quad (3.36)$$

Der Energieerwartungswert eines beliebigen Zustandes $|\psi\rangle$ ist dann

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \stackrel{(3.36)}{=} \sum_n E_n \langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle \geq E_0 \langle \psi | \underbrace{\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|}_{=1} \psi \rangle = E_0 \langle \psi | \psi \rangle.$$

Somit gilt für beliebige $|\psi\rangle$

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0. \quad (3.37)$$

Sucht man den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ und dessen Energie E_0 , dann kann das folgende Variationsprinzip angewendet werden: Wähle eine „Versuchs-“ Wellenfunktion $|\psi_\alpha\rangle$, die von einem Parameter α (oder mehreren Parametern) abhängt. Dann gilt (3.37) für alle $|\psi_\alpha\rangle$ und man kommt dem Grundzustand am nächsten mit dem α , das die linke Seite von (3.37) minimiert:

$$\frac{d}{d\alpha} \frac{\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} = 0. \quad (3.38)$$

Beispiel: Der harmonische Oszillator mit

$$H = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 x^2.$$

Hier bekommt man mit dem Ansatz

$$\psi_\alpha(x) = ce^{-\alpha x^2}$$

sogar die exakte Lösung des Grundzustands:

$$\frac{\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle} = \frac{\alpha}{4m} + \frac{m\omega^2}{4\alpha}$$

ist minimal für $\alpha = m\omega$. ✓

3.4 Streutheorie

Eine spezielle Klasse von Problemen, die man näherungsweise lösen kann, sind die Streuprobleme: Ein Teilchen bewegt sich auf ein Hindernis zu (anderes Teilchen, Verunreinigung im

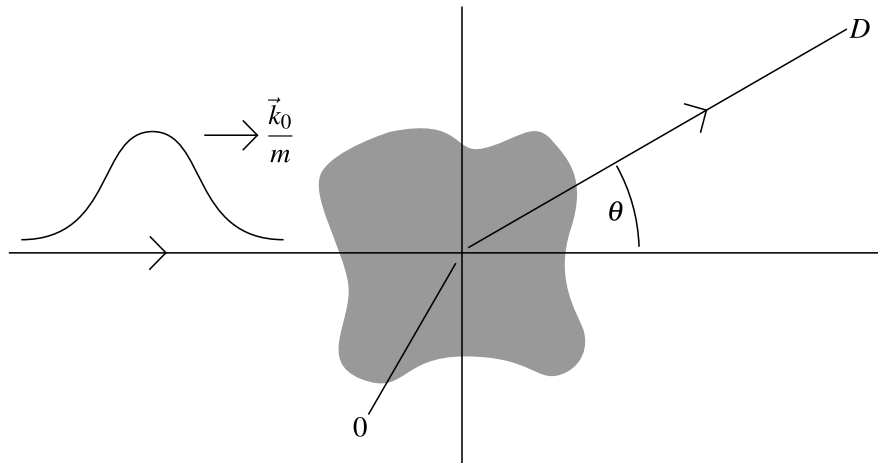


Abbildung 3.4: Streuung eines Teilchens mit Wellenzahl \vec{k}_0 , Masse m und Geschwindigkeit \vec{k}_0/m an einem Hindernis (grauer Bereich um den Ursprung 0) mit anschließender Detektion (D) beim Streuwinkel θ .

Festkörper, Potentialbarriere) und wird von diesem abgelenkt bzw. gestreut, Abbildung 3.4. Wir beschreiben das Hindernis durch ein kurzreichweitiges Potential $V(\vec{r})$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}). \quad (3.39)$$

Zur Zeit t_0 befinde sich das Teilchen weit weg vom Streuzentrum, wo $V(\vec{r}) \approx 0$. Wir beschreiben dessen Zustand durch ein Wellenpaket

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{\vec{k}}, \quad (3.40)$$

wobei die ebene Welle $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ Eigenzustand von $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ ist. Wenn das Wellenpaket um \vec{k}_0 kon-

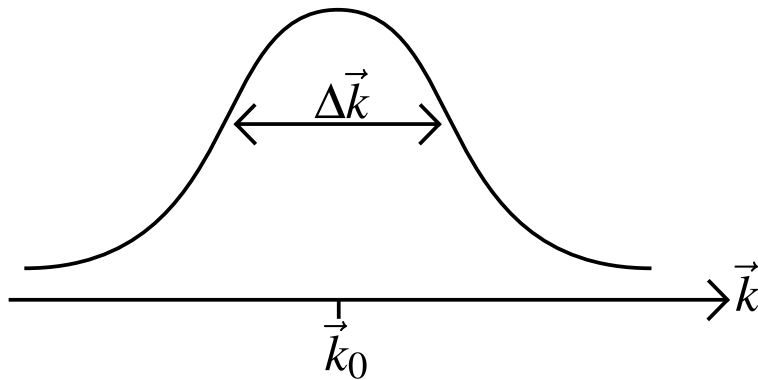


Abbildung 3.5: Das Wellenpaket sei um \vec{k}_0 herum konzentriert, so dass seine Geschwindigkeit \vec{k}_0/m ist.

zentriert ist, bewegt sich das Teilchen mit der Geschwindigkeit \vec{k}_0/m auf das Streuobjekt zu, wie in Abbildung 3.5 gezeigt. Bemerkungen:

- Die Breite des Wellenpakets $|\Delta\vec{k}|$ im Impulsraum darf nicht zu klein sein, sonst kommt es schon bei t_0 zum Überlapp mit dem Streuer ($\Delta k = 2\pi/\Delta x$ klein $\Rightarrow \Delta x$ groß).
- $|\Delta\vec{k}|$ darf aber auch nicht zu groß sein, da das Wellenpaket sonst zu stark „zerfließt“ ($\Delta p = \hbar\Delta k$ groß \Rightarrow sehr unscharfer Impuls).

Wir betrachten die Eigenzustände von (3.39), die weit entfernt vom Streuobjekt wegen $V \approx 0$ die Form von ebenen Wellen $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ haben und die wir deshalb mit $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ bezeichnen. Wir schreiben die Schrödinger-Gleichung mit (3.39) und $E_k = \hbar^2 k^2/2m$ als

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_k\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (3.41)$$

Man kann das Wellenpaket (3.40) bei t_0 auch in $\psi_{\vec{k}}$ entwickeln:

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) A_{\vec{k}}. \quad (3.42)$$

Bemerkungen:

1. Nur Zustände mit $E > 0$ kommen in der Entwicklung vor. Die Zustände mit $E < 0$ sind gebundene Zustände, die keinen Überlapp mit $\psi(\vec{r}, t_0)$ haben.
2. Später wird gezeigt, dass für die Entwicklungskoeffizienten $A_{\vec{k}} = a_{\vec{k}}$ gilt.

Den Zustand zu beliebigen späteren Zeiten erhält man als Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (3.1),

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) A_{\vec{k}} e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar}. \quad (3.43)$$

Beweis: Einsetzen in (3.1) und $t = t_0$ überprüfen.

Wenn wir also $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ finden, haben wir das Problem gelöst. Um (3.41) zu lösen, ersetzen wir fürs erste die rechte Seite durch eine Diracsche δ -Distribution, $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})V(\vec{r}) \rightarrow \delta(\vec{r})$, so dass

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_{\vec{k}}\right)G_k(\vec{r}) = \delta(\vec{r}). \quad (3.44)$$

Die Lösung $G_k(\vec{r})$ nennt man *Green-Funktion* für die (Einteilchen-)Schrödinger-Gleichung. Die Green-Funktion ist sehr nützlich, weil man daraus Lösungen der Schrödinger-Gleichung (3.41) für beliebige Streupotentiale $V(\vec{r})$ konstruieren kann:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r' G_k(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}'). \quad (3.45)$$

Der erste Term auf der rechten Seite löst die homogene Differentialgleichung (rechte Seite = 0 in (3.41)) so, dass eine einfallende Welle mit $\vec{k} \approx \vec{k}_0$ dargestellt wird und somit $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ in der Entwicklung (3.42) auch wirklich vorkommt. Mit dem Integral wird die inhomogene Gleichung (3.41) aus (3.44) reproduziert. (Beweis: Einsetzen in (3.41).)

Leider ist (3.45) noch immer eine komplizierte Integralgleichung für $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Wir können diese aber näherungsweise lösen, indem wir $\psi_{\vec{k}}$ nochmals auf der rechten Seite einsetzen und Terme quadratisch in V vernachlässigen, indem wir V als „kleine Störung“ behandeln,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3r' G_k(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} . \quad (3.46)$$

Dies ist die *Bornsche Näherung*. Zunächst fahren wir aber mit der allgemeinen Lösung fort.

Die Lösung von (3.44) ist

$$G_k(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} . \quad (3.47)$$

Um dies einzusehen, benützen wir, dass für Δ in Kugelkoordinaten und $\vec{r}' \neq 0$ gilt

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}}{r} = 0 .$$

Der Rest folgt mit dem Greenschen Satz,

$$\int_{B_\epsilon} f(\vec{r}') (\Delta + k^2) \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}}{r} d^3r' = -4\pi f(0) ,$$

wobei B_ϵ eine Kugel mit Radius $\epsilon > 0$ ist und $f(\vec{r}')$ eine Funktion. Bemerkungen:

1. Die Lösung (3.47) beschreibt eine sich nach außen ausbreitende Streuwelle. Dies entspricht den Anfangsbedingungen bei $t = 0$. Eine einlaufende Welle wäre $\propto \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'}}{r}$.
2. Der Betrag des Wellenvektors der gestreuten Welle ist ebenfalls k . Wegen

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ist also die Energie erhalten. Dies kommt daher, dass $V(\vec{r}')$ zeitunabhängig ist, bzw. keine anderen Teilchen vorhanden sind, um Energie oder Impuls wegzutragen. Man spricht daher von *elastischer Streuung*.

Wenn die gestreute Welle weit weg vom Streuzentrum detektiert wird, dann ist $r \gg r'$, denn \vec{r}' muss innerhalb der Reichweite von V liegen, um erheblich beizutragen. Somit wird in

(3.46), (3.47)

$$\begin{aligned}
k|\vec{r} - \vec{r}'| &= k\sqrt{r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}' + (r')^2} \approx kr\sqrt{1 - \frac{2\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}} \\
&\approx kr \left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}\right) = kr - k\vec{r}' \cdot \hat{r} = kr - \vec{k}' \cdot \vec{r}',
\end{aligned}$$

wobei $\vec{k}' := k\hat{r}$ der Wellenvektor der gestreuten Welle im Fernfeld ist. Wir können deshalb für die Asymptotik im Fernfeld schreiben:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{\vec{k}}(\Omega_{\hat{r}}) \quad (3.48)$$

mit der *Streuamplitude*

$$f_{\vec{k}}(\Omega_{\hat{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}') \quad (3.49)$$

3.4.1 Born-Näherung

In der Born'schen Näherung vereinfacht sich die Streuamplitude zu

$$f_{\vec{k}}(\Omega_{\hat{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \hat{V}(\vec{k}' - \vec{k}). \quad (3.50)$$

Dabei ist $\hat{V}(\vec{k}' - \vec{k})$ die Fouriertransformierte des Potentials und $\Omega_{\hat{r}}$ hängt nur von der Richtung \hat{r} ab.

Wir zeigen jetzt noch, dass $A_{\vec{k}} = a_{\vec{k}}$. Dazu benötigen wir die Born'sche Näherung nicht. Dazu lösen wir (3.46) mit (3.47) nach $e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}$ auf und setzen dies in (3.40) ein:

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a_{\vec{k}} \left(\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}') \right). \quad (3.51)$$

Im zweiten Term kommt

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a_{\vec{k}} e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}') \quad (3.52)$$

vor. Und weil $a_{\vec{k}}$ um $\vec{k} \approx \vec{k}_0$ konzentriert ist, gilt $k_0 \gg |\vec{k} - \vec{k}_0|$, so dass

$$\begin{aligned}
k &= \sqrt{(\vec{k}_0 + \vec{k} - \vec{k}_0)^2} \approx \sqrt{k_0^2 + 2\vec{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)} \\
&\approx k_0 \left(1 + \frac{\vec{k}_0}{k_0^2} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)\right) = \hat{k}_0 \cdot \vec{k},
\end{aligned}$$

so dass (3.52) zu

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \hat{k}_0 |\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_{\vec{k}_0}(\vec{r}') = \psi(\hat{k}_0 |\vec{r} - \vec{r}'|, t_0) \psi_{\vec{k}_0}(\vec{r}') \quad (3.53)$$

wird. Aber $\hat{k}_0 |\vec{r} - \vec{r}'|$ befindet sich rechts vom Potential (siehe Abbildung 3.6), deshalb ist (3.53) gleich Null und (3.51) wird zu

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}).$$

Vergleich mit (3.43) zeigt $A_{\vec{k}} = a_{\vec{k}}$. Mit (3.42) und (3.48) ist das Wellenpaket bei $t \geq t_0$

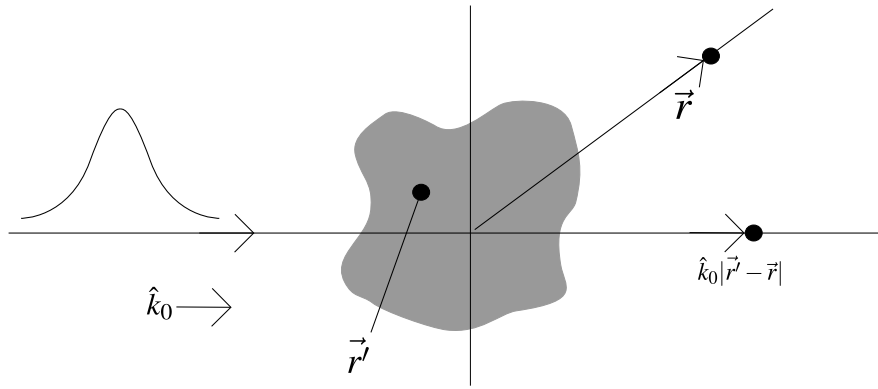


Abbildung 3.6: $\hat{k}_0 |\vec{r}' - \vec{r}|$ liegt rechts vom Potential.

gegeben als

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0(\vec{r}, t) + \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a_{\vec{k}} \frac{e^{i(kr - E_k(t-t_0)/\hbar)}}{r} f_{\vec{k}}(\Omega_{\vec{r}}), \quad (3.54)$$

mit dem „frei propagierenden“ Wellenpaket

$$\psi_0(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - iE_k(t-t_0)/\hbar}.$$

Falls die Reichweite Δr von $V(\vec{r})$ klein genug ist verglichen mit $1/\Delta k$, wobei Δk die Breite des einfallenden Wellenpakets im k -Raum ist, dann folgt aus (3.49), dass

$$f_{\vec{k}}(\Omega_{\vec{r}}) \approx f_{\vec{k}_0}(\Omega_{\vec{r}}) \quad (3.55)$$

für alle vorkommenden \vec{k} . Damit wird aus (3.54)

$$\psi(\vec{r}, t) \approx \psi_0(\vec{r}, t) + \frac{f_{\vec{k}_0}(\Omega_{\vec{r}})}{r} \psi_0(\hat{k}_0 r, t), \quad (3.56)$$

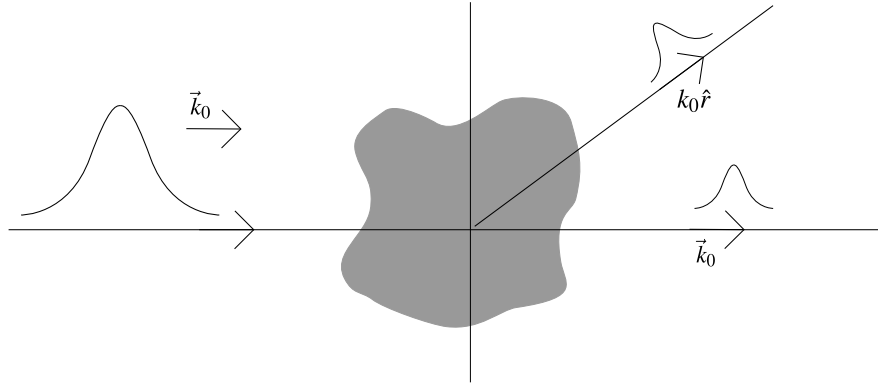


Abbildung 3.7: Rechts vom Streuzentrum wird der Zustand durch einen ungestreuten („frei propagierenden“) und einen gestreuten Beitrag beschrieben.

dies ist in Abbildung 3.7 illustriert. Die Wahrscheinlichkeit pro Raumwinkel, dass das Teilchen in Richtung $\Omega_{\vec{r}}$ gestreut wird, beträgt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}_0}(\Omega_{\vec{r}})|^2. \quad (3.57)$$

Dies ist der *differentielle Wirkungsquerschnitt*. Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen überhaupt gestreut wird, ist das Integral von $d\sigma/d\Omega$ über den Raumwinkel $d\Omega$,

$$\sigma = \int d\Omega |f_{\vec{k}_0}(\Omega_{\vec{r}})|^2,$$

der *totale Wirkungsquerschnitt*.

3.4.2 Partialwellenzerlegung

Falls das Potential rotationssymmetrisch ist, $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$, dann kann man bei der Berechnung (3.49) der Streuamplitude benutzen, dass die Eigenzustände $\psi_{\vec{k}}$ gleichzeitig als Eigenzustände des Drehimpulses gewählt werden können, $\psi_{\vec{k}} = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$. Allerdings besitzt die einlaufende Welle $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ diese Symmetrie nicht. Man kann aber trotzdem die einlaufende Welle in einer Eigenbasis des Drehimpulses entwickeln,

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) (h_l(kr) + h_l^*(kr)) \quad (3.58)$$

mit den Legendre-Polynomen P_l und den sphärischen Hankelfunktionen h_l . Im Fernfeld beschreibt $h_l(kr) \sim e^{-ikr}/i^{l+1}kr$ eine einlaufende, und $h_l^*(kr) \sim e^{ikr}/i^{l+1}kr$ eine auslaufende Kugelwelle. Bemerkung: Wir haben $\vec{k}||\hat{z}$ gewählt. Für die Streuzustände kann man nun ansetzen

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) (h_l(kr) + s_l h_l^*(kr)). \quad (3.59)$$

Dies ist die Partialwellenzerlegung des Streuzustandes; der l -te Term der Summe heisst Partialwelle zum Drehimpuls l oder l -Welle. Aus der Teilchenzahlerhaltung innerhalb jeder Partialwelle folgt $|s_l| = 1$, und man schreibt $s_l = e^{2i\delta_l}$ und nennt δ_l die zu l gehörende Streuphase.

Aus dem Vergleich mit Gl. (3.48) im Fernfeld findet man

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta) \quad (3.60)$$

mit den Partialwellen-Streuamplituden

$$f_l(\theta) = \frac{1}{k}(2l+1)P_l(\cos\theta)e^{i\delta_l}\sin\delta_l, \quad (3.61)$$

wo δ_l die *Streuphase* ist.

Der totale Wirkungsquerschnitt ist

$$\sigma = \sum_l \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (3.62)$$

Entwickelt man die stationären Zustände $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ (3.48) nach radialen Eigenfunktionen und Kugelfunktionen, findet man mit (3.61) und $P_l(1) = 1$ das *optische Theorem*,

$$\begin{array}{c} \sigma \\ \uparrow \\ \text{gestreute} \\ \text{Teilchen} \end{array} = \frac{4\pi}{k} \underbrace{\text{Im}[f(0)]}_{\substack{\uparrow \\ \text{Verlust in} \\ \text{Vorwärtsstreuung}}} . \quad (3.63)$$

Kapitel 4

Nicht-relativistische Vielteilchensysteme

4.1 Zweite Quantisierung

In diesem Kapitel betrachten wir Systeme mit vielen Teilchen, $N \gg 1$, sowie Systeme, deren Teilchenzahl N nicht konstant ist. Dazu führen wir den in diesem Fall adäquaten Formalismus ein. Beispiele sind Elektronen in Mehrelektronenatomen sowie in Metallen, und sog. entartete Quantengase.

4.1.1 Identische Teilchen

Wir betrachten N identische Teilchen. Deren Zustand wird durch die Wellenfunktion

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

beschrieben, wobei $x_i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$ Ort und Spin des i -ten Teilchens bezeichnet. Was heißt „identisch“? Um dies herauszufinden, müssen wir Teilchen vertauschen! Eine *Vertauschung* von zwei Teilchen i und j (eine sog. *Transposition*) wird durch den Permutationsoperator P_{ij} ($i \neq j$) beschrieben, wobei

$$P_{ij}\psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) := \psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N). \quad (4.1)$$

Die Eigenschaften von P_{ij} sind

- (i) P_{ij} ist unitär (erhält das Skalarprodukt),
- (ii) $P_{ij}^2 = 1$,

(iii) aus (i) und (ii) folgt $P_{ij}^\dagger = P_{ij}$: hermitescher Operator mit Eigenwerten $\lambda = \pm 1$.

Eine allgemeine Permutation P von N Teilchen, $i \mapsto \sigma(i)$, $i \in \{1, \dots, N\}$,

$$P\psi(x_1, \dots, x_N) = \psi(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(N)}), \quad (4.2)$$

kann immer als Produkt solcher P_{ij} dargestellt werden. Die Anzahl der P_{ij} ist dabei *nicht* eindeutig, aber deren Parität (gerade/ungerade Anzahl von Transpositionen) ist es wohl. Man nennt eine Permutation

$$\begin{aligned} \text{gerade,} & \quad (-1)^P = \text{sgn}(P) = +1, \quad \text{falls } P \text{ ein Produkt geradzahlig vieler } P_{ij} \text{ ist, bzw.} \\ \text{ungerade,} & \quad (-1)^P = \text{sgn}(P) = -1, \quad \text{falls } P \text{ ein Produkt ungeradzahlig vieler } P_{ij} \text{ ist,} \end{aligned} \quad (4.3)$$

ausserdem gilt immer $(+1)^P = 1$. Die Permutationen von N abstrakten Objekten bilden die Gruppe S_N mit $N!$ Elementen. Zur Beschreibung von N identischen Teilchen benötigt man eine *Darstellung* D von S_N auf dem Hilbertraum von N Teilchen,

$$D : \sigma \in S_N \mapsto P, \quad (4.4)$$

wobei P ein unitärer Operator auf dem Hilbertraum darstellt. Hier kann D eine reduzible Darstellung sein, man kann sich aber allgemein auf die Diskussion von irreduziblen Darstellungen beschränken (dazu vergleiche man die Darstellungstheorie der Drehgruppe). Der Einfachheit halber schreiben wir von jetzt an „ $P \in S_N$ “ statt $P = D(\sigma)$, $\sigma \in S_N$. Was heißt nun identisch?

Die Vertauschung von identischen Teilchen ist nicht messbar,

d.h. der Erwartungswert einer beliebigen Observable $O = O^\dagger$ ist derselbe für den Zustand $P|\psi\rangle$ wie für $|\psi\rangle$. Deshalb gilt für jeden Zustand ψ identischer Teilchen, jede Observable $O = O^\dagger$, und jedes $P \in S_N$,

$$\langle \psi | O | \psi \rangle = \langle \psi | P^\dagger O P | \psi \rangle. \quad (4.5)$$

Weil diese Relation für jeden Zustand ψ gilt, kann man sie auch als Operatoridentität formulieren,

$$O = P^\dagger O P, \quad \text{bzw.} \quad [P, O] = 0 \quad (4.6)$$

Dies gilt insbesondere für den Operator für die Energie, den Hamilton-Operator:

$$[P, H] = 0, \quad (4.7)$$

für alle Permutationen P , somit ist S_N eine *Symmetriegruppe*. Die $N!$ Zustände $P\psi$ sind physikalisch ununterscheidbar - gibt es sie wirklich alle? Antwort: Nein, in der Natur gibt es

nur zwei mögliche Linearkombinationen¹

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} P\psi \quad (\text{symmetrischer Zustand}), \quad (4.8)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (-1)^P P\psi \quad (\text{antisymmetrischer Zustand}). \quad (4.9)$$

In der Sprache der Darstellungstheorie kommen in der Natur² nur die zwei eindimensionalen, irreduziblen Darstellungen von S_N vor, die vollständig symmetrische und die vollständig antisymmetrische. Für die Vertauschung zweier Teilchen $i \neq j$ gilt

$$\begin{aligned} P_{ij}\psi_s &= \psi_s, \\ P_{ij}\psi_a &= -\psi_a. \end{aligned}$$

Da $[H, P] = 0$ für alle P , ist die Symmetrie der Wellenfunktion (sog. Statistik oder Teilchenstatistik) für eine Gruppe identischer Teilchen festgelegt und kann sich unter Zeitentwicklung mit dem Hamiltonoperator H nicht ändern.

Die Symmetrie von ψ_s heißt *Bose-Statistik* und die von ψ_a heißt *Fermi-Statistik*. Die dazugehörigen Teilchen heißen *Bosonen* bzw. *Fermionen*. Später finden wir daraus mit der relativistischen Quantenmechanik das *Spin-Statistik-Theorem*:

$$\begin{aligned} \text{Bosonen} &\Leftrightarrow \text{ganzzahliger Spin,} \\ \text{Fermionen} &\Leftrightarrow \text{halbzahliger Spin.} \end{aligned}$$

4.1.2 Der (Anti-) Symmetrisierungsoperator

Wie können wir die in der Natur erlaubten symmetrischen und antisymmetrischen Zustände bilden? Die Vorschriften (4.8) und (4.9) enthalten die (Anti-) Symmetrisierungsoperatoren,

$$S_{\pm} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (\pm)^P P, \quad (4.10)$$

wobei

$$(\pm)^P := \begin{cases} +1, & P \text{ gerade,} \\ \pm 1, & P \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (4.11)$$

Wir beginnen mit einer vollständigen Orthonormalbasis (VONB)

$$\{|i\rangle\}, \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

¹Man beachte, dass die Zustände ψ_s und ψ_a im allgemeinen nicht normiert sind.

²Dies gilt in drei Raumdimensionen. In zweidimensionalen Systemen existieren die sogenannten *Anyonen*.

für ein einzelnes Teilchen. Eine VONB erfüllt

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad (4.12)$$

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}. \quad (4.13)$$

Beispiele: Ebene Wellen $\{|\vec{k}\rangle\}$, Atomorbitale $\{|n, l, m\rangle\}$, ...

Eine ONB für N Teilchen kann dann aus den Produktzuständen

$$|i_1, \dots, i_k, \dots, i_N\rangle := |i_1\rangle \otimes \dots \otimes |i_k\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle \quad (4.14)$$

gebildet werden, wobei sich das k -te Teilchen im Zustand $|i_k\rangle$ befindet. Die (anti-) symmetrischen Basiszustände erhalten wir jetzt durch Anwendung von S_\pm ,

$$S_\pm |i_1, \dots, i_k, \dots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (\pm 1)^P P |i_1, \dots, i_k, \dots, i_N\rangle. \quad (4.15)$$

Für Fermionen folgt daraus das *Pauli-Prinzip* (Ausschlussprinzip),

$$i_k = i_{k'} \Rightarrow S_- |i_1, \dots, i_k, \dots, i_{k'}, \dots, i_N\rangle = 0. \quad (4.16)$$

Grund: Jeder Term tritt zweimal auf, mit ungleichen Vorzeichen.

Eigenschaften von S_\pm :

(i) Für jedes $P \in S_N$ gilt

$$\begin{aligned} PS_N &= \{PQ | Q \in S_N\} = S_N \quad \text{und} \\ S_N P &= \{QP | Q \in S_N\} = S_N \end{aligned} \quad (4.17)$$

Beweis: Folgt aus der Existenz des Inversen in der Gruppe S_N .

(ii) Anwendung einer Permutation P auf die Projektoren S_\pm :

$$PS_\pm = S_\pm P = (\pm 1)^P S_\pm. \quad (4.18)$$

Beweis: (i) und Definition (4.10).

(iii) Normierung:

$$\|S_- |i_1, \dots, i_N\rangle\|^2 = \langle i_1, \dots, i_N | S_-^\dagger S_- |i_1, \dots, i_N\rangle = \begin{cases} 1, & \text{falls } i_k \neq i_l \forall k \neq l, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.19)$$

$$\|S_+ |i_1, \dots, i_N\rangle\|^2 = \langle i_1, \dots, i_N | S_+^\dagger S_+ |i_1, \dots, i_N\rangle = n_1! n_2! \dots, \quad (4.20)$$

wobei n_i die Vielfachheit des Zustands i in $|i_1, \dots, i_N\rangle$ bezeichnet.

- (iv) $(S_{\pm})^2 = \sqrt{N!}S_{\pm}$, d.h. die S_{\pm} sind (bis auf den Faktor $\sqrt{N!}$) Projektionsoperatoren.
- (v) Ein beliebiger Zustand von N identischen Teilchen kann in den Zuständen $S_{\pm}|i_1, \dots, i_N\rangle$ entwickelt werden:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} \overbrace{|i_1, \dots, i_N\rangle \underbrace{\langle i_1, \dots, i_N | \psi \rangle}_{=c_{i_1, \dots, i_N}}}}^{=1}$$

Der physikalische Zustand ist dann

$$S_{\pm}|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} c_{i_1, \dots, i_N} S_{\pm}|i_1, \dots, i_N\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} c'_{i_1, \dots, i_N} |i_1, \dots, i_N\rangle, \quad (4.21)$$

wobei $c'_{i_1, \dots, i_N} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} (\pm 1)^{\sigma} c_{i_{\sigma(1)}, \dots, i_{\sigma(N)}}$ symmetrisierte Koeffizienten sind.

4.1.3 Besetzungszahlbasis

Die Zustände

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} S_+ |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle & \quad (\text{Bosonen}) \\ S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle & \quad (\text{Fermionen}) \end{aligned}$$

sind normiert³ und spannen den Hilbertraum von N identischen Teilchen auf. Falls wir aber alle möglichen $|i_1, i_2, \dots, i_N\rangle$ verwenden, dann tritt nach dem Anwenden von S_{\pm} derselbe Zustand mehrmals auf, da $|i_1, \dots, i_N\rangle$ und $P|i_1, \dots, i_N\rangle$ den selben Zustand ergeben (bis aufs Vorzeichen bei Fermionen). Um eine (linear unabhängige) Basis zu erhalten, dürfen wir nur einen „Vertreter“ dieser durch Permutationen verbundenen Produktzustände verwenden. Eine eindeutige Charakterisierung der unabhängigen Basiszustände ist möglich durch Angabe der *Besetzungszahlen*,

$$|n_1, n_2, \dots\rangle := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} S_+ |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle & (\text{Bosonen}), \\ S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle & (\text{Fermionen}). \end{cases} \quad (4.22)$$

n_1 gibt an, wie oft 1 in $\{i_1, i_2, \dots, i_N\}$ vorkommt, etc. Wegen dem Pauli-Prinzip ist bei Fermionen $n_i = 0$ oder $n_i = 1$, während für Bosonen $n_i = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ gilt.

Die Besetzungszahlbasis $\{|n_1, n_2, \dots\rangle\}$ bildet eine VONB für den Hilbertraum \mathcal{H}_N für $N = \sum_i n_i$ identische Teilchen,

$$\langle n_1, n_2, \dots | n'_1, n'_2, \dots \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \quad \text{Orthogonalität und Normierung,} \quad (4.23)$$

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots| = \mathbb{1} \quad \text{Vollständigkeit.} \quad (4.24)$$

³Bei den Fermionen schließen wir diejenigen Zustände, die bei Anwendung von S_- verschwinden, aus.

Wir können die Hilberträume \mathcal{H}_N für $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ im *Fockraum* zusammenfassen:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3 \oplus \dots = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N. \quad (4.25)$$

Die direkte Summe \oplus kann gelesen werden als „das System hat entweder 0 oder 1 oder 2 ... Teilchen“. Die kombinierte Besetzungszahlbasis $\{|n_1, n_2, \dots\rangle\}$ mit unbeschränkter Summe $\sum_i n_i$ ist eine VONB des Fockraumes. Der Raum \mathcal{H}_0 der Zustände ohne Teilchen enthält nur einen (linear unabhängigen) Zustand, das *Vakuum*

$$|0\rangle = |0, 0, 0, \dots\rangle. \quad (4.26)$$

4.1.4 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Bosonen

Einteilchenoperatoren, z.B. für Ort \hat{x}_i oder Impuls \hat{p}_i erhalten die Teilchenzahl, genauso die Zweiteilchenwechselwirkung $\hat{V}(\hat{x}_i, \hat{x}_j)$, sowie der Hamiltonoperator \hat{H} ,

$$\hat{x}, \hat{p}, \hat{V}, \hat{H} : \mathcal{H}_N \rightarrow \mathcal{H}_N. \quad (4.27)$$

Es wird aber sehr nützlich sein, Operatoren zu definieren, die verschiedene Sektoren $\mathcal{H}_N, \mathcal{H}_{N'}$ des Fock-Raumes miteinander verbinden.

Der *Erzeugungsoperator* erhöht die Besetzungszahl um 1,

$$a_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle := \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle. \quad (4.28)$$

Adjungiere (und $n_i \rightarrow n'_i$):

$$\langle \dots, n'_i, \dots | a_i = \sqrt{n'_i + 1} \langle \dots, n'_i + 1, \dots |,$$

multipliziere mit $|\dots, n_i, \dots\rangle$:

$$\langle \dots, n'_i, \dots | a_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n'_i + 1} \langle \dots, n'_i + 1, \dots | \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} \delta_{n_i, n'_i+1}. \quad (4.29)$$

D.h. a_i erniedrigt die Besetzungszahl n_i um 1.

Vernichtungsoperator:

$$a_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \begin{cases} \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle, & n_i \geq 1, \\ 0, & n_i = 0. \end{cases} \quad (4.30)$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
a_i |\dots, n_i, \dots\rangle &= \sum_{n'_i=0}^{\infty} |\dots, n'_i, \dots\rangle \langle \dots, n'_i, \dots | a_i | \dots, n_i, \dots\rangle \\
&\stackrel{(4.29)}{=} \sum_{n'_i=0}^{\infty} |\dots, n'_i, \dots\rangle \sqrt{n_i} \delta_{n_i, n'_i+1} \\
&= \begin{cases} \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle & (n_i \geq 1), \\ 0 & (n_i = 0). \end{cases}
\end{aligned}$$

Aus diesen Eigenschaften von a_i und a_i^\dagger sowie der Vollständigkeit der Besetzungszahlbasis folgen die *Vertauschungsrelationen* für Bosonen:

$$[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad (4.31)$$

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (4.32)$$

Man beachte die Analogie zu den Vertauschungsrelationen zwischen den Leiteroperatoren beim harmonischen Oszillator. Beweis: (4.31):

$$\begin{aligned}
i = j &: \text{klar,} \\
i \neq j &: a_i^\dagger a_j^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \\
&= \sqrt{(n_i + 1)(n_j + 1)} |\dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle \\
&= a_j^\dagger a_i^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle.
\end{aligned}$$

(4.32):

$$\begin{aligned}
i \neq j &: a_i a_j^\dagger |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \\
&= \sqrt{n_i(n_j + 1)} |\dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle \\
&= a_j^\dagger a_i |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle \\
i = j &: [a_i, a_i^\dagger] |\dots, n_i, \dots\rangle \\
&= (a_i a_i^\dagger - a_i^\dagger a_i) |\dots, n_i, \dots\rangle \\
&= (\sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_i + 1} - \sqrt{n_i} \sqrt{n_i}) |\dots, n_i, \dots\rangle \\
&= 1 |\dots, n_i, \dots\rangle.
\end{aligned}$$

Nun können wir Besetzungszahl-Basiszustände durch Erzeugungsoperatoren darstellen, ausgehend vom Vakuumzustand,

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle. \quad (4.33)$$

Die „Navigation“ im Fockraum erfolgt durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (siehe Abb. 4.1). Den Teilchenzahloperator konstruiert man sich über den Besetzungszahloperator

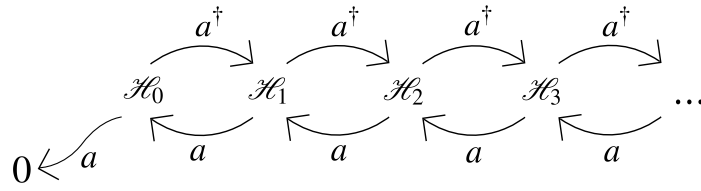


Abbildung 4.1: Navigation im Fockraum mittels Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

für den Einteilchen-Zustand $|i\rangle$,

$$\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i. \quad (4.34)$$

Dessen Wirkungsweise auf Besetzungszustände ist

$$\hat{n}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = n_i |\dots, n_i, \dots\rangle. \quad (4.35)$$

Daraus ergibt sich die Gesamt-Teilchenzahl als

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i, \quad (4.36)$$

mit der Wirkungsweise

$$\hat{N} |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = \underbrace{\left(\sum_i n_i \right)}_{=N} |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle. \quad (4.37)$$

Für nicht-wechselwirkende Teilchen können wir als Einteilchenbasis $\{|i\rangle\}$ die Eigenbasis des Hamilton-Operators wählen (Eigenwerte ϵ_i). Dann gilt

$$H = \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i. \quad (4.38)$$

4.1.5 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen

Der Formalismus für Fermionen ist fast analog zu dem für Bosonen, aber n_i kann wegen dem Pauli-Prinzip nur die Werte $n_i = 0, 1$ annehmen. Wegen der Änderung des Vorzeichens bei Vertauschung von Teilchen muss zudem auf die *Reihenfolge* der Anwendung von fermionischen Operatoren geachtet werden (Anti-Vertauschungsrelationen).

Erzeugungsoperator:

$$S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle =: a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger |0\rangle. \quad (4.39)$$

Es folgt z. B.

$$S_- |i_2, i_1, \dots, i_N\rangle = a_{i_2}^\dagger a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger |0\rangle = -S_- |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle = -a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger \cdots a_{i_N}^\dagger |0\rangle \quad (4.40)$$

und damit der Antikommutator

$$\{a_{i_1}^\dagger, a_{i_2}^\dagger\} := a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger + a_{i_2}^\dagger a_{i_1}^\dagger = 0. \quad (4.41)$$

Für $i_1 = i_2$ ergibt sich

$$(a_i^\dagger)^2 = 0, \quad (4.42)$$

d.h. zwei Fermionen können nicht denselben Zustand besetzen (Pauli-Prinzip). Die Besetzungszustände können, wie bei Bosonen, mittels Anwendung von Erzeugungsoperatoren auf das Vakuum dargestellt werden,

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \quad \text{mit } n_i = 0, 1. \quad (4.43)$$

Die Reihenfolge der a_i^\dagger ist dabei wichtig und muss einmal festgelegt werden. Dann folgt für den Erzeugungsoperator:

$$a_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = \underbrace{(1 - n_i)}_{\text{Pauli-Prinzip}} \underbrace{(-1)^{\sum_{j<i} n_j}}_{\substack{\text{Vorzeichen} \\ \text{(wegen Anti-VR)}}} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle. \quad (4.44)$$

Adjungiere und erhalte die Matrixelemente

$$\langle \dots, n_i, \dots | a_i | \dots, n'_i, \dots \rangle = (1 - n_i) (-1)^{\sum_{j<i} n_j} \delta_{n_i+1, n'_i}. \quad (4.45)$$

Somit

$$\begin{aligned} a_i |\dots, n'_i, \dots\rangle &= \sum_{n_i=0,1} |\dots, n_i, \dots\rangle \langle \dots, n_i, \dots | a_i | \dots, n'_i, \dots \rangle \\ &= \sum_{n_i=0,1} |\dots, n_i, \dots\rangle (1 - n_i) (-1)^{\sum_{j<i} n_j} \delta_{n_i+1, n'_i} \\ &= n'_i |\dots, n'_i - 1, \dots\rangle (1 - 0) (-1)^{\sum_{j<i} n_j} \\ &= n'_i (-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots, n'_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned}$$

Somit gilt für Erzeuger und Vernichter von Fermionen:

$$a_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = (1 - n_i) (-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle, \quad (4.46)$$

$$a_i |\dots, n_i, \dots\rangle = n_i (-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle. \quad (4.47)$$

Daraus erhalten wir dann auch die Besetzungszahloperatoren

$$\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i, \quad (4.48)$$

wobei

$$\hat{n}_i | \dots, n_i, \dots \rangle = n_i | \dots, n_i, \dots \rangle, \quad (4.49)$$

wie für Bosonen, sowie die allgemeinen Anti-Vertauschungsrelationen

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \quad (4.50)$$

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}. \quad (4.51)$$

Das heißt, in den Vertauschungsrelationen für Bosonen $[A, B] = [A, B]_- = AB - BA$ müssen *generell* Kommutatoren durch Anti-Kommutatoren $\{A, B\} = [A, B]_+ = AB + BA$ ersetzt werden, wenn es um Fermionen geht.

4.1.6 Operatoren in zweiter Quantisierung

Wir betrachten zuerst Einteilchenoperatoren. Ein Operator T des N -Teilchensystems sei eine Summe von Einteilchenoperatoren,

$$T = t_1 + t_2 + \dots + t_N = \sum_{\alpha=1}^N t_\alpha, \quad (4.52)$$

z.B. die kinetische Energie $t_\alpha = p_\alpha^2/2m$, der Impuls p_α oder das Potential $U(\vec{r}_\alpha)$. Für ein einzelnes Teilchen findet man $T = t$. Die Notation t_α bezeichnet streng genommen einen Operator, welcher nur auf den α -ten Faktor im Produktraum wirkt, $t_\alpha = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes t \otimes \dots$, wobei t an der α -ten Stelle erscheint. Die Matrixelemente bzgl. einer Einteilchenbasis $\{|i\rangle\}$ haben dann die Form

$$t_{ij} = \langle i | t | j \rangle. \quad (4.53)$$

Mit der Vollständigkeit der Einteilchenbasis, $\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbb{1}$, folgt damit,

$$t = \sum_{ij} |i\rangle \underbrace{\langle i | t | j \rangle}_{=t_{ij}} \langle j| = \sum_{ij} t_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (4.54)$$

Für N Teilchen erhalten wir mit (4.52),

$$T = \sum_{ij} t_{ij} \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha, \quad (4.55)$$

wobei

$$|i\rangle_\alpha \langle j|_\alpha = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \overbrace{|i\rangle \langle j|}^{\substack{\alpha\text{-tes} \\ \text{Teilchen}}} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}.$$

Um T durch Erzeuger und Vernichter darzustellen, betrachten wir die Wirkung auf einen Besetzungszustand.

Bosonen ($i \neq j$):

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} S_+ |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \\
& \stackrel{(*)}{=} S_+ \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots n_j! \dots}} \underbrace{\sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle}_{\substack{\text{ersetzt } |j\rangle \text{ durch} \\ |i\rangle \text{ f\"ur } n_j \text{ Terme}}} \\
& = S_+ \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i + 1! \dots n_j - 1!}} \frac{\sqrt{n_i + 1}}{\sqrt{n_j}} n_j |\dots, j \rightarrow i \dots\rangle \\
& = n_j \frac{\sqrt{n_i + 1}}{\sqrt{n_j}} |\dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle = a_i^{\dagger} a_j |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle. \tag{4.56}
\end{aligned}$$

In Schritt (*) wird verwendet, dass $\sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha}$ ein symmetrischer Operator ist und daher mit S_{\pm} vertauscht. (Auf die Reihenfolge der Teilchen kommt es nicht an, da mit α ohnehin über alle Teilchen summiert wird.) Gegenüber der vorigen Zeile ist im Zustand $|\dots, \dots\rangle$ ein Teilchen weniger im Zustand $|j\rangle$ und dafür eines mehr im Zustand $|i\rangle$. (Und das n_j -mal wegen der Summation über α , daher der Vorfaktor n_j .) Für $i = j$ wird in (4.56) $|i\rangle$ n_i -mal durch $|i\rangle$ ersetzt:

$$(4.56) = n_i |\dots, n_i, \dots\rangle = a_i^{\dagger} a_i |\dots, n_i, \dots\rangle.$$

Damit gilt für alle i, j

$$\sum_{\alpha=1}^N |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} = a_i^{\dagger} a_j. \tag{4.57}$$

Also, mit (4.55),

$$T = \sum_{ij} t_{ij} a_i^{\dagger} a_j. \tag{4.58}$$

Fermionen: Selbes Resultat. Herleitung ($i \neq j$):

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha} |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} S_- |i_1, \dots, i_N\rangle = S_- \sum_{\alpha} |i\rangle_{\alpha} \langle j|_{\alpha} |i_1, \dots, i_N\rangle \\
& = \underbrace{n_j(1 - n_i)}_{\text{Pauli-Prinzip}} S_- |\tilde{i}_1, \dots, \tilde{i}_N\rangle = a_i^{\dagger} a_j |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle. \tag{4.59}
\end{aligned}$$

$i = j$:

$$(4.59) = n_i S_- |\tilde{i}_1, \dots, \tilde{i}_N\rangle = \underbrace{a_i^{\dagger} a_i}_{=n_i} |\dots, n_i, \dots\rangle.$$

Zweiteilchenoperatoren:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} v(x_\alpha, x_\beta) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{i,j,k,m} \underbrace{\langle i, j | v | k, m \rangle}_{=v_{ijkm}} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle k|_\alpha \langle m|_\beta.$$

Benütze nun

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha |j\rangle_\beta \langle k|_\alpha \langle m|_\beta = \sum_{\alpha \neq \beta} |i\rangle_\alpha \langle k|_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\beta \\ &= \sum_{\alpha, \beta} |i\rangle_\alpha \langle k|_\alpha |j\rangle_\beta \langle m|_\beta - \underbrace{\langle k|j\rangle}_{\delta_{kj}} \sum_{\alpha} |i\rangle_\alpha \langle m|_\alpha \\ &= a_i^\dagger a_k a_j^\dagger a_m - a_i^\dagger \underbrace{[a_k, a_j^\dagger]_{\pm}}_{=\delta_{kj}} a_m = \mp a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_m \\ &= a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_k, \end{aligned} \tag{4.60}$$

wobei

$$[A, B]_{\pm} = \begin{cases} \{A, B\} & \text{für Fermionen (+),} \\ [A, B] & \text{für Bosonen (-).} \end{cases} \tag{4.61}$$

Der Zweiteilchenoperator in der zweiten Quantisierung lautet deshalb

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,m} v_{ijkm} a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_k. \tag{4.62}$$

Mit den Einteilchen-Wellenfunktionen $\phi_i(x) = \langle x|i\rangle$ ist die explizite Form der Matrixelemente

$$v_{ijkm} = \int dx_\alpha dx_\beta \phi_i^*(x_\alpha) \phi_j^*(x_\beta) v(x_\alpha, x_\beta) \phi_k(x_\alpha) \phi_m(x_\beta). \tag{4.63}$$

4.1.7 Feldoperatoren

Für ein einzelnes Teilchen geschieht der Wechsel von der Basis $\{|i\rangle\}$ zur Basis $\{|\lambda\rangle\}$ durch den Zusammenhang

$$|\lambda\rangle = \underbrace{\sum_i |i\rangle \langle i|\lambda\rangle}_{=1}.$$

Für die entsprechenden Operatoren gilt

$$a_\lambda^\dagger = \sum_i \langle i|\lambda\rangle a_i^\dagger, \tag{4.64}$$

$$a_\lambda = \sum_i \langle \lambda|i\rangle a_i. \tag{4.65}$$

Wichtig ist, dass dabei die Vertauschungsrelationen unverändert bleiben. Ein Spezialfall ist die Ortsbasis $\{|\vec{r}\rangle\}$,

$$\phi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | i \rangle.$$

Die zugehörigen Vernichtungs- und Erzeugungs-Operatoren sind die Feldoperatoren,

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_i \phi_i(\vec{r}) a_i, \quad (4.66)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_i \phi_i^*(\vec{r}) a_i^\dagger. \quad (4.67)$$

Das Hütchen „ $\hat{}$ “ dient zur Unterscheidung von der Wellenfunktion und wird später wieder weggelassen. Die Feldoperatoren haben folgende Bedeutung

$$\left. \begin{array}{l} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \text{ erzeugt} \\ \hat{\psi}(\vec{r}) \text{ vernichtet} \end{array} \right\} \text{ein Teilchen im Ortseigenzustand } |\vec{r}\rangle.$$

Die Vertauschungsrelationen für die Feldoperatoren lauten (mit $[A, B]_\pm = AB \pm BA$)

$$\left[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}') \right]_\pm = \left[\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \right]_\pm = 0, \quad (4.68)$$

$$\left[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \right]_\pm = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (4.69)$$

Beispiele für Einteilchenoperatoren in Form von Feldoperatoren sind die kinetische Energie

$$\int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (4.70)$$

und das Einteilchen-Potential

$$\int d^3r U(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}). \quad (4.71)$$

Die Zweiteilchenwechselwirkung nimmt die Form

$$\frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (4.72)$$

an. Mit Operatoren kann der Hamiltonoperator wie folgt dargestellt werden,

$$\begin{aligned} H &= \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right) \hat{\psi}(\vec{r}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (4.73)$$

Der Teilchendichteoperator ist

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_\alpha \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) = \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}). \quad (4.74)$$

Die Gesamtteilchenzahl ergibt sich daraus als

$$\hat{N} = \int d^3r \hat{n}(\vec{r}) = \int d^3r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}). \quad (4.75)$$

Die Gleichung (4.74) sieht aus wie eine Wahrscheinlichkeitsdichte und (4.73) wie ein Energieerwartungswert für $N = 1$ Teilchen mit Feldoperatoren $\hat{\psi}(\vec{r})$ statt Wellenfunktionen $\psi(\vec{r})$ und $\hat{n}(\vec{r})$ statt $n(\vec{r})$. Diese Ähnlichkeit ist der Grund für die Bezeichnung „zweite“ Quantisierung.

Bewegungsgleichungen (Feldgleichungen)*

Wegen der Ähnlichkeit zu Erwartungswerten findet man für die Zeitentwicklung der Feldoperatoren in Analogie zu (1.6)

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{\psi}}(\vec{r}, t) &= [\hat{\psi}(\vec{r}, t), H] \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right) \hat{\psi}(\vec{r}, t) + \int d^3r' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', t) V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}', t) \hat{\psi}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (4.76)$$

wobei (4.69) und (4.73) verwendet wurden. Dies sieht aus wie die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung. Aber: Der Wechselwirkungsterm ist nicht linear in ψ ! Nur für $V = 0$ erhält man das Einteilchen-Problem. Aus (4.74) erhält man

$$\dot{\hat{n}}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}) \quad (4.77)$$

mit der Teilchenstromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\hat{\psi}^\dagger \Delta \hat{\psi} - (\Delta \hat{\psi}^\dagger) \hat{\psi} \right). \quad (4.78)$$

4.1.8 Impulsdarstellung

Translationsinvariante Systeme: Impuls ist erhaltene Größe, wähle Impulsbasis

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (4.79)$$

Erzeuger, Vernichter: $a_{\vec{k}}^\dagger$, $a_{\vec{k}}$. Hamiltonoperator (vgl. Abbildung 4.2):

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} U_{\vec{k}' - \vec{k}} a_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} v_{\vec{q}} a_{\vec{p} + \vec{q}}^\dagger a_{\vec{k} - \vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{p}}, \quad (4.80)$$

mit den Matrixelementen

$$U_{\vec{k}'-\vec{k}} = V \int \phi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) d^3r = \int e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} U(\vec{r}) d^3r \quad (4.81)$$

$$v_{\vec{q}} = \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} v(\vec{r}). \quad (4.82)$$

Offensichtlich ist $v_{\vec{q}}$ die Fouriertransformierte des Potentials $v(\vec{r})$, wobei $v(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta) = v(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)$. Durch Fouriertransformation der Dichte erhält man

$$\hat{n}_{\vec{q}} = \int d^3r \hat{n}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}+\vec{q}}.$$

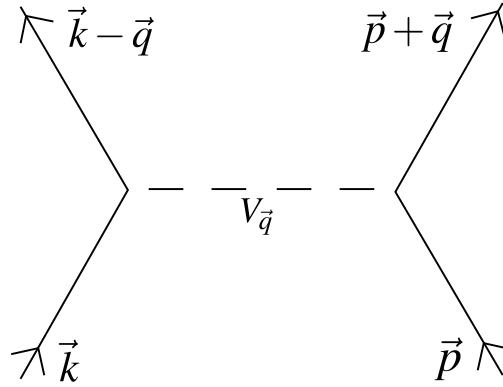


Abbildung 4.2: Impulsübertrag von \vec{q} , dargestellt in einem Feynman-Diagramm.

4.1.9 Spin

Um Teilchen mit Spin, z.B. Elektronen, beschreiben zu können, benützen wir folgende Notation: die kombinierte Variable $x := (\vec{r}, \sigma)$ beinhaltet sowohl den Ort \vec{r} wie auch den Spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ eines Teilchens. Der Feldoperator kann entweder als Funktion von x oder separat als Funktion von \vec{r} und Spin σ (als Index) geschrieben werden, $\hat{\psi}(x) = \hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$. Die Vertauschungsrelationen lauten im letzteren Fall

$$\left[\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \right]_{\pm} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (4.83)$$

Die Teilchendichte ergibt sich als Summe der Dichten für die Spinkomponenten,

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \hat{n}_\sigma(\vec{r}), \quad (4.84)$$

und der Hamiltonoperator für spin-unabhängige Wechselwirkung hat die Form

$$H = \sum_{\sigma} \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{\nabla} \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) + U(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}). \quad (4.85)$$

Wir können für Teilchen mit Spin auch den Spin-Dichteoperator einführen; dieser lautet in „erster Quantisierung“

$$\vec{S}(\vec{r}) = \sum_{\alpha=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}) \vec{S}_{\alpha}, \quad (4.86)$$

wobei \vec{S}_{α} den Spin-Operator des Teilchens α bezeichnet. Für Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen (z.B. Elektronen) gilt

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad (4.87)$$

mit den Pauli-Matrizen $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, und somit, in „zweiter Quantisierung“,

$$\vec{S}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{\sigma}_{\sigma, \sigma'} \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}). \quad (4.88)$$

4.2 Spin-1/2-Fermionen

Als erste Anwendung unserer nicht-relativistischen Vielteilchentheorie betrachten wir eine Ansammlung identischer Fermionen mit Spin 1/2. Typischerweise handelt es sich hier um Elektronen in Metallen. Wir betrachten hier die Idealisierung des freien Elektronengases, $U(\vec{r}) \equiv 0$, die für viele Metalle eine erstaunlich gute Näherung darstellt, wenn man bedenkt, dass das Potential der Atomrümpfe (Ionen) einfach vernachlässigt wird. Der Hamiltonoperator für das freie Elektronengas in zweiter Quantisierung lautet

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q} \neq 0, \sigma, \sigma'} v_{\vec{q}} a_{\vec{k} + \vec{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}' - \vec{q}, \sigma'}^{\dagger} a_{\vec{k}', \sigma'} a_{\vec{k}, \sigma}. \quad (4.89)$$

Aus der Coulomb-Wechselwirkung

$$v(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|} \quad (4.90)$$

wird durch Fouriertransformation im Impulsraum (siehe (4.82))

$$v_{\vec{q}} = \frac{1}{V} \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}, \quad (4.91)$$

wobei mit V das Volumen gemeint ist.

4.2.1 Nicht-wechselwirkendes Elektronengas

Wenn wir auch noch die Wechselwirkung weglassen, $V_{\vec{q}} \rightarrow 0$, dann erhalten wir das Einteilchenproblem

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}, \sigma}^\dagger a_{\vec{k}, \sigma}, \quad (4.92)$$

wobei als einzige verbleibende Vielteilcheneigenschaft das Pauli-Prinzip beachtet werden muss. Erstaunlicherweise ist sogar dies in vielen Fällen noch eine passable Näherung für viele Metalle. Als Einteilchenzustände verwenden wir Eigenzustände des Impulses $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, d.h., die ebenen Wellen,

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (4.93)$$

mit der Dispersionsrelation

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.94)$$

Der *Grundzustand* von N Elektronen ist der sogenannte *Fermi-See*, siehe Abbildung 4.3,

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\vec{p}, |\vec{p}| \leq \hbar k_F} \prod_{\sigma=\uparrow, \downarrow} a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger |0\rangle. \quad (4.95)$$

Die besetzten Einteilchen-Zustände bilden die *Fermi-Kugel* im Impulsraum (\vec{k} -Raum). Der Radius k_F (genauer $\hbar k_F$) heißt *Fermi-Impuls*. Teilchenzahl in der Impulsbasis:

$$n_{\vec{p}, \sigma} = \langle \Phi_0 | a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger a_{\vec{p}, \sigma} | \Phi_0 \rangle = \theta(\hbar k_F - |\vec{p}|) = \begin{cases} 1, & \text{falls } |\vec{p}| \leq k_F, \\ 0, & \text{falls } |\vec{p}| > k_F. \end{cases} \quad (4.96)$$

Wie groß ist k_F ? Dies wird durch die Gesamtteilchenzahl N bestimmt,

$$N = \sum_{\vec{p}, \sigma} n_{\vec{p}, \sigma} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Spinent-} \\ \text{artung}}}{2} \sum_{|\vec{p}| \leq k_F} 1 \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Kontinuums-} \\ \text{limes}}}{=} 2V \int_0^{\hbar k_F} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V k_F^3}{3\pi^2}. \quad (4.97)$$

Mittels Division durch V und Auflösen nach k_F erhält man

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n} \quad (4.98)$$

mit der Dichte $n = \frac{N}{V}$. Die größte Einteilchenenergie ist die *Fermi-Energie*,

$$\epsilon_F \equiv \epsilon_{k_F} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}. \quad (4.99)$$

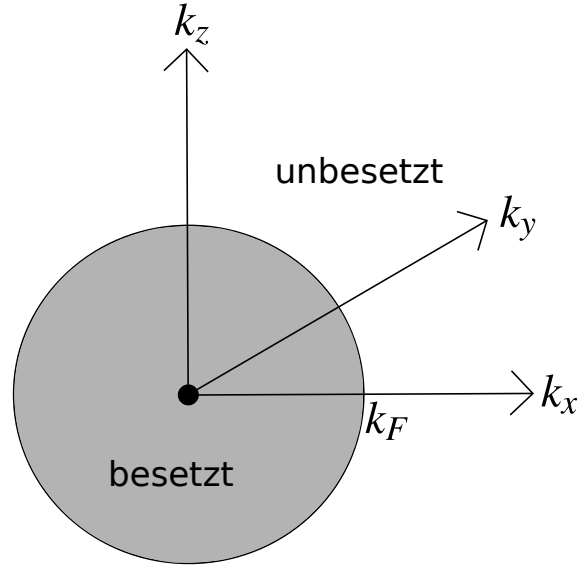


Abbildung 4.3: Die Zustände außerhalb der Fermi-Kugel sind im Grundzustand unbesetzt.

Die Grundzustandsenergie erhält man, indem man die Energien aller Zustände in der Fermi-Kugel aufsummiert,

$$\begin{aligned}
 E^{(0)} &= \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}, \sigma} k^2 \theta(k_F - k) \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\overset{\text{Spin-entartung}}{\downarrow} 2}{(2\pi)^3} V \int d^3k k^2 \theta(k_F - k) \\
 &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \underbrace{\int_0^{k_F} dk k^4}_{=\frac{1}{5}k_F^5} \stackrel{(4.98)}{=} \frac{3\hbar^2 k_F^2}{10m} N \\
 &\stackrel{(4.99)}{=} \frac{3}{5} \epsilon_F N. \tag{4.100}
 \end{aligned}$$

Mittlere Energie pro Teilchen:

$$\frac{E^{(0)}}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F.$$

Es ist oft nützlich, die Grundzustandsenergie (4.100) durch den *Seitz-Radius* r_S auszudrücken. Dies ist der Radius einer Kugel, deren Volumen dem mittleren Volumen pro Teilchen entspricht, gemessen in Bohr-Radien. Aus (4.98) folgt

$$n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}.$$

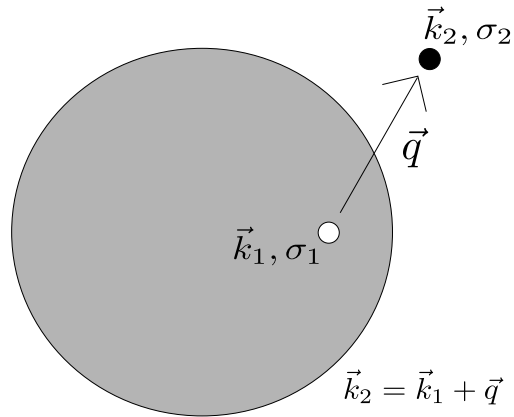


Abbildung 4.4: Durch Anregung wird ein Zustand außerhalb der Fermi-Kugel besetzt, in der Fermi-Kugel bleibt ein „Loch“ zurück.

Das Volumen pro Teilchen,

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3} =: \frac{4\pi r_0^3}{3} =: \frac{4\pi a_0^3 r_S^3}{3}$$

legt mit

$$a_0 := \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \quad \text{Bohr-Radius (SI)}$$

den Seitz-Radius fest:

$$r_S = \frac{r_0}{a_0} = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{a_0}. \quad (4.101)$$

Die Grundzustandsenergie ohne Wechselwirkung (4.100) entspricht somit genau

$$E^{(0)} = \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a_0}}_{= 1Ry = 13.6eV \text{ (atomare Energieeinheit)}} \cdot \frac{2.21}{r_S^2} N. \quad (4.102)$$

Elementare Anregungen

Die elementaren Anregungen aus dem Fermi-See sind Teilchen-Loch-Paare,

$$|\Phi\rangle = a_{\vec{k}_2, \sigma_2}^\dagger a_{\vec{k}_1, \sigma_1} |\Phi_0\rangle, \quad (4.103)$$

Die Gesamtenergie des angeregten Zustands ist

$$\epsilon_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} = E^{(0)} + \epsilon_{\vec{k}_2} - \epsilon_{\vec{k}_1}, \quad (4.104)$$

womit sich für die Anregungsenergie folgender Ausdruck ergibt (siehe Abbildung 4.5):

$$\begin{aligned}\tilde{\epsilon}_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} &= \epsilon_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} - E^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2 - k_1^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left((\vec{k}_1 + \vec{q})^2 - k_1^2 \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(q^2 + 2\vec{k}_1 \cdot \vec{q} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} q(q + 2k_1 \cos \theta).\end{aligned}\quad (4.105)$$

Für \vec{k}_1 und \vec{k}_2 gilt

$$|\vec{k}_1| \leq k_F, \quad (4.106)$$

$$|\vec{k}_2| = |\vec{k}_1 + \vec{q}| = \sqrt{k_1^2 + q^2 + 2k_1 q \cos \theta} > k_F. \quad (4.107)$$

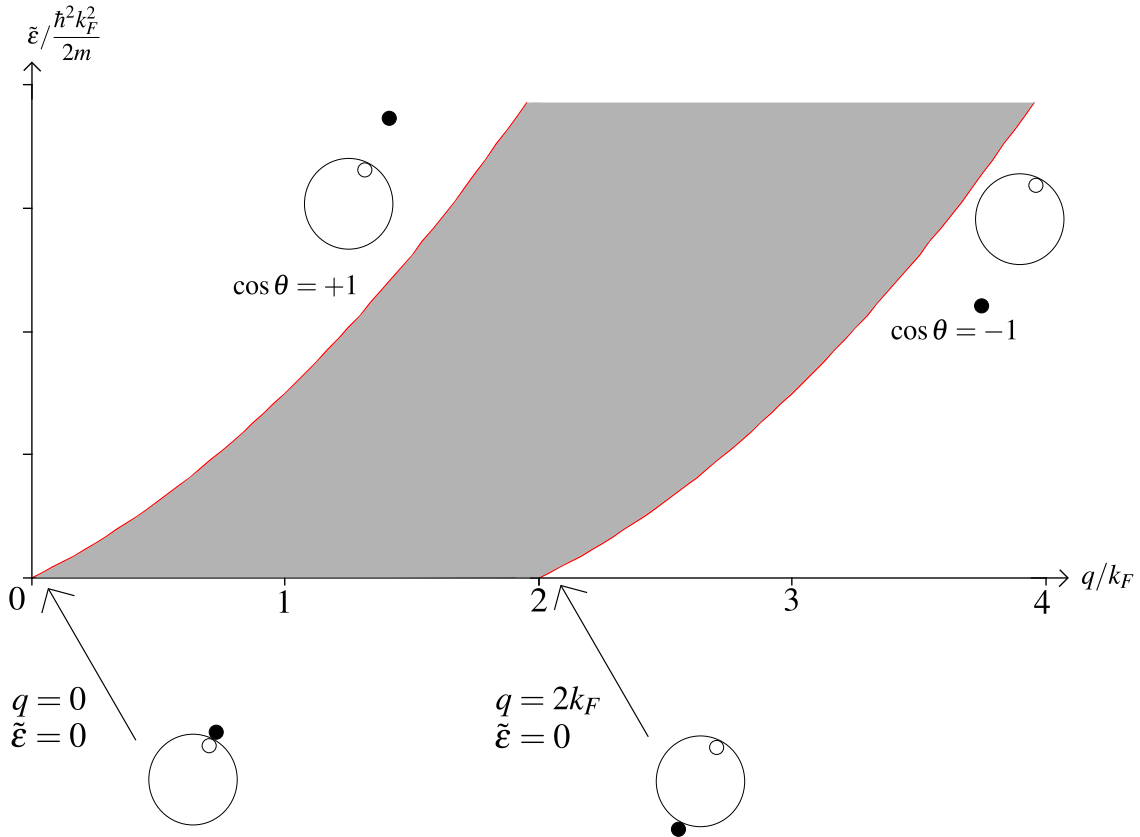


Abbildung 4.5: Dispersion der elementaren Anregungen des Fermi-Gases. $\tilde{\epsilon}$ und q bezeichnen Energie und Impuls des angeregten Teilchen-Loch-Paares. Die linke Parabel entspricht $q(q + 2k_F)$ in (4.105) und die rechte $q(q - 2k_F)$. Zwischen beiden Parabeln sind alle Anregungen möglich, je nachdem unter welchem Winkel θ der Impulsübertrag erfolgt.

Dichte und Dichtekorrelation

- (i) Das freie und nicht-wechselwirkende Elektronengas ist homogen, denn für die Dichte ergibt sich

$$\begin{aligned}
n(\vec{r}) &= \langle \Phi_0 | \hat{n}(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle = \sum_{\sigma} \langle \Phi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{p}'\cdot\vec{r}} \langle \Phi_0 | a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}',\sigma} | \Phi_0 \rangle \\
&\stackrel{(4.96)}{=} \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} e^{-i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} \delta_{\vec{p},\vec{p}'} n_{\vec{p},\sigma} \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p},\sigma} n_{\vec{p},\sigma} = \frac{N}{V} = n = \text{const.}
\end{aligned}$$

- (ii) Hingegen ist die Einteilchenkorrelationsfunktion nicht homogen,

$$\begin{aligned}
G_{\sigma}(\vec{r} - \vec{r}') &:= \langle \Phi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r}') | \Phi_0 \rangle \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{p}'\cdot\vec{r}'} \underbrace{\langle \Phi_0 | a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}',\sigma} | \Phi_0 \rangle}_{=\delta_{\vec{p},\vec{p}'} n_{\vec{p},\sigma}} \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} n_{\vec{p},\sigma} \tag{4.108} \\
&\xrightarrow{\text{Kontinu-}} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \theta(\hbar k_F - |\vec{p}|) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^{\hbar k_F} dp p^2 \underbrace{\int_{-1}^1 d(\cos\theta) e^{ip|\vec{r}-\vec{r}'| \cos\theta}}_{=\frac{1}{ipr}(e^{ipr}-e^{-ipr})}.
\end{aligned}$$

Die Einteilchenkorrelationsfunktion ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein Teilchen bei \vec{r} fehlt, wenn bei \vec{r}' ein Teilchen aus dem Fermi-See entfernt wurde. Mittels der Substitution $x := pr \Rightarrow p = \frac{x}{r} \Rightarrow dp = \frac{dx}{r}$ folgt weiter, dass

$$\begin{aligned}
G_{\sigma}(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^{\hbar k_F} dp p \sin(pr) \\
&= \frac{1}{2\pi^2 r^3} \int_0^{\hbar k_F r} dx x \sin x
\end{aligned}$$

Und durch partielle Integration $(-x \cos x)' = x \sin x - \cos x$,

$\Rightarrow \int_a^b x \sin x = -x \cos x \Big|_a^b + \int_a^b \cos x = -x \cos x + \sin x \Big|_a^b$ erhalten wir schließlich,

$$G_\sigma(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{2\pi^2 r^3} (\sin(k_F r) - k_F r \cos(k_F r))$$

$$\stackrel{(4.98)}{=} \frac{3n \sin(k_F r) - k_F r \cos(k_F r)}{2 (k_F r)^3} \quad (\text{siehe Abbildung 4.6}). \quad (4.109)$$

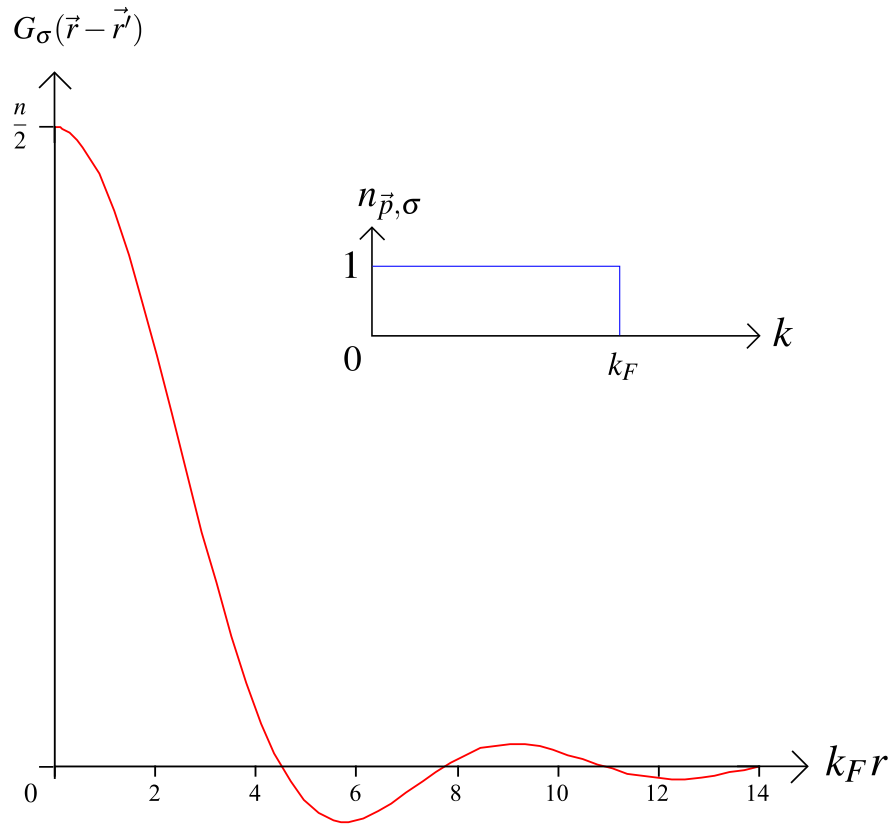


Abbildung 4.6: Die Einteilchenkorrelationsfunktion im Ortsraum ist die Fouriertransformierte in drei Dimensionen (siehe (4.108)) der Dichte im Impulsraum (kleine Figur). Hier ist $r = |\vec{r} - \vec{r}'|$.

(iii) Paarverteilungsfunktion

Wegen dem Pauli-Prinzip sind auch nicht-wechselwirkende Fermionen korreliert, falls sie denselben Spin haben. Entferne ein Teilchen am Ort \vec{r} :

$$|\Phi'(\vec{r}, \sigma)\rangle = \psi_\sigma(\vec{r})|\Phi_0\rangle.$$

Dichteverteilung für Φ' :

$$\begin{aligned} \langle \Phi'(\vec{r}, \sigma) | \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') | \Phi'(\vec{r}, \sigma) \rangle &= \langle \Phi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r}) | \Phi_0 \rangle \\ &=: \left(\frac{n}{2}\right)^2 \underbrace{g_{\sigma, \sigma'}(\vec{r} - \vec{r}')}_{\substack{=: \text{Paarverteilungs-} \\ \text{funktion}}} . \end{aligned}$$

Mit anderen Worten: $g_{\sigma, \sigma'}(\vec{r} - \vec{r}')$ beschreibt die Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Teilchen mit σ' bei \vec{r}' zu finden, falls mit Sicherheit ein Teilchen mit σ bei \vec{r} vorgefunden und entfernt wurde. Im k -Raum finden wir

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma, \sigma'}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r} - i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{r}'} \langle \Phi_0 | a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}, \sigma'}^{\dagger} a_{\vec{q}', \sigma'} a_{\vec{k}', \sigma} | \Phi_0 \rangle . \quad (4.110)$$

Für $\sigma \neq \sigma'$ muss zudem $\vec{k} = \vec{k}'$ und $\vec{q} = \vec{q}'$ gelten, damit der Erwartungswert auf der rechten Seite von (4.110) von Null verschieden ist. Daraus folgt aber

$$g_{\sigma, \sigma'}(\vec{r} - \vec{r}') = 1, \quad (\sigma \neq \sigma').$$

Für $\sigma = \sigma'$ gibt es zwei Möglichkeiten, ($\vec{k} = \vec{k}'$ und $\vec{q} = \vec{q}'$) oder ($\vec{k} = \vec{q}'$ und $\vec{q} = \vec{k}'$), um einen von Null verschiedenen Erwartungswert vorzufinden. Wegen $\left(a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger}\right)^2 = 0$ muss $\vec{k} \neq \vec{q}$ gelten.

$$\begin{aligned} &\langle \Phi_0 | a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}', \sigma} a_{\vec{k}', \sigma} | \Phi_0 \rangle \\ &= \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \langle \Phi_0 | a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}, \sigma} a_{\vec{k}, \sigma} | \Phi_0 \rangle + \delta_{\vec{k}, \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{k}'} \langle \Phi_0 | a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}, \sigma} a_{\vec{q}, \sigma} | \Phi_0 \rangle \\ &= \left(\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} - \delta_{\vec{k}, \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{k}'} \right) \underbrace{\langle \Phi_0 | a_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}, \sigma} a_{\vec{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}, \sigma} | \Phi_0 \rangle}_{= n_{\vec{k}, \sigma} n_{\vec{q}, \sigma}} . \end{aligned}$$

Aus (4.110) wird damit

$$\begin{aligned} \left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma, \sigma}(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \left(1 - e^{-i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}\right) n_{\vec{k}, \sigma} n_{\vec{q}, \sigma} \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^2 - \left(G_{\sigma}(\vec{r} - \vec{r}')\right)^2 . \end{aligned} \quad (4.111)$$

Aus (4.109) folgt dann

$$g_{\sigma, \sigma}(\vec{r} - \vec{r}') = 1 - \frac{9}{x^6} (\sin x - x \cos x)^2, \quad (4.112)$$

mit $x := k_F |\vec{r} - \vec{r}'|$, siehe Abbildung 4.7.

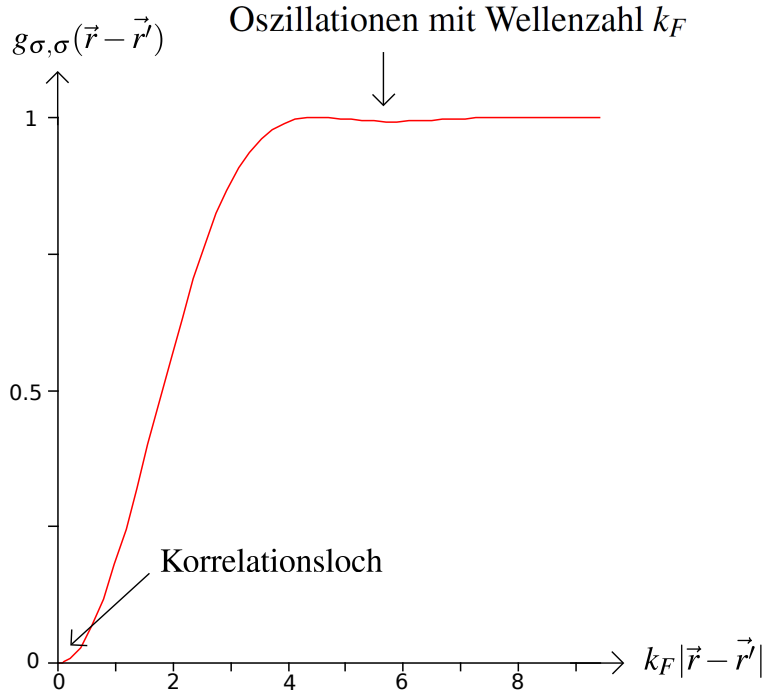


Abbildung 4.7: Die Paarverteilungsfunktion oszilliert mit der Wellenzahl k_F . Das Korrelationsloch ist Folge des Pauli-Prinzips: wird ein Teilchen mit \vec{r}, σ entfernt, kann kein zweites mehr da sein.

Dafür gibt es folgende Erklärung:

- Wegen dem Pauli-Prinzip kann es höchstens 1 Teilchen am Ort \vec{r} mit Spin σ geben. Wird dieses entfernt, ist *kein* Teilchen mit \vec{r}, σ mehr vorhanden:

$$g_{\sigma,\sigma}(0) = 0, \quad (4.113)$$

„Austauschloch“ oder „Korrelationsloch“.

- Weil im Fermisee $|\Phi_0\rangle$ die Elektronen höchstens den Impuls $\hbar k_F$ besitzen, hat wegen der Heisenbergschen Unschärferelation $\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar/2$ das Korrelationsloch die Breite $\Delta x \approx k_F^{-1}$.
- Aus demselben Grund $p \leq \hbar k_F$ oszilliert die Paarverteilungsfunktion mit der Wellenzahl k_F .

Für die spinunabhängige (gemittelte) Paarverteilungsfunktion findet man

$$\frac{1}{4} \sum_{\sigma,\sigma'} g_{\sigma,\sigma'}(\vec{r}) = \frac{1}{2} (1 + g_{\sigma,\sigma}(\vec{r})) \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{2} & |\vec{r}| \rightarrow 0, \\ 1 & |\vec{r}| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (4.114)$$

4.2.2 Wechselwirkung in Hartree-Fock Näherung

Wir kennen bereits die Energie des Grundzustands

$$E^{(0)} = \frac{3}{5} N \epsilon_F = 1 \text{Ry} \frac{2.21}{r_S^2} N. \quad (4.115)$$

Jetzt: 1. Ordnung Störungstheorie für die Wechselwirkung $\propto v_{\vec{q}}$, siehe (4.89):

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q} \neq 0 \\ \sigma, \sigma'}} \frac{4\pi}{q^2} \langle \Phi_0 | \underbrace{a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger \overbrace{a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}',\sigma'}}^{\substack{=-a_{\vec{k}',\sigma'}^\dagger a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}}} a_{\vec{k},\sigma}}}_{\propto \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}} | \Phi_0 \rangle \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0, \sigma} \frac{4\pi}{q^2} n_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} n_{\vec{k},\sigma} \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2V} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0} \frac{4\pi}{q^2} \theta(k_F - |\vec{q} + \vec{k}|) \theta(k_F - k) \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2V} 2 \cdot 4\pi \frac{V^2}{(2\pi)^6} \int d^3k \theta(k_F - k) \int d^3k' \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \theta(k_F - k'). \quad (4.116) \end{aligned}$$

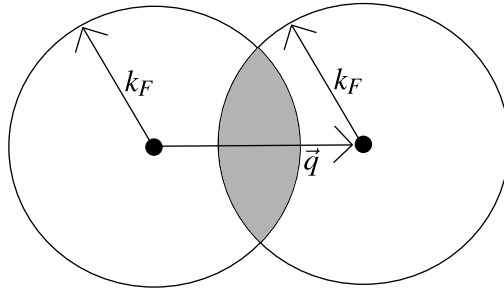


Abbildung 4.8: Das Integrationsgebiet (grau schattiert) zur Berechnung des Wechselwirkungsintegrals (4.116).

\vec{k}' -Integration:

$$\begin{aligned} &-\frac{e^2}{\epsilon_0} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \theta(k_F - k') \\ &= -\frac{e^2}{4\pi^2\epsilon_0} k_F \left(1 + \frac{k_F^2 - k^2}{2kk_F} \log \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right). \end{aligned}$$

Ausführen der \vec{k} -Integration führt zu

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= -\frac{e^2 k_F V}{4\pi^2 \epsilon_0} \int_{k < k_F} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \underbrace{\left(1 + \frac{k_F^2 - k^2}{2kk_F} \log \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right)}_{=: 2F(k/k_F)} \\ &= -N \frac{3}{4} \frac{e^2 k_F}{4\pi^2 \epsilon_0} = -\text{Ry} \frac{0.916}{r_S} N. \end{aligned}$$

Hier haben wir wieder den Seitz-Radius verwendet, der bereits in (4.101) eingeführt wurde. Zusammengefasst ergeben kinetische (4.102) und potentielle Energie

$$\frac{E}{N} = \text{Ry} \left(\frac{2.21}{r_S^2} - \frac{0.916}{r_S} + \dots \right). \quad (4.117)$$

$r_S \ll 1 \Rightarrow$ große Energiedichte!

- 1. Term: Kinetische Energie.
- 2. Term: Coulomb-Wechselwirkung, Austauschterm (negativ). (direkter Term mit positivem Vorzeichen wegen $\vec{q} \neq 0$ nicht vorhanden;)
- $E(r_S)$ hat ein Minimum bei $r_S = 4.83$ mit

$$\frac{E(r_S = 4.83)}{N} = -1.29 \text{ eV}.$$

Vergleiche einfache Metalle: Natrium $r_S = 3.96$, $\frac{E}{N} = -1.13 \text{ eV}$. (Beachte (4.101): mit n geht eine materialabhängige Größe in den Seitz-Radius ein.)

Dies liegt eigentlich außerhalb des zulässigen Bereiches $r_S \ll 1$.

- Höhere Korrekturen erhält man mit der *random phase approximation* (RPA), in drei Dimensionen,

$$\frac{E}{N} = \text{Ry} \left(\underbrace{\frac{2.21}{r_S^2} - \frac{0.916}{r_S}}_{\text{Hartree-Fock}} + \underbrace{0.062 \ln r_S - 0.096 + \dots}_{\text{„Korrelation“}} \right). \quad (4.118)$$

- $r_S \gg 1$: Wigner-Kristall (in dreidimensionalen Metallen noch nicht beobachtet).

Änderung der Energieniveaus*

Wir behandeln die Zeitentwicklung in der Heisenbergdarstellung mit den Hamiltonoperatoren

$$H = H_0 + H_C, \quad (4.119)$$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{=\epsilon_0(\vec{k})} a_{\vec{k}, \sigma}^\dagger a_{\vec{k}, \sigma}, \quad (4.120)$$

$$H_C = \frac{1}{2V} \frac{e^2}{\epsilon_0} \sum_{\substack{\vec{p}, \vec{k}, \vec{q} \neq 0 \\ \sigma, \sigma'}} \frac{1}{q^2} a_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^\dagger a_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma'}^\dagger a_{\vec{k}, \sigma'} a_{\vec{p}, \sigma}. \quad (4.121)$$

Wir stellen die Bewegungsgleichung des Vernichtungsoperators auf (ohne Wechselwirkung, setze $\hbar = 1$):

$$\dot{a}_{\vec{k}, \sigma}(t) = i [H_0, a_{\vec{k}, \sigma}(t)] = -i\epsilon_0(\vec{k}) a_{\vec{k}, \sigma}(t). \quad (4.122)$$

Definition der Korrelationsfunktion:

$$G_{\vec{k}, \sigma}(t) = \langle \Phi_0 | a_{\vec{k}, \sigma}(t) a_{\vec{k}, \sigma}^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle \quad (4.123)$$

Da lediglich $a_{\vec{k}, \sigma}(t)$ zeitabhängig ist, folgt aus (4.122) die Differentialgleichung

$$\dot{G}_{\vec{k}, \sigma}(t) = -i\epsilon_0(\vec{k}) G_{\vec{k}, \sigma}(t) \quad (4.124)$$

mit der Lösung

$$G_{\vec{k}, \sigma}(t) = e^{-i\epsilon_0(\vec{k})t} G_{\vec{k}, \sigma}(t=0) = e^{-i\epsilon_0(\vec{k})t} \left(1 - n_{\vec{k}, \sigma}(t=0) \right).$$

$$\begin{aligned} G_{\vec{k}, \sigma}(t) &= e^{-i\epsilon_0(\vec{k})t} G_{\vec{k}, \sigma}(t=0) \\ &= e^{-i\epsilon_0(\vec{k})t} \left(1 - n_{\vec{k}, \sigma}(t=0) \right). \end{aligned}$$

Bewegungsgleichung von $a_{\vec{k}, \sigma}$ und $G_{\vec{k}, \sigma}$ mit Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} \dot{a}_{\vec{k}, \sigma} &= -i \left(\epsilon_0 a_{\vec{k}, \sigma} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{q} \neq 0, \sigma'} \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} a_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma'}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma} a_{\vec{p}, \sigma'} \right), \\ \dot{G}_{\vec{k}, \sigma}(t) &= -i \left(\epsilon_0 G_{\vec{k}, \sigma}(t) - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{q} \neq 0, \sigma'} \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \left\langle a_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma'}^\dagger(t) a_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}(t) a_{\vec{p}, \sigma'}(t) a_{\vec{k}, \sigma}^\dagger(0) \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (4.125)$$

Auf der rechten Seite von (4.125) tritt eine höhere Korrelationsfunktion auf. Für diese könnte wieder eine Bewegungsgleichung gefunden werden, etc., aber dieses System von Gleichungen wäre unendlich groß (nicht geschlossen). Stattdessen brechen wir ab mit der Faktorisierungsnäherung

$$\begin{aligned}
& \langle a_{\vec{p}+\vec{q},\sigma'}^\dagger(t) a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}(t) a_{\vec{p},\sigma'}(t) a_{\vec{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle \\
& \approx \langle \langle a_{\vec{p}+\vec{q},\sigma'}^\dagger(t) a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}(t) \rangle \langle a_{\vec{p},\sigma'}(t) a_{\vec{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle \rangle \\
& = \langle a_{\vec{p}+\vec{q},\sigma'}^\dagger(t) a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}(t) \rangle \langle a_{\vec{p},\sigma'}(t) a_{\vec{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle \\
& = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\vec{p},\vec{k}} \langle a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^\dagger(t) a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}(t) \rangle \langle a_{\vec{k},\sigma}(t) a_{\vec{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle.
\end{aligned} \tag{4.126}$$

Begründung:

$$\begin{aligned}
a_{\vec{p},\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma'} &= \underbrace{\langle a_{\vec{p},\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma'} \rangle}_{\text{mittleres Feld („mean field“)}} + \underbrace{a_{\vec{p},\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma'} - \langle a_{\vec{p},\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma'} \rangle}_{\text{QM Fluktuationen} \ll \text{mittl. Feld}} \\
&\approx \langle a_{\vec{p},\sigma}^\dagger a_{\vec{k},\sigma'} \rangle.
\end{aligned}$$

Die Fluktuationen werden also vernachlässigt. Damit

$$\begin{aligned}
\dot{G}_{\vec{k},\sigma}(t) &\stackrel{(4.125)}{=} -i \left(\epsilon_0(\vec{k}) - \frac{1}{V} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} n_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \right) G_{\vec{k},\sigma}(t) \\
\Rightarrow G_{\vec{k},\sigma}(t) &= e^{-i\epsilon(\vec{k})t} G_{\vec{k},\sigma}(t=0),
\end{aligned}$$

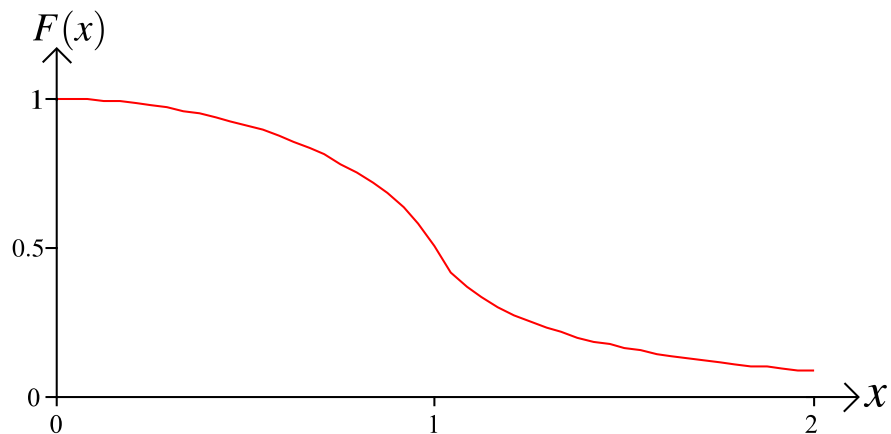
wie (4.125), aber

$$\epsilon(\vec{k}) = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{=\epsilon_0(\vec{k})} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}'} \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|^2} n_{\vec{k}',\sigma}.$$

Renormierung der Energie durch Coulomb-Wechselwirkung:

$$\begin{aligned}
\epsilon(\vec{k}) &= \epsilon_0(\vec{k}) + \Delta\epsilon(\vec{k}), \\
\Delta\epsilon(\vec{k}) &\stackrel{\text{Kontinu-}}{=} - \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|} \theta(k_F - k') \\
&= - \underbrace{\frac{e^2 k_F}{4\pi^2 \epsilon_0} \left(1 + \frac{k_F^2 - k^2}{2k k_F} \log \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right)}_{=2F(k/k_F)}.
\end{aligned} \tag{4.127}$$

Der Verlauf der Funktion $F(x)$ ist in der folgenden Abbildung gezeigt. Die Energie-Impuls-Beziehung (4.127) ist in Abbildung 4.9 dargestellt.



- Die Hartree-Fock-Energieniveaus sind gegenüber den freien abgesenkt.
- Diese Absenkung wird aber in der Hartree-Fock-Näherung *überschätzt*.
- Die Hartree-Fock-Näherung kann nicht nur für freie Teilchen gemacht werden, sondern auch für 1-Teilchen Potentiale $U(\vec{r})$, z.B. für *Atome* mit $U(\vec{r}) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$.

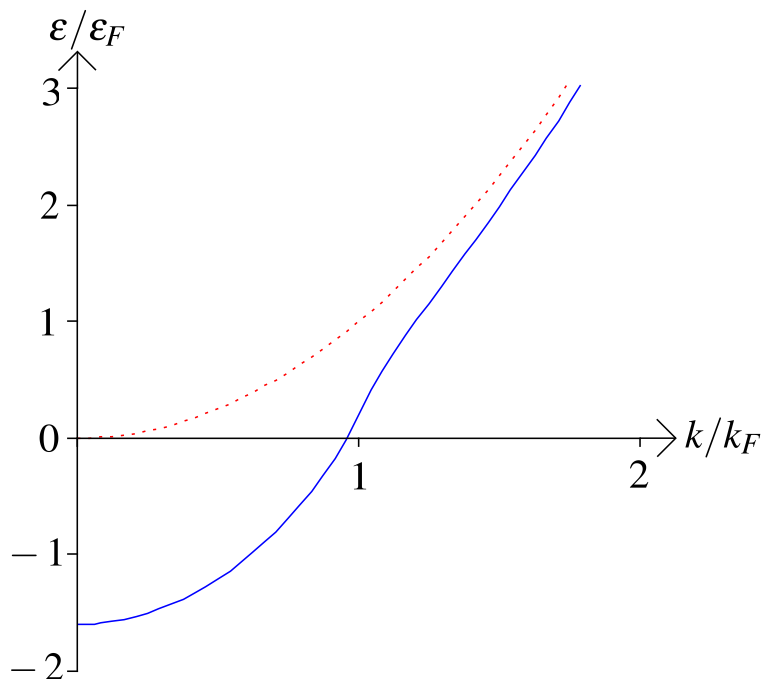


Abbildung 4.9: Die Dispersionen ohne Wechselwirkung (gepunktete Linie, rot) und für die Hartree-Fock-Näherung (ausgezogene Linie, blau). Da die Hartree-Fock-Näherung die Absenkung überschätzt, liegt die tatsächliche Dispersion zwischen beiden Linien.

4.3 Bosonen

Wir betrachten nun freie Bosonen, also wiederum $U(\vec{r}) \equiv 0$. Der einzige Unterschied zum freien Fermi-Gas ist die *Statistik*. Bei tiefen Temperaturen führt dieser Unterschied allerdings zu einem völlig anderen Verhalten von Bosonen gegenüber Fermionen.

4.3.1 Nicht-wechselwirkende Bosonen: Ideales Bose-Gas

In diesem, einfachsten, Fall ist für Bosonen mit Spin 0 (mit $\hbar = 1$)

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}. \quad (4.128)$$

Weil $[H, \hat{n}_{\vec{k}}] = [H, a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}] = 0$, können die Eigenzustände von H als Besetzungszustände (also Eigenzustände von allen $\hat{n}_{\vec{k}}$) gewählt werden:

$$|\Phi\rangle = |n_{\vec{p}_0}, n_{\vec{p}_1}, n_{\vec{p}_2}, \dots\rangle, \quad (4.129)$$

mit $n_{\vec{p}_i} = 0, 1, 2, 3, \dots$ (Bosonen). Der Grundzustand mit Energie $E = 0$ ist $|N, 0, 0, \dots\rangle$ wobei die erste Besetzungszahl den Zustand $\vec{k} = 0$ bezeichnet. Der Erwartungswert der Teilchendichte im Ortsraum ist

$$\langle \Phi | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) | \Phi \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} \underbrace{\langle \Phi | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}'} | \Phi \rangle}_{\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} n_{\vec{k}}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = \frac{N}{V} = n, \quad (4.130)$$

d.h. die Teilchendichte ist für Eigenzustände von H *homogen* (wie bei Fermionen).

Paarverteilungsfunktion

Die Paarverteilungsfunktion für Bosonen ist

$$\begin{aligned} n^2 g(\vec{r} - \vec{r}') &:= \langle \Phi | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) | \Phi \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \vec{q}'} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\vec{q} \cdot \vec{r}' + i\vec{q}' \cdot \vec{r} + i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \langle \Phi | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}'} a_{\vec{k}'} | \Phi \rangle. \end{aligned}$$

Der Erwartungswert $\langle \Phi | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}'} a_{\vec{k}'} | \Phi \rangle$ *verschwindet nicht*, falls

$$\begin{aligned} \text{entweder} \quad & \vec{k} = \vec{k}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{q}' \\ \text{oder} \quad & \vec{k} = \vec{q}' \quad \text{und} \quad \vec{q} = \vec{k}'. \end{aligned}$$

Der Fall $\vec{k} = \vec{q}$ (den es bei Fermionen nicht gibt) muss hier speziell betrachtet werden. Man findet:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} a_{\vec{k}} | \Phi \rangle &= (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{q}}) \left(\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \langle \Phi | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} a_{\vec{k}} | \Phi \rangle + \delta_{\vec{k}, \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{k}'} \langle \Phi | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{q}} | \Phi \rangle \right) \\ &\quad + \delta_{\vec{k}, \vec{q}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \langle \Phi | a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{k}} | \Phi \rangle \\ &= (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{q}}) (\delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} + \delta_{\vec{k}, \vec{q}'} \delta_{\vec{q}, \vec{k}'}) n_{\vec{k}} n_{\vec{q}} + \delta_{\vec{k}, \vec{q}} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} n_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} - 1). \end{aligned} \quad (4.131)$$

Somit wird

$$\begin{aligned} &\langle \Phi | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) | \Phi \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \left(\sum_{\vec{k}, \vec{q}} (1 - \delta_{\vec{k}, \vec{q}}) \left(1 + e^{-i(\vec{k} - \vec{q}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \right) n_{\vec{k}} n_{\vec{q}} + \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} - 1) \right) \\ &= \frac{1}{V^2} \left(\sum_{\vec{k}, \vec{q}} n_{\vec{k}} n_{\vec{q}} - \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}^2 + \left| \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} n_{\vec{k}} \right|^2 - \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}^2 + \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}^2 - \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \right) \\ &= n^2 + \underbrace{\left| \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} n_{\vec{k}} \right|^2}_{\substack{\text{bei Fermionen} \\ \text{umgekehrtes} \\ \text{Vorzeichen}}} - \underbrace{\frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} + 1)}_{\substack{\text{bei Fermionen} \\ \text{nicht vorhanden}}}. \end{aligned} \quad (4.132)$$

Beispiele und Spezialfälle:

- (i) Sind alle Bosonen im gleichen Zustand \vec{p}_0 , z.B. im Grundzustand, dann ist die Paarverteilungsfunktion unabhängig vom Ort,

$$n^2 g(\vec{r} - \vec{r}') = n^2 + n^2 - \frac{1}{V^2} N(N + 1) = \frac{N(N - 1)}{V^2} = \frac{N}{V} \frac{N - 1}{V}. \quad (4.133)$$

Der Faktor N/V steht für die Wahrscheinlichkeit, das erste Teilchen zu detektieren und der Faktor $(N - 1)/V$ für die, das zweite Teilchen zu detektieren.

- (ii) Sind die Teilchen über die Impulswerte Gauß-verteilt,

$$n_{\vec{k}} = \frac{(2\pi)^3 n}{(\sqrt{\pi} \Delta)^3} e^{-(\vec{k} - \vec{k}_0)^2 / \Delta^2}, \quad (4.134)$$

folgt mit der Normierung

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} n_{\vec{k}} = n, \quad (4.135)$$

dass

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} n_{\vec{k}} = n e^{-\Delta^2 (\vec{r} - \vec{r}')^2 / 4} e^{-i\vec{k}_0 \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}$$

und

$$\frac{1}{V} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{V} \left(\frac{(2\pi)^3 n}{(\sqrt{\pi}\Delta)^3} \right)^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-2(\vec{k}-\vec{k}_0)^2/\Delta^2} \propto \frac{n^2}{V\Delta^3}.$$

Für große Volumina kann also der dritte Term in (4.132) vernachlässigt werden. Die Paarverteilungsfunktion wird dann

$$n^2 g(\vec{r} - \vec{r}') = n^2 \left(1 + e^{-\Delta^2(\vec{r}-\vec{r}')^2/2} \right), \quad (4.136)$$

siehe Abbildung 4.10.

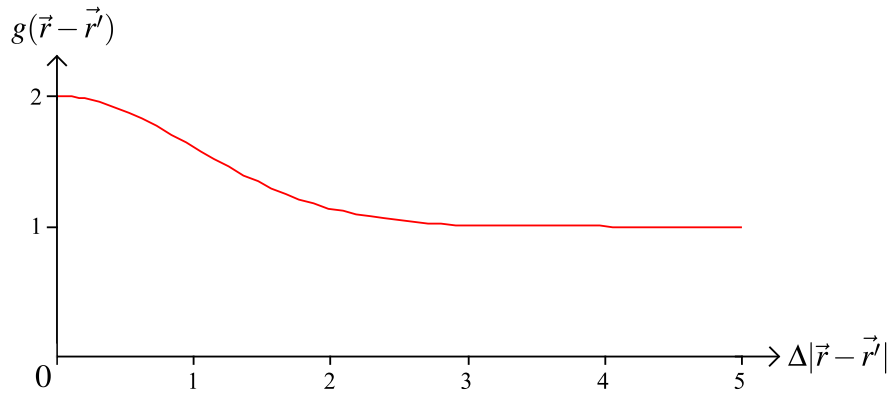


Abbildung 4.10: Für $|\vec{r} - \vec{r}'|\Delta \ll 1$ ist $g \approx 2$, d.h. die Wahrscheinlichkeit, zwei Bosonen am *selben* Ort zu finden, ist *erhöht*, man spricht von *particle bunching* (Hanbury Brown und Twiss, 1956).

Thermodynamik: Bose-Einstein-Kondensation*

Wir werden nun zeigen, dass ein freies, nicht-wechselwirkendes Bose-Gas bei endlicher Temperatur T_c einen Phasenübergang durchläuft, die sogenannte Bose-Einstein-Kondensation. Für $T < T_c$ befindet sich ein makroskopischer Anteil der Teilchen im Einteilchen Grundzustand (also $\vec{k} = 0$). Zur Beschreibung des Phasenübergangs benötigen wir aber einige wenige Begriffe aus der statistischen Mechanik, insbesondere die großkanonische Zustandssumme,

$$Z(T, V, \mu) := \text{Tr} \left(e^{-\beta(H - \mu\hat{N})} \right). \quad (4.137)$$

Die großkanonische Gesamtheit (Ensemble) beschreibt ein System, welches an ein Energie- und Teilchenreservoir gekoppelt ist. Letzteres bedeutet, dass die Teilchenzahl N nicht fixiert ist. Der Teilchenaustausch wird durch das chemische Potential μ , der Energieaustausch durch die Temperatur T (bzw. die inverse Temperatur $\beta = 1/k_B T$) des Reservoirs kontrolliert.

Mit dem freien Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}}, \quad (4.138)$$

wobei $\epsilon_k = k^2/2m$, und dem Operator der Gesamtteilchenzahl

$$\hat{N} = \sum_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}} \quad (4.139)$$

können wir die Spur (Tr) in (4.137) in der Besetzungszahlbasis auswerten,

$$Z = \sum_{\{n_{\vec{k}}\}} e^{-\beta \sum_{\vec{k}} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) n_{\vec{k}}} = \prod_{\vec{k}} \left(\sum_{n_{\vec{k}}} (e^{-\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)})^{n_{\vec{k}}} \right).$$

Für Fermionen kommen immer nur die Summanden $n_{\vec{k}} = 0, 1$ vor, für Bosonen handelt es sich um die geometrische Reihe, also

$$Z = \begin{cases} \prod_{\vec{k}} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}} & \text{für Bosonen und} \\ \prod_{\vec{k}} (1 + e^{-\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}) & \text{für Fermionen.} \end{cases} \quad (4.140)$$

In der statistischen Mechanik berechnet man den Erwartungswert einer Observablen \hat{O} mit

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(\hat{O} e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} \right). \quad (4.141)$$

Für die Besetzungszahlen gilt also⁴

$$\begin{aligned} n_{\vec{k}} &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(\hat{n}_{\vec{k}} e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} \right) = \frac{1}{Z} \sum_{\{n_{\vec{q}}\}} n_{\vec{k}} e^{-\beta \sum_{\vec{q}} (\epsilon_{\vec{q}} - \mu) n_{\vec{q}}} \\ &= -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \sum_{\{n_{\vec{q}}\}} e^{-\beta \sum_{\vec{q}} (\epsilon_{\vec{q}} - \mu) n_{\vec{q}}} \\ &= -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \log Z \\ &= \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} \Omega. \end{aligned} \quad (4.142)$$

⁴Die Besetzungszahlen sind in der großkanonischen Gesamtheit nicht fest vorgegeben. Die statistische Mechanik zeigt aber, dass sie extrem scharf um den Erwartungswert verteilt sind. Statt $\langle n_{\vec{k}} \rangle$ wird daher oft einfach $n_{\vec{k}}$ geschrieben.

Das zur großkanonischen Gesamtheit gehörige thermodynamische Potential ist das *großkanonische Potential* Ω . Es ist definiert als die Differenz zwischen freier Energie und gibbscher Enthalpie und erfüllt

$$\Omega(T, V, \mu) = -\frac{1}{\beta} \log Z = \begin{cases} -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}} \log \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}} & \text{für Bosonen,} \\ -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}} \log (1 + e^{-\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)}) & \text{für Fermionen.} \end{cases} \quad (4.143)$$

Aus der rechten Seite erhält man mit (4.142)

$$n_{\vec{k}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)} \mp 1}. \quad (4.144)$$

Das obere Zeichen gilt für Bosonen (*Bose-Einstein-Verteilung*), das untere für Fermionen (*Fermi-Dirac-Verteilung*).

Mit der Bose-Einstein-Verteilung findet man nun für die Dichte von Bosonen, $n = N/V$:

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = \frac{\sum_{\vec{k} \neq 0} n_{\vec{k}}}{V} + \frac{n_0}{V} \\ &\stackrel{\text{Kontinu-}}{=} \frac{1}{V} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)} - 1} + \underbrace{\frac{1}{V} \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}}_{\substack{\text{divergiert} \\ \text{für } \beta\mu \rightarrow 0}} \\ &= \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \frac{1}{e^{\beta(\hbar^2 k^2/2m - \mu)} - 1} + \frac{1}{V} \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}. \end{aligned}$$

Mit den Substitutionen

$$\begin{aligned} x &:= \sqrt{\frac{\beta}{2m}} \hbar k, & k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \beta}} x, & dk &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \beta}} dx \quad \text{und} \\ z &:= e^{\beta\mu} \quad (\text{Fugazität}) \end{aligned}$$

folgt

$$n = \underbrace{\frac{4\pi}{(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2 \beta}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dx x^2 \frac{1}{z^{-1} e^{x^2} - 1}}_{=\frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3}} + \frac{1}{V} \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1},$$

wobei $\lambda := \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$ die *thermischen Wellenlänge* und $g_{3/2}(z) := \sum_{l=0}^\infty \frac{z^l}{l^{\frac{3}{2}}}$ ist. Die Dichte ist also

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \underbrace{\frac{z}{1-z}}_{=n_0}. \quad (4.145)$$

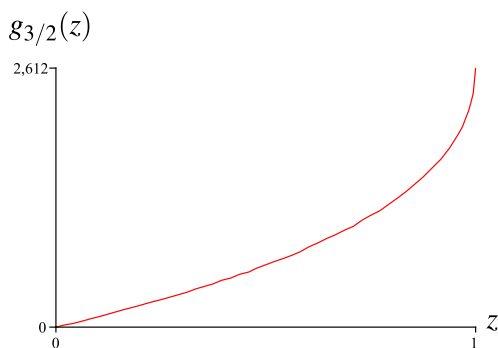


Abbildung 4.11: Die Funktion $g_{3/2}(z)$. Man beachte die Werte $g_{3/2}(0) = 0$ und $g_{3/2}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{3/2}} = \zeta(\frac{3}{2}) = 2.612$.

Wegen $n_0 \geq 0$ muss $0 \leq z < 1$ gelten. Für diesen Bereich ist $g_{3/2}(z)$ in Abbildung 4.11 geplottet. Man kann (4.145) umschreiben zu

$$\lambda^3 \frac{n_0}{V} = n\lambda^3 - g_{3/2}(z), \quad (4.146)$$

wobei $\lambda = \lambda(T)$, $n_0 = n_0(\mu)$ und $z = z(T, \mu)$. Nun können wir bei gegebener Temperatur T und Teilchendichte n zwei Fälle unterscheiden:

- (i) Falls $n\lambda^3 \leq g_{3/2}(1)$, kann sich das chemische Potential μ so einstellen, dass $n\lambda^3 = g_{3/2}(z)$ gilt (mit $z = e^{\beta\mu} < 1$). Dies hat $\frac{n_0}{V} = 0$ ($V \rightarrow \infty$) zur Folge.
- (ii) Für $n\lambda^3 > g_{3/2}(1)$ muss stets $\frac{n_0}{V} > 0$ bzw. $\frac{n_0}{N} = \frac{n_0}{nV} > 0$ gelten ($n = N/V = \text{const.}$). Für diese *Bose-Einstein-Kondensation* gibt es eine kritische Temperatur, die sich aus $n\lambda_c^3 = g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) = 2.612$ ergibt:

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2/mk_B}{(2.612/n)^{2/3}}, \quad (4.147)$$

wobei $\zeta(q) = \sum_{l=1}^{\infty} l^{-q}$ die Riemannsche Zetafunktion bezeichnet. Speziell für $T \rightarrow 0$ folgt $\lambda \rightarrow \infty$ und somit $n_0 \rightarrow N$. Abbildung 4.12 zeigt die relative Besetzung des Grundzustands in Abhängigkeit von der Temperatur.

4.3.2 Schwach wechselwirkendes, verdünntes Bose-Gas

In realen Bose-Gasen findet Wechselwirkung statt. Als Beispiel betrachten wir Helium. ^4He hat folgende Eigenschaften:

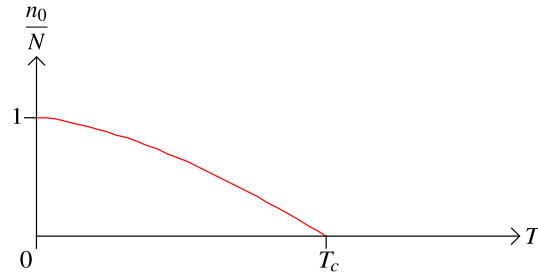


Abbildung 4.12: Der Anteil der Teilchen eines Bose-Gases im Einteilchen-Grundzustand als Funktion der Temperatur. Für $T < T_c$ liegt ein Bose-Einstein-Kondensat vor.

- gerade Anzahl Nukleonen (Protonen und Neutronen, beide Fermionen), sowie zwei Elektronen (ebenfalls Fermionen), welche stark gebunden sind, deswegen verhält sich das Atom wie ein Boson,
- Spin 0,
- flüssig bis $T = 0$ (bei Normaldruck) und
- supraflüssig unterhalb $T_\lambda = 2.18$ K.

Bose-Einstein-Kondensation wird für ${}^4\text{He}$ durch die nicht-wechselwirkende Theorie für $T_c = 3.14\text{K}$ vorhergesagt. Da diese Abweichung mit der Wechselwirkung zusammenhängt, versuchen wir, diese mit zu berücksichtigen. Das übliche Modell für die Wechselwirkung in He^4 ist das *Lennard-Jones-Potential*

$$V(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad (4.148)$$

mit $\epsilon \approx 1.4 \times 10^{-22}\text{J} = 0.9\text{meV}$ und $\sigma \approx 0.26\text{nm}$. Der erste Term beschreibt Abstoßung (*hard-core*) und der zweite Anziehung (*van-der-Waals*).

Bogoliubov-Theorie

Der Hamiltonoperator in Impulsdarstellung ist

$$H = \sum_{\vec{k}} \frac{k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} V_{\vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{p}} a_{\vec{k}} \quad (4.149)$$

mit $V_{\vec{q}} = \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r})$. Im Grundzustand *ohne* Wechselwirkung befinden sich alle Bosonen im Zustand $\vec{k} = 0$: $n_0 \equiv \langle \Phi | a_0^\dagger a_0 | \Phi \rangle = N$. Die Teilchen in diesem Zustand bezeichnen wir als „Kondensat“. Wir gehen davon aus, dass im Grundzustand bei *schwacher* Wechselwirkung der Zustand $\vec{k} = 0$ immer noch *makroskopisch* besetzt ist, d.h.

$$\frac{n_0}{N} > 0 \quad (N \rightarrow \infty), \quad (4.150)$$

typischerweise $n_0 \lesssim N$.

Näherung:

- (i) Wir vernachlässigen die Wechselwirkungen der Teilchen mit $\vec{k} \neq 0$ untereinander,
- (ii) berücksichtigen aber die Wechselwirkung von angeregten Teilchen mit kondensierten ($\vec{k} = 0$) Teilchen sowie
- (iii) von kondensierten Teilchen untereinander.

Damit wird (4.149) zu

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\vec{k}} \frac{k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \underbrace{\frac{1}{2V} V_0 a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0}_{(iii)} \\
 & + \underbrace{\frac{1}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} (V_0 + V_{\vec{k}}) a_0^\dagger a_0 a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger a_0 a_0 + a_0^\dagger a_0^\dagger a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \right)}_{(ii)} + \underbrace{O(a_{\vec{k}}^3)}_{(i)}.
 \end{aligned} \tag{4.151}$$

Die Wirkung von a_0 und a_0^\dagger auf den Zustand mit $n_0 \gg 1$ Teilchen im Kondensat ist näherungsweise

$$a_0 |n_0, \dots\rangle = \sqrt{n_0} |n_0 - 1, \dots\rangle \approx \sqrt{n_0} |n_0, \dots\rangle, \tag{4.152}$$

$$a_0^\dagger |n_0, \dots\rangle = \sqrt{n_0 + 1} |n_0 + 1, \dots\rangle \approx \sqrt{n_0} |n_0, \dots\rangle, \tag{4.153}$$

also können wir die Operatoren a_0 und a_0^\dagger durch die Zahl $\sqrt{n_0}$ ersetzen,

$$a_0 \approx a_0^\dagger \approx \sqrt{n_0}. \tag{4.154}$$

Damit wird (4.151) zu

$$H \approx \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} n_0^2 V_0 + \frac{n_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left((V_0 + V_{\vec{k}}) a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) \right). \tag{4.155}$$

Dabei ist die Teilchenzahl n_0 im Kondensat noch nicht bekannt, sie erfüllt aber sicher

$$\hat{N} = n_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}},$$

bzw.

$$n_0 = \hat{N} - \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}.$$

Für den zweiten Term in (4.155) ergibt sich dann

$$\frac{V_0}{2V} n_0^2 = \frac{V_0}{2V} \hat{N}^2 - \frac{\hat{N}V_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{V_0}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}' \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}'}$$

und damit für den Hamiltonoperator

$$H \approx \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{k^2}{2m} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{\hat{N}}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + \frac{\hat{N}^2}{2V} V_0 + \frac{\hat{N}}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^\dagger a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}) + \mathcal{O}(a_{\vec{k}}^4) \quad (4.156)$$

Terme mit ≥ 4
Erzeugern oder
Vernichtern

Hierbei wurde die Näherung der *Bogoliubov-Theorie*,

$$\sum_{\vec{k}, \vec{k}' \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}'} \approx \left(\sum_{\vec{k} \neq 0} n_{\vec{k}} \right)^2 \approx (N - n_0)^2 \rightarrow 0,$$

benutzt. In dieser Näherung ist H quadratisch in $a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^\dagger$, d.h. effektiv ein Einteilchenproblem. Durch geschickte Einteilchenbasiswahl kann (4.156) diagonalisiert werden und die entsprechenden Einteilchenzustände (Quasiteilchen) gefunden werden.

Als Ansatz zur Diagonalisierung von (4.156) verwenden wir

$$a_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}}^\dagger, \quad (4.157)$$

$$a_{\vec{k}}^\dagger = u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger + v_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}}, \quad (4.158)$$

wobei $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ reelle Koeffizienten sind. Diese Transformation heißt *Bogoliubov-Transformation*. Die neuen Operatoren $\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}}^\dagger$ erfüllen ebenfalls die Bose-Vertauschungsrelationen,

$$[\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}'}] = [\alpha_{\vec{k}}^\dagger, \alpha_{\vec{k}'}^\dagger] = 0, \quad [\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'},$$

falls

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1 \quad (4.159)$$

für alle \vec{k} . Beweis: Nachrechnen.

Durch Einsetzen von (4.157) in (4.156) erhält man

$$H = \frac{1}{2V} N^2 V_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(\frac{k^2}{2m} + n V_{\vec{k}} \right) \left(u_{\vec{k}}^2 \alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}^2 \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{-\vec{k}}^\dagger + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}}) \right) + \frac{N}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} \left((u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{-\vec{k}}^\dagger + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{-\vec{k}}) + 2u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} (\alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}} + \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger) \right). \quad (4.160)$$

Der Hamiltonoperator soll diagonal sein, d.h. nur Produkte von Operatoren mit gleichem Index enthalten. Dazu muss

$$\left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\vec{k}}\right) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + \frac{n}{2} V_{\vec{k}} (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) = 0 \quad (4.161)$$

erfüllt sein. Unter Verwendung von (4.159) können hieran $u_{\vec{k}}$ und $v_{\vec{k}}$ berechnet werden. Mit

$$\omega_{\vec{k}} := \sqrt{\left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\vec{k}}\right)^2 - (nV_{\vec{k}})^2} = \sqrt{\left(\frac{k^2}{2m}\right)^2 + \frac{nk^2 V_{\vec{k}}}{m}} \quad (4.162)$$

ergibt sich

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{\omega_{\vec{k}} + \left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\vec{k}}\right)}{2\omega_{\vec{k}}}, \quad (4.163)$$

$$v_{\vec{k}}^2 = \frac{-\omega_{\vec{k}} + \left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\vec{k}}\right)}{2\omega_{\vec{k}}}. \quad (4.164)$$

Durch Einsetzen in (4.160) erhält man schließlich

$$H = \frac{N^2}{2V} V_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \underbrace{\left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}}\right)}_{>0} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \omega_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger \alpha_{\vec{k}}. \quad (4.165)$$

Die ersten beiden Terme legen die Grundzustandsenergie $E^{(0)}$ fest. Dabei beschreibt der erste Term den Fall, dass alle Teilchen im $\vec{k} = 0$ Zustand sind. Wegen der Wechselwirkung kommen im zweiten Term aber auch noch Beiträge durch Teilchen mit $\vec{k} \neq 0$ dazu. Die Wechselwirkungsenergie überkompensiert dabei die kinetische Energie. Der dritte Term entspricht Anregungen (Quasiteilchen) mit dem Spektren $\omega_{\vec{k}}$ wie beim harmonischen Oszillator.

Der *Grundzustand* $|\phi\rangle$ ist durch

$$\alpha_{\vec{k}} |\phi\rangle = 0 \quad \text{für alle } \vec{k}$$

charakterisiert. Es sind dann keine Quasiteilchen angeregt und die Energie minimal. Wir schreiben diesen Zustand als

$$|0\rangle := |\phi\rangle,$$

dies ist das „Vakuum“ für die Quasiteilchen ($\alpha_{\vec{k}}$) aber nicht für die fundamentalen Bosonen ($a_{\vec{k}}$). Die Besetzungszahlbasis für Quasiteilchen (Anregungen) ist verschieden von der vorher benutzten Besetzungszahlbasis für Teilchen (Bosonen).

Die Anzahl der Teilchen (Bosonen) außerhalb des Kondensats, N' , ist im Grundzustand des wechselwirkenden Systems

$$N' = \langle 0 | \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} | 0 \rangle \stackrel{(4.157)}{=} \langle 0 | \sum_{\vec{k} \neq 0} v_{\vec{k}}^2 \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger | 0 \rangle = \sum_{\vec{k} \neq 0} v_{\vec{k}}^2. \quad (4.166)$$

Man beachte, dass in der ersten Zeile ein *Teilchenoperator* auf einen *Quasiteilchenzustand* angewandt wird. Für eine einfache Abschätzung verwenden wir statt des Lennard-Jones-Potentials (4.148) ein vereinfachtes Modell für die Wechselwirkung, das *Kontakt-Potential*

$$V(\vec{r}) = \lambda\delta(\vec{r}).$$

Dann ist

$$V_{\vec{q}} = \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) = \lambda = \text{const.}$$

und mit (4.162), (4.164) und (4.166) findet man

$$\omega_{\vec{k}} = \sqrt{\left(\frac{k^2}{2m}\right)^2 + \frac{n\lambda k^2}{m}}, \quad (4.167)$$

$$n' = \frac{N'}{V} \stackrel{(4.166)}{=} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k v_k^2 \stackrel{(4.164)}{=} \stackrel{(4.167)}{=} \dots \left\{ \begin{array}{l} \text{verwende z.B.} \\ \text{Mathematica} \end{array} \right\} \dots = \frac{m^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2} (\lambda n)^{\frac{3}{2}}. \quad (4.168)$$

Der Entwicklungsparameter in der Bogoliubov-Näherung ist also λn . Weil die Abhängigkeit in (4.168) nicht analytisch in λn ist, kann diese nicht um $\lambda n = 0$ in eine Potenzreihe entwickelt werden. Aus diesem Grund scheidet die Behandlung des ursprünglichen Hamiltonoperators (4.149) mit der stationären Störungstheorie aus.

Anregungen erhält man durch Anwendung von $\alpha_{\vec{k}}^\dagger$ auf $|0\rangle$. Die Anregungsenergie ist gegeben durch die Dispersion $\omega_{\vec{k}}$ und hat folgende Asymptotik:

- Für *kleine* $k = |\vec{k}|$ findet man aus (4.162)

$$\omega_{\vec{k}} = ck \quad (4.169)$$

$$\text{mit } c = \sqrt{\frac{nV_0}{m}}. \quad (4.170)$$

D.h. langwellige ($\lambda = 2\pi/k$) Anregungen sind Phononen mit linearer Dispersion (akustische Phononen).

- Für *große* k erhält man aus (4.162)

$$\omega_{\vec{k}} = \frac{k^2}{2m} + nV_{\vec{k}}, \quad (4.171)$$

mit $V_{\vec{k}} = \lambda = \text{const.}$ für ein Kontakt-Potential.

Abbildung 4.13 zeigt die Dispersion in beiden Bereichen für den Fall, dass das Potential im k -Raum abfällt ($V_{k>0} < V_0$).

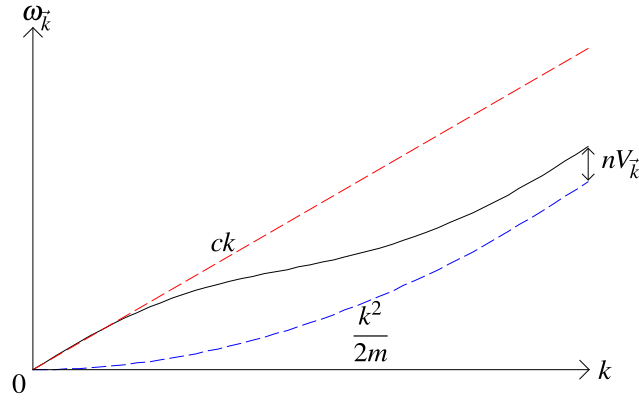


Abbildung 4.13: Die zunächst lineare Dispersion (akustische Phononen) geht für große k in eine Parabel über.

Die Anregungen für große k sind Dichtewellen,

$$\begin{aligned}
 \hat{n}_{\vec{k}} &= \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}+\vec{k}} \underset{\substack{a_0^\dagger \approx a_0 \approx \sqrt{n_0} \\ n_0 \gg n_{\vec{k} \neq 0}}}{\approx} \sqrt{n_0} (a_{-\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}}) \\
 &\stackrel{(4.157)}{\approx} \sqrt{n_0} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}}) (\alpha_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^\dagger) \stackrel{(4.163)}{\approx} \stackrel{(4.164)}{\approx} k \sqrt{\frac{n_0}{2m\omega_{\vec{k}}}} (\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{-\vec{k}}^\dagger). \quad (4.172)
 \end{aligned}$$

Daraus erhält man durch Fouriertransformation in den Ortsraum die Dichte am Ort \vec{r} :

$$\begin{aligned}
 \hat{n}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{n}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} k \sqrt{\frac{n_0}{2m\omega_{\vec{k}}}} (\alpha_{\vec{k}} + \alpha_{-\vec{k}}^\dagger) = \rho(\vec{r}) + \rho^\dagger(\vec{r}), \\
 \rho(\vec{r}) &= \sum_{\vec{k}} k \sqrt{\frac{n_0}{2m\omega_{\vec{k}}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \alpha_{\vec{k}}, \\
 \rho(\vec{r}) (\alpha_{\vec{k}}^\dagger | 0 \rangle) &= \underbrace{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} k \sqrt{\frac{n_0}{2m\omega_{\vec{k}}}}}_{=: A_{\vec{k}}} | 0 \rangle.
 \end{aligned}$$

Dabei ist $A_{\vec{k}}$ die Amplitude der Dichtewelle. Für einen kohärenten Zustand,

$$|c_{\vec{k}}\rangle = e^{-|c_{\vec{k}}|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(c_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle$$

erhält man mit $c_{\vec{k}} = |c_{\vec{k}}| e^{-i\delta_{\vec{k}}}$ explizit Schwankungen in $n(\vec{r})$:

$$\langle c_{\vec{k}} | n(\vec{r}) | c_{\vec{k}} \rangle = 2A_{\vec{k}} |c_{\vec{k}}| \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \delta_{\vec{k}}).$$

Reales Helium: Suprafluidität

Das durch Neutronenstreuung experimentell bestimmte Anregungsspektrum von Helium ist in Abbildung 4.14 gezeigt. *Rotonen-Anregungen* lassen sich nicht mit unserer Näherung kleiner Dichte und schwacher Wechselwirkung beschreiben.

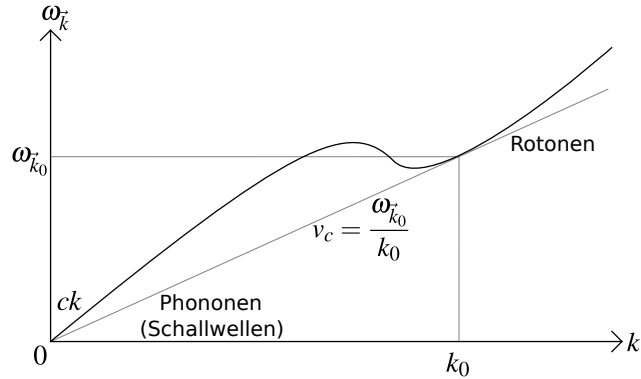
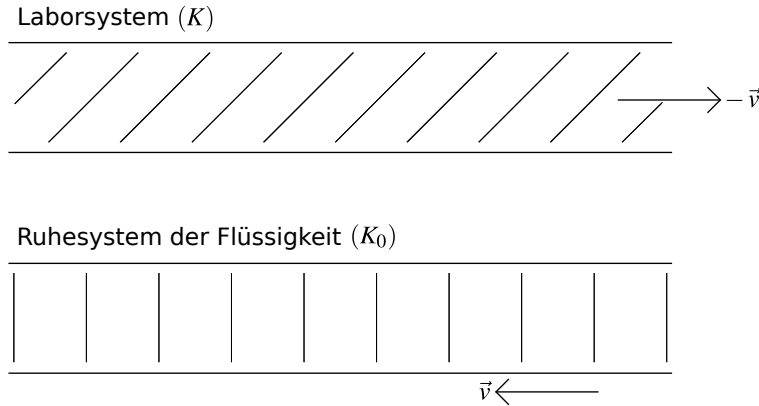


Abbildung 4.14: Experimentell bestimmte Anregungen in suprafluidem He^4 (nach Henshaw und Woods, 1961). Die kritische Geschwindigkeit v_c ergibt sich durch „Anlegen einer Tangente von unten“.

Eine wichtige Eigenschaft von He^4 ist, dass es bei $T < T_c$ supraflüssig wird, d.h. es umströmt Hindernisse und Wände ohne Widerstand. Um diese Eigenschaft zu untersuchen, betrachten wir zwei Koordinatensysteme, das Laborsystem K , in dem sich die Flüssigkeit mit Geschwindigkeit $-\vec{v}$ durch die Röhre bewegt, und das Ruhesystem K_0 der Flüssigkeit, in der sich die Röhre mit Geschwindigkeit \vec{v} an der Flüssigkeit vorbei bewegt. Beide Koordinatensysteme



sind durch eine Galilei-Transformation miteinander verbunden,

$$\text{Impuls: } \vec{P} = \vec{P}_0 - M\vec{v}, \quad (4.173)$$

$$\text{Energie: } E = \frac{P^2}{2M} = \underbrace{\frac{P_0^2}{2M}}_{=E_0} + \vec{P}_0 \cdot \vec{v} + \frac{Mv^2}{2}. \quad (4.174)$$

- Die Flüssigkeit sei im Grundzustand.
- Wir setzen uns ins Ruhesystem K_0 der Flüssigkeit, in dem sich die Gefäßwände bewegen.

Strömungswiderstand entsteht, wenn kinetische Energie (und Impuls) von der Wand in die ruhende Flüssigkeit übertragen wird. Dazu müssen in der Flüssigkeit *Anregungen* aus dem Grundzustand erzeugt werden. Im Grundzustand gilt

$$(4.173) \Rightarrow \begin{aligned} \text{in } K_0: \quad E_0 = E_0^g = 0, \quad \vec{P}_0 = 0, \\ \text{in } K: \quad E = E^g = E_0^g + \frac{Mv^2}{2}, \quad \vec{P} = -M\vec{v}. \end{aligned}$$

Wird ein Quasiteilchen mit Impuls \vec{k} und Energie $\omega_{\vec{k}}$ erzeugt, ändern sich diese Größen zu

$$\begin{aligned} \text{in } K_0: \quad E_0 = E_0^g + \omega_{\vec{k}}, \quad \vec{P}_0 = \vec{k}, \\ \text{in } K: \quad E = E_0^g + \omega_{\vec{k}} - \vec{k} \cdot \vec{v} + \frac{Mv^2}{2}, \quad \vec{P} = \vec{k} - M\vec{v}. \end{aligned}$$

Kinetische Energie geht von der Röhre in die Flüssigkeit über, falls die *Anregungsenergie* im Laborsystem negativ ist,

$$\Delta E = \omega_{\vec{k}} - \vec{k} \cdot \vec{v} < 0.$$

ΔE ist am kleinsten für $\vec{v} \parallel \vec{k}$, also

$$\min \Delta E = \omega_{\vec{k}} - kv < 0$$

Somit sind Anregungen nur möglich, falls

$$v > \frac{\omega_{\vec{k}}}{k} = v_c, \tag{4.175}$$

mit der *kritischen Geschwindigkeit* v_c . Aus dem experimentell bestimmten Anregungsspektrum (siehe Abbildung 4.14) findet man die kritische Geschwindigkeit

$$v_c = \frac{\omega_{\vec{k}}}{k_0} \approx 60 \frac{m}{s} \quad (\text{für } ^4\text{He}).$$

Für „normale“ Flüssigkeiten ist $v_c = 0$. Für $v < v_c$ werden also keine Quasiteilchen angeregt, d.h. es findet kein Energieübertrag von der Röhre auf die Flüssigkeit statt, und die Flüssigkeit fließt reibungslos. Dieses Phänomen bezeichnet man als *Suprafluidität*.

Teil II

Elektrodynamik und Spezielle Relativitätstheorie

Kapitel 5

Spezielle Relativitätstheorie

5.1 Grundlagen

Die Bewegung von Körpern in der klassischen, nicht-relativistischen Mechanik ist beschrieben durch das *Newtonsche Gesetz*,

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = \vec{F}(\vec{r}, t). \quad (5.1)$$

Hier sind m und $\vec{r}(t)$ die Masse des Körpers und dessen Ort als Funktion der Zeit t , und $\vec{F}(\vec{r}, t)$ die auf den Körper wirkende Kraft. Gleichung (5.1) gilt auch innerhalb der Newtonschen Theorie nur in sog. *Inertialsystemen* (IS). Für ein erstes IS dient (5.1) als Definition, weitere IS erhält man, indem man sich Koordinatensysteme hernimmt, die sich mit konstanter Geschwindigkeit \vec{v} zum ursprünglichen IS bewegen ¹,

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}t + \vec{r}_0, \quad (5.2)$$

$$t' = t + t_0. \quad (5.3)$$

Solche Koordinaten-Transformationen heißen *Galilei-Transformationen*. Die nicht-relativistische (Newtonsche) klassische Mechanik ist *Galilei-invariant*,

$$m\ddot{\vec{r}}' = m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}(\vec{r}, t) = \vec{F}(\vec{r}' - \vec{v}(t' - t_0) - \vec{r}_0, t' - t_0) = \vec{F}'(\vec{r}', t'). \quad (5.4)$$

Falls keine Kräfte in IS wirken, $\vec{F} = 0$, dann auch nicht in IS', $\vec{F}' = 0$. Wir betrachten nun die klassische Elektrodynamik, beschrieben durch die vier Maxwell-Gleichungen

$$\text{Coulomb / Gauß} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (5.5)$$

$$\text{Ampère / Maxwell} \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} - \epsilon_0\mu_0\dot{\vec{E}} = \mu_0\vec{j}, \quad (5.6)$$

$$\text{keine magnetischen Monopole} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (5.7)$$

$$\text{Faraday} \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} + \dot{\vec{B}} = 0. \quad (5.8)$$

¹Ausserdem erlaubt sind räumliche Drehungen $\vec{r}' = R\vec{r}$ mit $R \in SO(3)$. Diese werden hier nicht benötigt.

Aus den inhomogenen Maxwellgleichungen (5.5) und (5.6) folgt die Kontinuitätsgleichung für die Quellen (elektrische Ladungen und Ströme),

$$\dot{\rho} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}. \quad (5.9)$$

Die homogenen Maxwell-Gleichungen (5.7), (5.8) erlauben die Definition der elektromagnetischen Potentiale \vec{A} und ϕ :

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (5.10)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \dot{\vec{A}}. \quad (5.11)$$

Einsetzen in die inhomogenen Maxwellgleichungen (5.5), (5.6) und die Definition des Laplace Operators

$$\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

liefert

$$\underbrace{\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right)}_{=: \square} \vec{A}(\vec{r}, t) = -\mu_0 \vec{j}(\vec{r}, t), \quad (5.12)$$

und

$$\square \phi(\vec{r}, t) = -\frac{\rho(\vec{r}, t)}{\epsilon_0}, \quad (5.13)$$

wobei \square der d'Alembert- oder „Box“-Operator ist. Außerdem wurde $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$ und die Lorenz-Eichung², $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \dot{\phi}/c^2 = 0$, verwendet.

Im Vakuum ist $\rho = 0$ und $\vec{j} = 0$. Durch Anwenden von $\vec{\nabla} \times$ auf (5.12) und $\vec{\nabla} \cdot$ auf (5.13) findet man dann $\square \vec{B}(\vec{r}, t) = 0$ und $\square \vec{E}(\vec{r}, t) = 0$. Dies sind die Wellengleichungen für die Ausbreitung von elektromagnetischen Wellen mit der *Lichtgeschwindigkeit* c . Für eine Quelle bei $\vec{r}_0 = 0$ und $t_0 = 0$ erhält man eine Kugelwelle, deren Wellenfront sich aus Punkten \vec{r} mit

$$r^2 - c^2 t^2 = 0 \quad (5.14)$$

zusammensetzt (siehe Abbildung 5.1, linkes Bild). Für eine auslaufende Welle ist

$$\dot{\vec{r}} = c \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} = c \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}. \quad (5.15)$$

²Benannt nach Ludvig Valentin Lorenz (1829-1891). Die Lorenz-Eichung ist Lorentz-invariant, $\partial_\mu A^\mu = 0$, dazu später.

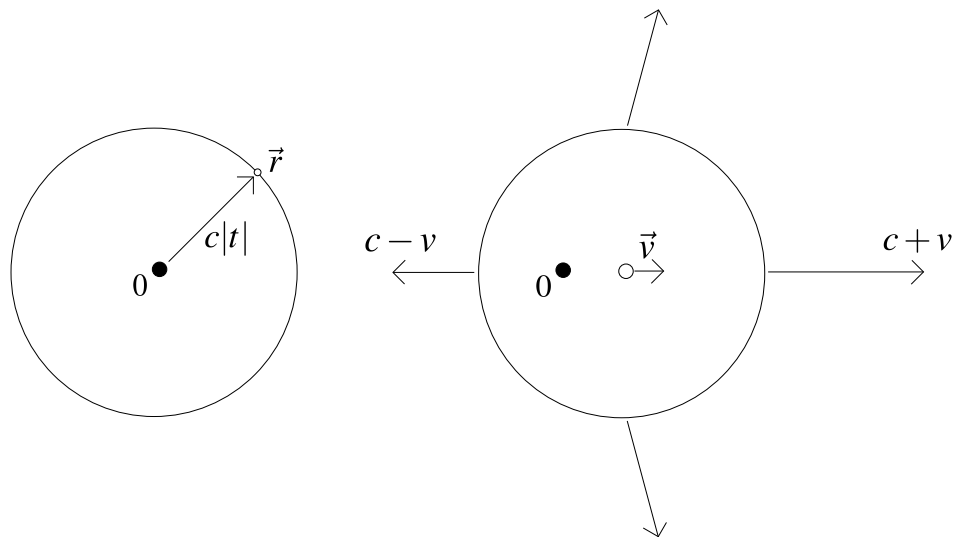


Abbildung 5.1: Licht breitet sich in allen Inertialsystemen wie eine Kugelwelle (links) aus. Die Annahme eines Äthers bezüglich welchem sich Licht mit c bewegt (rechts) widerspricht den experimentellen Tatsachen.

Diese Beziehung (wie auch die Wellengleichungen (5.12), (5.13) selber) ist nicht Galilei-invariant! Unter (5.2), (5.3) würde daraus nämlich (siehe Abbildung 5.1, rechtes Bild)

$$\dot{\vec{r}}' = \dot{\vec{r}} + \vec{v} = c \frac{\vec{r}' - \vec{v}t}{|\vec{r}' - \vec{v}t|} + \vec{v}.$$

Im neuen IS würde sich Licht nicht als Kugelwelle ausbreiten und die Lichtgeschwindigkeit wäre somit richtungsabhängig. Es gäbe *ein* ausgezeichnetes IS, in dem sich Licht als Kugelwelle ausbreitet („Äther“).

Der experimentelle Befund (Michelson, Morley, 1887) lautet: Die Lichtgeschwindigkeit ist in allen IS und in allen Richtungen konstant! Als Konsequenz daraus ergibt sich:

- (a) Entweder sind physikalische Gesetze in verschiedenen Koordinatensystemen verschieden, oder
- (b) die Galilei-Transformation ist nicht die korrekte Transformation zwischen IS. ✓

Spezielle Relativitätstheorie (Albert Einstein, 1905):

- (i) Relativitätsprinzip: Alle physikalischen Gesetze sind in allen gleichförmig geradlinig gegeneinander bewegten Systemen (IS) gleich.
- (ii) Die Lichtgeschwindigkeit (im Vakuum) hat in allen IS den selben Wert c .

Daraus folgt, dass (b) zutrifft und wir neue Transformationen suchen müssen, die (5.14), (5.15) invariant lassen:

$$(r')^2 - c^2 (t')^2 = r^2 - c^2 t^2. \quad (5.16)$$

Wir führen zu diesem Zweck den (*kovarianten*) Vierer-Ortsvektor $x = (x_0, x_1, x_2, x_3)$ ein, dessen Null-Komponente (bis auf einen konstanten Faktor c) die Zeit ist, $x_0 = ct$, und dessen verbleibenden drei Komponenten die Ortskoordinaten $x_i = r_i$ ($i = 1, 2, 3$) sind. Man schreibt auch kurz $x = (ct, \vec{r})$. Die Bedingung (5.16) lautet dann

$$x^2 = \sum_{\mu, \nu=0}^3 x_\mu g^{\mu\nu} x_\nu = \sum_{\mu, \nu=0}^3 x'_\mu g^{\mu\nu} x'_\nu = (x')^2, \quad (5.17)$$

mit der *Metrik* $g^{\mu\mu} = -1$ ($\mu = 1, 2, 3$), $g^{00} = 1$, $g^{\mu\nu} = 0$ ($\mu \neq \nu$):

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.18)$$

Man bezeichnet mit $\sqrt{x^2}$ die „Länge“ des Vierer-Vektors x . Die neuen Transformationen müssen diese Länge erhalten, nicht die räumliche Länge \vec{r}^2 der Galilei-Transformationen. Allgemein erzeugt die Metrik ein Skalarprodukt für Vierervektoren $x \cdot y := \sum_{\mu, \nu=0}^3 x_\mu g^{\mu\nu} y_\nu$ so dass $x^2 = x \cdot x$.

Wir führen weiter als weitere Notationsvereinbarung die *Einstein-Summenkonvention* ein, z.B.

$$x^2 = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu, \quad (5.19)$$

wobei über wiederholte Indizes summiert wird. In der Regel treten die zu summierenden Indizes einmal unten und einmal oben auf.

Die Metrik erlaubt ausserdem die Einführung von *kontravarianten* Vierervektoren (bzw. Vektorkomponenten) x^μ , welcher mit dem kovarianten Vierervektor über die Beziehung

$$x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu \quad (5.20)$$

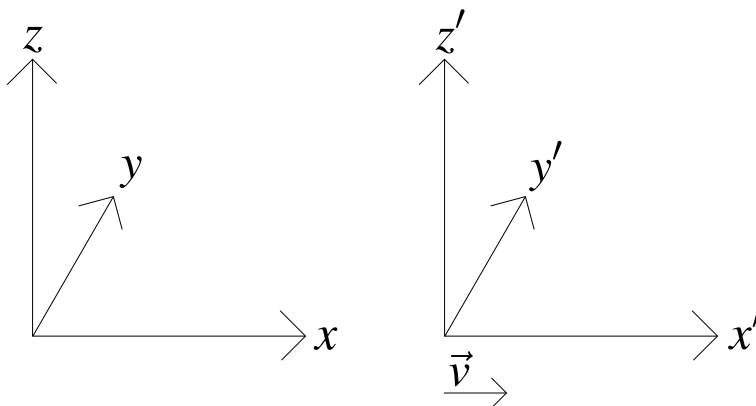
zusammenhängt. Das Skalarprodukt kann somit auch als $x \cdot y = x_\mu y^\mu$ geschrieben werden.

5.2 Lorentz-Transformationen

Für die neuen Koordinatentransformationen machen wir folgenden linearen Ansatz,

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu. \quad (5.21)$$

Die Transformationen (5.21), die (5.17) erfüllen, nennt man Lorentz-Transformationen (LT), nach Hendrik Lorentz (1853-1928). Im Unterschied zu den Galilei-Transformationen vermischen die LT Raum- und Zeitkoordinaten. Eine Klasse von LT sind einfache, zeitunabhängige räumliche Drehungen, die r^2 und t^2 separat invariant lassen. Man kann zeigen, dass jede LT als Produkt einer solchen Drehung und einer sog. *speziellen LT* dargestellt werden kann. Die speziellen LT beschreiben den Übergang zwischen gleichförmig geradlinig gegeneinander bewegten IS mit parallelen Achsen. (analog zu den Galilei-Transformationen (5.2), (5.3).) Wir können annehmen, dass die relative Geschwindigkeit \vec{v} zwischen den beiden IS entlang der x-Achse zeigt: Dann ist klar, dass



$$y' = y, \quad z' = z, \quad \text{bzw. } x'_2 = x_2, \quad x'_3 = x_3.$$

Somit hat die LT die Form

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda^0_0 & \Lambda^0_1 & 0 & 0 \\ \Lambda^1_0 & \Lambda^1_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

Einsetzen in den Ansatz (5.21) ergibt

$$x'^0 = \Lambda^0_0 x^0 + \Lambda^0_1 x^1, \quad (5.23)$$

$$x'^1 = \Lambda^1_0 x^0 + \Lambda^1_1 x^1. \quad (5.24)$$

Mit der Invarianzbedingung (5.17),

$$(x'^0)^2 - (x'^1)^2 - (x'^2)^2 - (x'^3)^2 = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2,$$

folgt daraus

$$(\Lambda^0_0 x^0 + \Lambda^0_1 x^1)^2 - (\Lambda^1_0 x^0 + \Lambda^1_1 x^1)^2 = (x^0)^2 - (x^1)^2$$

und schliesslich

$$\begin{aligned} & [(\Lambda^0_0)^2 - (\Lambda^0_1)^2] (x^0)^2 + [(\Lambda^1_1)^2 - (\Lambda^1_0)^2] (x^1)^2 + 2 [\Lambda^0_0 \Lambda^0_1 - \Lambda^1_0 \Lambda^1_1] x^0 x^1 \\ & = (x^0)^2 - (x^1)^2. \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich ergibt das Gleichungssystem

$$(\Lambda^0_0)^2 - (\Lambda^1_0)^2 = 1, \quad (5.25)$$

$$(\Lambda^1_1)^2 - (\Lambda^0_1)^2 = 1, \quad (5.26)$$

$$\Lambda^0_0 \Lambda^0_1 - \Lambda^1_0 \Lambda^1_1 = 0. \quad (5.27)$$

Aus (5.25) folgt, dass $(\Lambda^0_0)^2 \geq 1$, was die Parametrisierung

$$\Lambda^0_0 = \pm \cosh \chi \quad (5.28)$$

zulässt. Wir wählen hier das positive Vorzeichen, um *orthochrone* LT zu erhalten (d.h., solche, die keine Zeitumkehr beinhalten). Ebenfalls aus (5.25) folgt dann

$$\Lambda^0_1 = -\sinh \chi. \quad (5.29)$$

Die Wahl des Vorzeichens ist hier beliebig, denn sie kann durch Änderung des Vorzeichens von χ umgedreht werden. Aus (5.26) erhalten wir mit ähnlichen Überlegungen

$$\Lambda^1_1 = \pm \cosh \chi', \quad (5.30)$$

$$\Lambda^1_0 = -\sinh \chi', \quad (5.31)$$

wobei auch das Vorzeichen von Λ^1_1 positiv gewählt wurde, um *eigentliche* LT zu erhalten, also solche, die keine Raumspiegelung beinhalten. Um auch noch (5.27) zu erfüllen, wählen wir $\chi = \chi'$, und erhalten für die LT,

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cosh \chi & -\sinh \chi & 0 & 0 \\ -\sinh \chi & \cosh \chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

Den Parameter χ können wir nun noch durch die Relativgeschwindigkeit \vec{v} der beiden IS ausdrücken. Dazu betrachten wir den Ursprung $\vec{r}' = 0$ von IS' in IS,

$$\begin{aligned} 0 &= x'^1 = \cosh \chi x^1 - \sinh \chi x^0 = x^0 \left(\frac{x^1}{x^0} \cosh \chi - \sinh \chi \right) \\ \Rightarrow \frac{x^1}{x^0} &= \frac{x}{ct} = \frac{v}{c} = \frac{\sinh \chi}{\cosh \chi} = \tanh \chi \end{aligned}$$

Wir finden also

$$\tanh \chi = \frac{v}{c}. \quad (5.33)$$

Eine Konsequenz daraus ist, dass die Relativgeschwindigkeit der IS nicht größer als die Lichtgeschwindigkeit sein darf: $v < c$. Für die Matrixelemente der LT finden wir

$$\begin{aligned} \cosh \chi &= \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 \chi}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \\ \sinh \chi &= \cosh \chi \tanh \chi = \frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \end{aligned}$$

Mit den Definitionen

$$\beta := \frac{v}{c}$$

und

$$\gamma := \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

erhält die Lorentz-Transformation die Form

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Mit (5.21) und (5.34) finden wir explizit:

$$\mu = 1: \quad x' = \gamma(x - \beta ct) = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (5.35)$$

$$\mu = 2: \quad y' = y, \quad (5.36)$$

$$\mu = 3: \quad z' = z, \quad (5.37)$$

$$\mu = 0: \quad t' = \gamma \left(t - \frac{\beta}{c} x \right) = \frac{t - \frac{v}{c^2} x}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (5.38)$$

Bemerkungen:

- (i) Nicht-relativistischer Limes: Für $v \ll c$ wird aus der LT (5.35)–(5.38) die Galilei-Transformation (5.2), (5.3) mit $\vec{v} \parallel \hat{x}$. Dabei

$$\beta = \frac{v}{c} \rightarrow 0, \quad \gamma \rightarrow 1. \quad (5.39)$$

- (ii) Wie oben festgestellt, muss $v < c$ sein.

- (iii) $\det \Lambda = \gamma^2 - \beta^2 \gamma^2 = (1 - \beta^2) \gamma^2 = \frac{1}{\gamma^2} \gamma^2 = 1$. Somit ist Λ eine „Drehung“ der Raumzeit, die den Vierer-Abstand $\sqrt{x^2}$ invariant lässt („normale“ Drehungen im \mathbb{R}^3 lassen die räumliche Länge $\sqrt{r^2}$ invariant).

(iv) Es gibt weitere Lösungen zu (5.25)–(5.27). Diese speziellen LT haben die Form

$$\begin{aligned}
 P\Lambda &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh \chi & -\sinh \chi & 0 & 0 \\ -\sinh \chi & \cosh \chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cosh \chi & -\sinh \chi & 0 & 0 \\ +\sinh \chi & -\cosh \chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 T\Lambda &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} \Lambda \\
 PT\Lambda &= -\Lambda
 \end{aligned}$$

Die LT Λ mit $\Lambda^0_0 > 0$ und $\det \Lambda = +1$ heißen *eigentliche, orthochrone LT*.

(v) Das Inverse einer speziellen LT erhält man durch $\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$, $v \rightarrow -v$, bzw. $\chi \rightarrow -\chi$.

(vi) Das Produkt zweier spezieller LT mit v_1 und v_2 (beide entlang \hat{x}) ergibt wieder eine spezielle LT (entlang \hat{x}) mit

$$v_3 = \frac{v_1 + v_2}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}}. \quad (5.40)$$

Dies ist die relativistische Geschwindigkeitsaddition.

(vii) Mit (v) und (vi) bilden die speziellen LT (entlang \hat{x}) eine *Gruppe*. Die eigentlichen, orthochronen LT (entlang \hat{x}) bilden eine Untergruppe dieser Gruppe.

(viii) Allgemeine LT erhält man aus speziellen LT kombiniert mit räumlichen Drehungen. Die Menge aller LT heisst *Lorentz-Gruppe* (LG). Die eigentlichen, orthochronen LT bilden eine Untergruppe der LG.

(ix) Spezielle LT heißen auch (Lorentz-) „Boosts“.

(x) Λ ist symmetrisch:

$$\begin{aligned}
 \Lambda^\dagger &= \Lambda, \\
 \Lambda^\mu_\nu &= \Lambda_\nu^\mu.
 \end{aligned}$$

5.3 Physikalische Folgen

(i) Relativität der Gleichzeitigkeit

Zwei Ereignisse, die an den Orten x_1 und $x_2 \neq x_1$ im IS stattfinden, seien *gleichzeitig*: $t_1 = t_2$ ($y_1 = z_1 = y_2 = z_2 = 0$). Im mit Geschwindigkeit v zu IS bewegten System IS' gilt:

$$\begin{aligned} t'_i &= \gamma \left(t_i - \frac{\beta}{c} x_i \right) \\ \Delta t' &= t'_2 - t'_1 = \gamma \left(\underbrace{t_2 - t_1}_{=0} - \frac{\beta}{c} (x_2 - x_1) \right) \\ &= -\frac{\beta\gamma}{c} (x_2 - x_1) \neq 0, \end{aligned} \tag{5.41}$$

die Ereignisse sind also im System IS' *nicht* gleichzeitig!

(ii) Zeitdilatation

Betrachte zwei Ereignisse *am gleichen Ort zu verschiedenen Zeiten*.

$$\begin{aligned} \text{IS (Ruhesystem)} : \quad X_1 &= (ct_1, x, 0, 0), \\ X_2 &= (ct_2, x, 0, 0), \\ \Delta t &= t_2 - t_1. \\ \text{IS' (bewegtes System)} : \quad t'_1 &= \gamma \left(t_1 - \frac{\beta}{c} x \right), \\ t'_2 &= \gamma \left(t_2 - \frac{\beta}{c} x \right), \\ \Delta t' &= t'_2 - t'_1 = \gamma(t_2 - t_1) = \gamma\Delta t > \Delta t. \end{aligned} \tag{5.42}$$

(iii) Längenkontraktion

Betrachte zwei Ereignisse *an verschiedenen Orten zur gleichen Zeit* (Längenmessung).

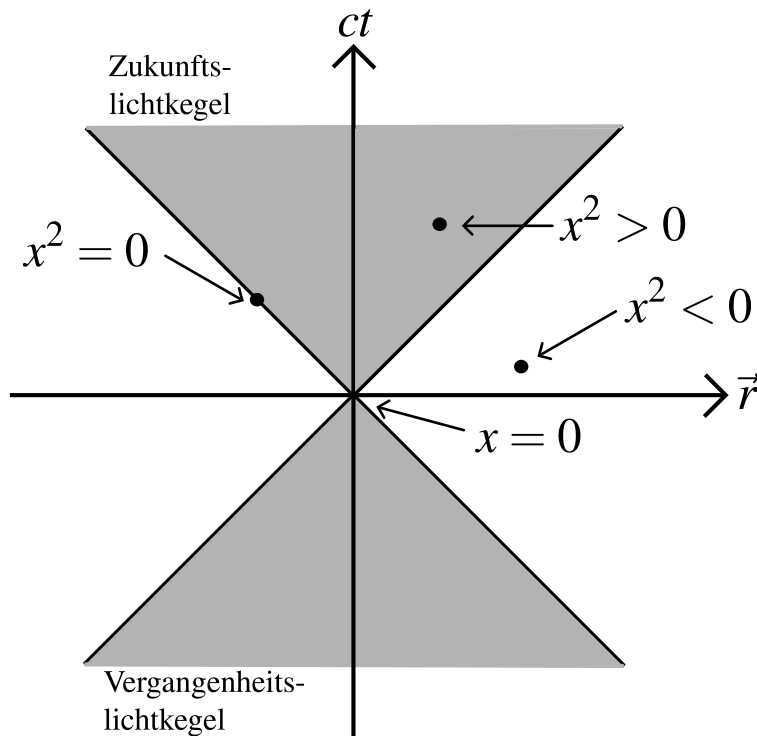
$$\begin{aligned} \text{IS (Ruhesystem)} : \quad X_1 &= (ct_1, x_1, 0, 0), \\ X_2 &= (ct_2, x_2, 0, 0), \\ l &= x_2 - x_1 \quad (t_1 = t_2). \\ \text{IS' (bewegtes System)} : \quad x'_1 &= \gamma(x_1 - \beta ct_1), \quad t'_1 = \gamma \left(t_1 - \frac{\beta}{c} x_1 \right), \\ x'_2 &= \gamma(x_2 - \beta ct_2), \quad t'_2 = \gamma \left(t_2 - \frac{\beta}{c} x_2 \right). \end{aligned}$$

Länge messen in IS' ($t'_1 \stackrel{!}{=} t'_2$):

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow t_2 - t_1 &= \frac{\beta}{c}(x_2 - x_1) = \frac{\beta}{c}l. \\
 \Rightarrow l' &= x'_2 - x'_1 = \gamma(x_2 - x_1) - \gamma\beta c(t_2 - t_1) \\
 &= \gamma l - \gamma\beta^2 l = \gamma \underbrace{(1 - \beta^2)}_{=\frac{1}{\gamma^2}} l = \frac{l}{\gamma} < l.
 \end{aligned}
 \tag{5.43}$$

(iv) Kausalität

Vierer-Vektoren bzw. Ereignisse ($x = (ct, \vec{r})$) können im Minkowski-Diagramm dargestellt werden:



$$\begin{aligned}
 x^2 > 0 &\Leftrightarrow r^2 < c^2 t^2 : & x \text{ zeitartiger Vierer-Vektor,} \\
 x^2 < 0 &\Leftrightarrow r^2 > c^2 t^2 : & x \text{ raumartiger Vierer-Vektor,} \\
 x^2 = 0 &\Leftrightarrow r^2 = c^2 t^2 : & x \text{ lichtartiger Vierer-Vektor.}
 \end{aligned}$$

LT erhalten diese Kategorien weil $(x')^2 = x^2$.

5.4 Kovarianter vierdimensionaler Formalismus

Wir können physikalische Größen durch ihre Transformationseigenschaften unter LT charakterisieren:

(i) Lorentz-Skalar: Größe, die sich unter LT nicht ändert, z.B. $x^2 = c^2t^2 - r^2$. Andere Beispiele: c , m (Ruhemasse).

(ii) Kontravarianter Vierer-Vektor: a^μ

Transformiert sich wie Vierer-Ortsvektor $x \equiv x^\mu = (ct, \vec{r})$:

$$a'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu a^\nu, \quad (5.44)$$

z.B. x^μ , dx^μ oder p^μ .

(iii) Kovarianter Vierer-Vektor: a_μ

Erhält man durch „herunterziehen“ des Index:

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu, \quad (5.45)$$

wobei

$$g_{\mu\nu} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.46)$$

z.B. $x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu = (ct, -\vec{r})$. Umgekehrt („heraufziehen“ des Index):

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu, \quad (5.47)$$

wobei für den *metrischen* Tensor (sonst nicht unbedingt) gilt:

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}.$$

LT:

$$\begin{aligned} a'_\mu &= g_{\mu\nu} a'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\lambda a^\lambda \\ &= \underbrace{g_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\lambda g^{\lambda\sigma}}_{:= \Lambda_\mu{}^\sigma} a_\sigma = \Lambda_\mu{}^\sigma a_\sigma. \end{aligned}$$

(iv) Kontravarianter Tensor k -ter Stufe:

$$T'^{\mu_1\mu_2\dots\mu_k} = \Lambda^{\mu_1}{}_{\nu_1} \Lambda^{\mu_2}{}_{\nu_2} \dots \Lambda^{\mu_k}{}_{\nu_k} T^{\nu_1\nu_2\dots\nu_k}. \quad (5.48)$$

(v) Kovarianter Tensor k -ter Stufe:

$$T'_{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_k} = \Lambda_{\mu_1}^{\nu_1} \Lambda_{\mu_2}^{\nu_2} \dots \Lambda_{\mu_k}^{\nu_k} T_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_k}. \quad (5.49)$$

(vi) Gemischter Tensor (k -fach kontravariant, l -fach kovariant):

$$T'^{\mu_1 \dots \mu_k}_{\nu_1 \dots \nu_l} = \Lambda^{\mu_1}_{\sigma_1} \dots \Lambda^{\mu_k}_{\sigma_k} \Lambda_{\nu_1}^{\rho_1} \dots \Lambda_{\nu_l}^{\rho_l} T^{\sigma_1 \dots \sigma_k}_{\rho_1 \dots \rho_l}. \quad (5.50)$$

(vii) Ableitungen nach *kontravariantem* Vektor: Wir betrachten die Funktion

$$f = f(x^\mu),$$

die vom kontravarianten Vierer-Vektor x^μ abhängt. Beim Übergang von IS nach IS' kann der Vektor x'^μ als Funktion von x^μ ausgedrückt werden,

$$\text{IS} \xrightarrow{\Lambda} \text{IS}' : f = f(x'^\nu) = f(x'^\nu(x^\mu)).$$

Daraus folgt mit der Kettenregel

$$\frac{\partial f}{\partial x^\mu} = \frac{\partial f}{\partial x'^\nu} \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \underset{x'^\nu = \Lambda^\nu_{\sigma} x^\sigma}{=} \frac{\partial f}{\partial x'^\nu} \Lambda^\nu_{\mu} \underset{\substack{\Lambda \text{ ist} \\ \text{symmetrisch}}}{=} \Lambda^\nu_{\mu} \frac{\partial f}{\partial x'^\nu},$$

und somit für das Transformationsverhalten des Ableitungsoperators (Gradienten),

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \Lambda^\nu_{\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu}. \quad (5.51)$$

D.h. die Ableitung nach einem *kontravarianten* Vierer-Vektor transformiert sich wie ein *kovarianter* Vektor. Wir schreiben deshalb auch

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} =: \partial_\mu = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right). \quad (5.52)$$

Umgekehrt ist die Ableitung nach einem *kovarianten* Vektor *kontravariant*:

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} =: \partial^\mu = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right). \quad (5.53)$$

(viii) Wegen

$$\partial_\mu \partial^\mu = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = -\square \quad (5.54)$$

ist der d'Alembert-Operator ein Lorentz-Skalar (ändert sich nicht unter LT).

- (ix) Mit dem *Tensorprodukt* kann aus Tensoren niedriger Stufe (bzw. Vierer-Vektoren) solche höherer Stufe erzeugt werden, z.B.,

$$T^\nu{}_\mu = a^\nu b_\mu$$

ist ein (gemischter) Tensor 2. Stufe (einfach ko- und einfach kontravariant). Allgemein:

$$T^{\nu_1 \dots \nu_{k+k'}}_{\mu_1 \dots \mu_{l+l'}} = R^{\nu_1 \dots \nu_k}_{\mu_1 \dots \mu_l} S^{\nu_{k+1} \dots \nu_{k+k'}}_{\mu_{l+1} \dots \mu_{l+l'}} .$$

Auf der linken Seite steht ein $k + k'$ -fach kontravarianter und $l + l'$ -fach kovarianter Tensor.

- (x) Das *Skalarprodukt* erzeugt aus zwei Vierer-Vektoren einen Skalar, d.h.,

$$a_\nu b^\nu$$

ist Lorentz-Skalar. Beweis:

$$\begin{aligned} a'_\nu b'^\nu &= \Lambda_\nu{}^\mu a_\mu \Lambda^\nu{}_\sigma b^\sigma = \underbrace{\frac{\partial x^\mu}{\partial x'^\nu} \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\sigma}}_{\delta^\mu{}_\sigma} a_\mu b^\sigma = a_\mu b^\mu . \\ &= \frac{\partial x^\mu}{\partial x^\sigma} = \delta^\mu{}_\sigma = \begin{cases} 0 & \mu \neq \sigma \\ 1 & \mu = \sigma \end{cases} \end{aligned}$$

- (xi) Allgemein erniedrigt die Verjüngung (Kontraktion) von Tensoren deren Stufe,

$$\underbrace{T^{\nu_1 \dots \overset{i}{\sigma} \dots \nu_k}_{\mu_1 \dots \overset{j}{\sigma} \dots \mu_l}}_{\text{Tensor } k+l\text{-ter Stufe}} = \underbrace{\tilde{T}^{\nu_1 \dots \nu_{k-1}}_{\mu_1 \dots \mu_{l-1}}}_{\text{Tensor } k+l-2\text{-ter Stufe}} .$$

Spezialfälle:

- $T^{\nu\rho}{}_\rho = \tilde{T}^\nu$ (4-Vektor).
- $T^\nu{}_\nu = \tilde{T}$ (Skalar).
- $a^\nu b_\nu = s$ (Skalarprodukt; $a^\nu b_\mu$ ist Tensor 2-ter Stufe).

5.5 Klassische Mechanik in kovarianter Form

Unser Ziel ist eine unter LT forminvariante (=kovariante) klassische Mechanik. Dabei stoßen wir auf das Problem, dass wir für die Kinematik Geschwindigkeit, Beschleunigung etc. benötigen, aber Ableitungen nach der Zeit nicht Lorentz-kovariant sind, d.h.

$$\frac{dx}{dt} = (c, \dot{\vec{r}}) \quad (5.55)$$

ist kein Vierer-Vektor. Der Grund dafür ist, dass t bzw. dt weder Lorentz-Skalare noch Vierer-Vektoren sind, sondern lediglich Komponenten von x bzw. dx . Zur Abhilfe verwenden wir statt t einen Lorentz-Skalar zur Parametrisierung der Dynamik, die *Eigenzeit* τ . Dazu verwenden wir, dass $x^2 = x_\mu x^\mu$ ein Skalar ist, und somit auch die Länge eines infinitesimalen Schrittes in der Raumzeit, $dx^2 = dx_\mu dx^\mu$. Wir definieren die Eigenzeit dann durch

$$d\tau^2 := \frac{dx^2}{c^2} = dt^2 - \frac{1}{c^2}(dx^2 + dy^2 + dz^2). \quad (5.56)$$

Physikalische Bedeutung: τ ist die Zeit im mitbewegten IS, in dem der Körper ruht ($dx = dy = dz = 0$).

$$\text{IS: } dx = (cdt, \vec{0}) : dt = d\tau, \quad t = \tau.$$

Mit $v^2 = (dx^2 + dy^2 + dz^2)/dt^2$ erhalten wir den Zusammenhang zwischen t und τ in einem beliebigem IS',

$$\begin{aligned} d\tau^2 &= dt^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = \frac{1}{\gamma^2} dt^2, \\ \Rightarrow t &= \gamma\tau. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Unter Verwendung der Eigenzeit können wir die kovariante Vierer-Geschwindigkeit definieren,

$$u^\mu := \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{d}{d\tau}(c\gamma\tau, \vec{r}) = (c\gamma, \gamma\vec{v}) = \gamma(c, \vec{v}), \quad (5.58)$$

und deren Länge berechnen,

$$u^2 = u_\mu u^\mu = \gamma^2(c^2 - v^2) = \gamma^2 c^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = c^2.$$

Durch nochmaliges Ableiten nach τ erhalten wir die Vierer-Beschleunigung,

$$m \frac{du^\mu}{d\tau} =: K^\mu, \quad (5.59)$$

wobei der Vierer-Vektor K^μ die sog. *Minkowski-Kraft* ist. Im nicht-relativistischen Limes ($\gamma \rightarrow 1$) gilt

$$K^\mu \rightarrow (0, \vec{F}).$$

Zur Bestimmung von K^μ erinnern wir uns an das nicht-relativistische Gesetz (Newton):

$$v \ll c : F_i = \frac{d}{dt} p_i \quad (i = x, y, z).$$

Durch Vergleich mit (5.59) können wir die Raumkomponenten von K^μ und des relativistischen Impulses erraten,

$$\begin{aligned} K_i &= m \frac{d}{d\tau} \gamma v_i = m\gamma \frac{d}{dt} \gamma v_i, \\ p_i &= m\gamma v_i, \quad K_i = \gamma \frac{d}{dt} p_i = \gamma F_i. \end{aligned}$$

Wir erhalten die 0-Komponente von F^μ , indem wir (5.59) mit u_μ kontrahieren:

$$\begin{aligned} m \underbrace{u_\mu \frac{du^\mu}{d\tau}}_{=\frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} u_\mu u^\mu = 0} &= u_\mu K^\mu = \gamma c K^0 - \gamma^2 \vec{v} \cdot \vec{F}, \\ \Rightarrow K^0 &= \gamma \frac{\vec{v} \cdot \vec{F}}{c}. \end{aligned}$$

Zusammenfassend finden wir für die Minkowski-Kraft

$$K^\mu = \gamma \left(\frac{\vec{F} \cdot \vec{v}}{c}, \vec{F} \right). \quad (5.60)$$

Durch Hinzufügen einer 0-Komponente können wir den Vierer-Impuls definieren,

$$p^\mu = m u^\mu = m \gamma (c, \vec{v}). \quad (5.61)$$

Für die 0-Komponente des Vierer-Impulses folgt

$$\begin{aligned} cp^0 &= m \gamma c^2 = \frac{m c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = m c^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\stackrel{\text{Taylor}}{\approx} m c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \frac{3}{8} \frac{v^4}{c^4} + \dots \right) \\ &\approx \underbrace{m c^2}_{\text{Ruheenergie}} + \underbrace{\frac{1}{2} m v^2}_{\text{n.-rel. kin. Energie}} + \underbrace{\frac{3}{8} m \frac{v^4}{c^2}}_{\text{erste rel. Korrektur}} + \dots \end{aligned} \quad (5.62)$$

Daraus ist ersichtlich, dass es sich bei cp^0 um die Energie handeln muss

$$p_0 = \frac{E}{c},$$

wobei E die gesamte (kinetische + Ruhe-) Energie ist. Hier ist die *Ruhemasse* m ein Lorentz-Skalar. Auch γm wird manchmal als (relativistische) „Masse“ bezeichnet (ist allerdings kein Lorentz-Skalar). Mit

$$\begin{aligned} p^2 &= p_\mu p^\mu = p_0^2 - \vec{p}^2 = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 \\ &= m^2 u_\mu u^\mu = m^2 c^2 \end{aligned}$$

erhalten wir

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}. \quad (5.63)$$

Für ein Teilchen in Ruhe ist $\vec{p} = 0$ und damit

$$E = mc^2 \quad (5.64)$$

die sog. *Ruheenergie* eines Teilchens mit Masse m . Der Vierer-Impuls $p^\mu = mu^\mu = m\gamma(c, \vec{v})$ setzt sich also aus $p_0 = m\gamma c$ und den Raumkomponenten $\vec{p} = m\gamma\vec{v}$ zusammen. Mit dem Vierer-Impuls können wir die Bewegungsgleichung (5.59) in die Form

$$\frac{d}{d\tau} p^\mu = K^\mu, \quad (5.65)$$

bringen, die für die Raumkomponenten große Ähnlichkeit mit dem Newtonsche Gesetz hat. Die Raumkomponenten dieser Gleichung sind

$$\frac{d}{d\tau} \vec{p} = \gamma \frac{d}{dt} \vec{p} = \gamma \vec{F}. \quad (5.66)$$

Im kräftefreien Fall ($\vec{F} = 0$) gilt für alle IS

$$\begin{aligned} \vec{p} &= m\gamma\vec{v} = \text{const.} \\ E &= cp^0 = \text{const.} \end{aligned}$$

Kapitel 6

Kovariante Formulierung der Elektrodynamik

6.1 Maxwell-Gleichungen

Wie wir im Abschnitt 5.5 gesehen haben, werden die Gesetze der klassischen Mechanik durch die Spezielle Relativitätstheorie (SRT) drastisch revidiert. Die Gesetze der Elektrodynamik (Maxwell-Gleichungen) bleiben jedoch auch in der SRT in allen IS gültig! Der Grund dafür ist natürlich, dass die SRT so konstruiert ist, dass die Lichtausbreitung (5.16) und somit die Maxwell-Gleichungen invariant sind. Trotzdem können wir die Maxwell-Gleichungen noch so umschreiben, dass sie *manifest* Lorentz-kovariant sind. Wir beginnen mit folgender empirischen Tatsache: Die *elektrische Ladung* q (eines Teilchens) ist eine Lorentz-Invariante (ein Lorentz-Skalar). Dies gilt aber nicht für die *Ladungsdichte* ρ und die *Stromdichte* $\vec{j} = \rho\vec{v}$.

Weil sich ein Volumen V_0 durch Lorentz-Kontraktion in einem bewegten IS auf $V = V_0/\gamma$ zusammenzieht, gilt für die Ladungsdichte

$$\rho = \frac{dq}{dV} = \gamma \frac{dq}{dV_0} = \gamma\rho_0. \quad (6.1)$$

Die Ladungsdichte ρ_0 im Ruhesystem ist (ähnlich der Ruhemasse) ein Lorentz-Skalar. Wir definieren nun den Vierer-Vektor der Stromdichte als

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j}) = (c\rho, \vec{v}\rho) = \rho_0\gamma(c, \vec{v}) = \rho_0 u^\mu.$$

Die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (6.2)$$

kann dann kovariant als

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (6.3)$$

geschrieben werden. Mit dem d'Alembert- (oder Box-) Operator $\square = -\partial_\mu \partial^\mu$ können die Wellengleichungen für die elektromagnetischen Potentiale ebenfalls kovariant geschrieben werden,

$$\left. \begin{array}{l} \frac{1}{c} \square \phi = -\mu_0 c \rho \\ \square \vec{A} = -\mu_0 \vec{j} \end{array} \right\} \rightarrow \square A^\mu = -\mu_0 j^\mu, \quad (6.4)$$

wobei wir das Vierer-Potential $A^\mu := \left(\frac{\phi}{c}, \vec{A} \right)$ eingeführt haben. Da die Potentiale nur bis auf eine Eichtransformation definiert sind, kann noch eine zusätzliche Eichbedingung gefordert werden. Eine manifest kovariante Eichbedingung ist die *Lorenz-Eichung*,

$$\partial_\mu A^\mu = 0, \quad (6.5)$$

oder explizit,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0.$$

Im Gegensatz dazu ist die Coulomb-Eichung,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0, \quad (6.6)$$

nicht manifest kovariant.

Die physikalischen Felder sind Ableitungen der Potentiale; das Magnetfeld \vec{B} erhält man als

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad \Leftrightarrow \quad B_x = \partial_y A_z - \partial_z A_y,$$

und zyklisch. Elektrische und magnetische Felder transformieren sich unter LT weder als Skalare noch als Vierer-Vektoren, sondern als Komponenten eines Tensors zweiter Stufe, des *Feldstärketensors*,

$$F^{\mu\nu} := \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu.$$

Bemerkung: $F^{\mu\nu}$ ist ein antisymmetrischer Tensor, d.h. $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$ (insbesondere $F^{\mu\mu} = 0$). Explizit ergibt sich

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_x}{c} & -\frac{E_y}{c} & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ \frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.7)$$

Die inhomogenen Maxwell-Gleichungen können damit sehr kompakt geschrieben werden,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu. \quad (6.8)$$

Daraus folgen die bekannten Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned}\nu = i = 1, 2, 3 &\Rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c^2} \dot{\vec{E}} = \mu_0 \vec{j}, \\ \nu = 0 &\Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}.\end{aligned}$$

Die homogenen Maxwell-Gleichungen,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} + \dot{\vec{B}} = 0,$$

können ebenfalls durch den Feldstärke-Tensor ausgedrückt werden,

$$\partial^\mu F^{\nu\sigma} + \partial^\nu F^{\sigma\mu} + \partial^\sigma F^{\mu\nu} = 0. \quad (6.9)$$

Oder etwas eleganter mit dem *dualen Feldstärketensor*:

$$\bar{F}^{\mu\nu} := \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}, \quad (6.10)$$

wobei

$$\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} := \begin{cases} +1 & \text{falls } \mu\nu\rho\sigma = 0123 \text{ oder zyklisch vertauscht,} \\ -1 & \text{falls } \mu\nu\rho\sigma = 3210 \text{ oder zyklisch vertauscht,} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (6.11)$$

Wir bemerken, dass $\bar{F}^{\mu\nu}$ ebenfalls antisymmetrisch ist, $\bar{F}^{\mu\nu} = -\bar{F}^{\nu\mu}$. Von „Dualität“ spricht man, da $\bar{F}^{\mu\nu}$ durch die Ersetzung $\vec{B} \leftrightarrow -\frac{\vec{E}}{c}$ aus $F_{\mu\nu}$ hervorgeht. Man findet¹

$$\bar{F}^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -B_x & -B_y & -B_z \\ B_x & 0 & \frac{E_z}{c} & \frac{-E_y}{c} \\ B_y & \frac{-E_z}{c} & 0 & \frac{E_x}{c} \\ B_z & \frac{E_y}{c} & \frac{-E_x}{c} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.12)$$

Nun kann man schreiben:

$$\begin{aligned}\text{Inhomogene Maxwell-Gleichungen:} & \quad \partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu, \\ \text{Homogene Maxwell-Gleichungen:} & \quad \partial_\mu \bar{F}^{\mu\nu} = 0.\end{aligned}$$

Durch Kontraktion erhalten wir die Invarianten des elektromagnetischen Feldes (d.h. Skalare unter LT),

$$F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = 2 \left(\vec{B}^2 - \frac{1}{c^2} \vec{E}^2 \right), \quad (6.13)$$

$$F_{\mu\nu} \bar{F}^{\mu\nu} = -\frac{4}{c} \vec{E} \cdot \vec{B}. \quad (6.14)$$

¹In der Literatur findet man verschiedene Definitionen des (dualen) Feldstärketensors. Unsere Definition stimmt mit der in [3] überein. Mit einer anderen Definition erhält man in [2] $\bar{F}^{\mu\nu}$ aus $F_{\mu\nu}$ durch die Vertauschung $\vec{B} \leftrightarrow \frac{1}{c} \vec{E}$. An dieser Stelle sei auch erwähnt, dass es verschiedene *Konventionen* gibt, den Tensor $g_{\mu\nu}$ zu definieren. (5.46) entspricht der Konvention (+, -, -, -), man findet aber auch sehr oft die Konvention (-, +, +, +). Die Länge x^2 eines Vierer-Vektors ist jeweils konstant.

Transformation von \vec{E} und \vec{B} unter Lorentz-Transformation Λ (siehe Übungen):

$$(F')^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\sigma \Lambda^\nu_\rho F^{\sigma\rho}. \quad (6.15)$$

Daraus folgt z.B. (LT entlang der z -Achse, $\beta = \frac{v_z}{c}$, $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$)

$$B'_x = \gamma \left(B_x + \frac{\beta}{c} E_y \right), \quad (6.16)$$

$$\text{und } E'_x = \gamma (E_x - \beta c B_y). \quad (6.17)$$

Das heißt, elektrische und magnetische Felder können bei LT ineinander übergehen.

Ein geladenes Teilchen im e.m. Feld erfährt die Lorentz-Kraft,

$$\vec{F} = q \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right). \quad (6.18)$$

Mit (5.60) erhalten wir die dazu gehörende Minkowski-Kraft,

$$\begin{aligned} K^\mu &= \gamma \left(\frac{\vec{F} \cdot \vec{v}}{c}, \vec{F} \right) \\ &= \gamma q \left(\frac{\vec{E} \cdot \vec{v}}{c}, \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \\ &= \dots = q F^{\mu\nu} u_\nu. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Dabei ist $K^0 c = \gamma q \vec{E} \cdot \vec{v}$ die vom elektromagnetischen Feld am Teilchen geleistete Arbeit pro (Eigen-) Zeit. Die Form (6.19) ist in allen IS gleich, d.h. (6.19) ist Lorentz-kovariant.

6.2 Lagrange-Formalismus

Wir versuchen nun, die relativistische Mechanik und die Maxwell-Gleichungen aus einer Lagrange-Funktion herzuleiten, mit dem Ziel, die Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen und dem elektromagnetischen Feld zu untersuchen. Nicht-relativistisch erhält man aus der Lagrange-Funktion L durch Integration über die Zeit t die Wirkung,

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t) dt. \quad (6.20)$$

Das Prinzip der kleinsten Wirkung besagt dann, dass die Wirkung extremal (in der Regel minimal) ist,

$$\delta S = 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{\delta S}{\delta q_i} = 0. \quad (6.21)$$

Diese Forderung ist gleichbedeutend mit den Euler-Lagrange-Gleichungen,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots). \quad (6.22)$$

Dabei ist

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (6.23)$$

der zur Koordinate q_i gehörende *kanonische Impuls*.

Im Hamilton-Formalismus konstruiert man aus L die Hamilton-Funktion

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L = H(\{q_i, p_i\}). \quad (6.24)$$

Die Dynamik wird dann durch die Hamilton-Gleichungen

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (6.25)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (6.26)$$

bestimmt. Bei der Quantisierung werden q und p durch Operatoren und Poisson-Klammern durch Kommutatoren ersetzt,

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad \xrightarrow{QM} \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}.$$

Beispiel: Teilchen im Potential V ,

$$\begin{aligned} L &= \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) \\ \vec{p} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m\dot{\vec{r}}, \\ \Rightarrow H &= \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - L = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \\ \dot{\vec{p}} &= m\ddot{\vec{r}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) = \vec{F}(\vec{r}) \quad (\text{Newton}). \end{aligned}$$

Soll die Elektrodynamik oder die relativistische Mechanik im Lagrange-Formalismus beschrieben werden, müssen wir uns zuerst um das folgende Problem kümmern: Der Lagrange-Formalismus ist (bisher) nicht Lorentz-kovariant. Abhilfe schafft dieselbe Idee wie bei der relativistischen Kinematik: wir benützen wieder die Eigenzeit τ zur Parametrisierung einer Bahn $x^\mu = x^\mu(\tau)$ eines Teilchens,

$$S = \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \tilde{L} \left(x^\mu, u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}, \tau \right),$$

wobei S und \tilde{L} Lorentz-Skalare sind. Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{d\tau} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial u^\mu} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial x^\mu} = 0$$

ist nun Lorentz-kovariant. Es bleibt, die Frage zu klären, wie \tilde{L} gewählt werden muss.

Beispiel: Freies Teilchen, $V = 0$, nur kinetische Energie (inkl. Ruheenergie). $\Rightarrow \tilde{L}$ kann nur von u^μ , aber nicht von x^μ abhängen. Bilde Skalarprodukt $u_\mu u^\mu = c^2$. Ansatz:

$$\begin{aligned} \tilde{L} &= -m u_\mu u^\mu, \\ p_\mu &= -\frac{\partial \tilde{L}}{\partial u^\mu} = m u_\mu, \\ \text{Euler-Lagrange: } \frac{d}{d\tau} p_\mu &= -\frac{\partial \tilde{L}}{\partial x^\mu} = 0, \\ \Rightarrow p_\mu &= \text{const.} \end{aligned}$$

Wir ersetzen hier zunächst $u_\mu u^\mu$ nicht durch c^2 , weil diese Beziehung nur für die physikalische Bahn gilt, nicht aber für alle Bahnen, über welche variiert wird. Teilchen im elektromagnetischen Feld: Bilde Skalar aus u^μ und A^μ ,

$$\begin{aligned} \tilde{L} &= -m u_\mu u^\mu - q u_\mu A^\mu, \\ \Rightarrow p_\mu &= -\frac{\partial \tilde{L}}{\partial u^\mu} = m u_\mu + q A_\mu, \\ \Rightarrow \frac{d}{d\tau} p_\mu &= m \frac{d}{d\tau} u_\mu + q \frac{d}{d\tau} A_\mu = -\frac{d}{d\tau} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial u^\mu} \stackrel{\text{Euler-Lagrange}}{=} -\frac{\partial \tilde{L}}{\partial x^\mu} = q \frac{\partial}{\partial x^\mu} (u^\nu A_\nu), \\ \Rightarrow K_\mu &= m \frac{d}{d\tau} u_\mu = q \left(\partial_\mu (u^\nu A_\nu) - \frac{d}{d\tau} A_\mu \right). \end{aligned} \quad (6.27)$$

Aus den Raumkomponenten der Lorentzkraft ergibt sich ²

$$\vec{K} = \gamma \vec{F} = \gamma q (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

und

$$K_0 = \frac{\gamma}{c} \vec{F} \cdot \vec{v} = \frac{\gamma q}{c} \vec{E} \cdot \vec{v}.$$

Können die Maxwell-Gleichungen auch kovariant aus einer Lagrange-Funktion abgeleitet werden? Ja, die Wirkung ist das *Funktional*

$$S[F_{\mu\nu}] = \int dt L[F_{\mu\nu}] \quad (6.28)$$

$$\text{mit } L[F_{\mu\nu}] = \int d^3r \underbrace{\left(-\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \mu_0 j_\mu A^\mu \right)}_{=\mathcal{L}(\vec{r}, t): \text{Lagrange-Dichte}}. \quad (6.29)$$

²Man beachte $\frac{dA}{dt} \neq \frac{\partial A}{\partial t}$.

Dabei hängen die Komponenten $F^{\mu\nu}$ vom Ort und von der Zeit ab. Zusammengefasst:

$$S[F_{\mu\nu}] = \int \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Lorentz-} \\ \text{Skalar}}}{d^4x} \underbrace{\left(-\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \mu_0 j_\mu A^\mu \right)}_{= f(x) = \text{Lorentz-Dichte (Lorentz-Skalar)}}. \quad (6.30)$$

Für die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\delta S = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \partial_\mu \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \partial_\mu A_\nu} - \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta A_\nu} = 0 \quad (6.31)$$

benötigt man nun die *Funktional-Ableitung*:

$$\begin{aligned} \text{eine Variable } x: \quad \frac{dg(x)}{dx} &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{g(x + \epsilon) - g(x)}{\epsilon}. \\ \text{mehrere:} \quad \frac{\partial g(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{g(x_1, \dots, x_i + \epsilon, \dots, x_n) - g(x_1, \dots, x_n)}{\epsilon}. \\ \text{überabzählbar viele:} \quad \frac{\delta G[f(x)]}{\delta f(y)} &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{G[f(x) + \epsilon \delta(x - y)] - G[f(x)]}{\epsilon}. \end{aligned}$$

Bemerkung:

Das Argument eines Funktionals ist eine Funktion, daher wird mit $\epsilon \delta(x - y)$ eine „infinitesimale Funktion“ an der Stelle y dazu addiert.

Also sind die Euler-Lagrange-Gleichungen (6.31) mit

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta A_\nu} = -\mu_0 j^\nu, \quad (6.32)$$

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \partial_\mu A_\nu} = -F^{\mu\nu}, \quad (6.33)$$

gerade die *inhomogenen Gleichungen* $\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu$. Die homogenen Maxwell-Gleichungen sind automatisch erfüllt, weil wir $F^{\mu\nu}$ durch die Potentiale ausgedrückt haben.

Teil III

Relativistische Quantenmechanik

Kapitel 7

Einteilchentheorie: Dirac-Gleichung

Die nichtrelativistische Quantenmechanik kann eine Reihe physikalischer Phänomene und Situationen nicht angemessen beschreiben, z.B. die Natur des Spins und dessen Zusammenhang mit der Teilchenstatistik, die Spin-Bahn-Kopplung, und im allgemeinen die Bewegung relativistischer Teilchen.

Wir versuchen nun, eine relativistische quantenmechanische Beschreibung für ein einzelnes Teilchen zu finden. Dazu gehen wir von der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (7.1)$$

aus, wobei der Hamiltonoperator \hat{H} dadurch konstruiert wird, dass in der klassischen Hamiltonfunktion $H(\vec{r}, \vec{p})$ die Variablen \vec{r} und \vec{p} durch den Orts- und Impulsoperator ersetzt werden:

$$\begin{aligned} \vec{r} &\rightarrow \hat{\vec{r}}, \\ \vec{p} &\rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = -i\hbar \vec{\nabla}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Für ein freies ($V(\vec{r}) = 0$), nicht-relativistisches Teilchen gilt dann

$$H = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \hat{H} = -\hbar^2 \frac{\Delta}{2m}. \quad (7.3)$$

Daraus ergibt sich mit (7.1)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t). \quad (7.4)$$

(7.4) ist aber keine geeignete relativistische Wellengleichung, da sie *nicht Lorentz-kovariant* ist, d.h. nicht in jedem Inertialsystem die gleiche Form hat. (Überprüfen durch Einsetzen der LT.) Der Grund dafür ist, dass wir in (7.3) den nicht-relativistischen Ausdruck für die kinetische Energie eingesetzt haben.

7.1 Klein-Gordon-Gleichung

Um eine Lorentz-kovariante Wellengleichung aufzustellen, muss die relativistische Energie

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (7.5)$$

benützt werden. Allerdings ist E selber nicht Lorentz-invariant (kein Skalar unter LT), wohl aber der Vierer-Impuls

$$p_\mu = \left(\frac{E}{c}, -\vec{p} \right).$$

Das Skalarprodukt

$$p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - p^2 = m^2 c^2$$

ist invariant (Skalar). Mit Regel (7.2) würde sich daraus

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4} \psi$$

ergeben. Die Wurzel des Differentialoperators auf der rechten Seite ist aber problematisch, denn sie enthält beliebig hohe Ableitungen von ψ , was zu einer schwer zu lösenden Differentialgleichung führt. Wir können aber (7.5) quadrieren

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

und Regel (7.2) anwenden, $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$, und erhalten

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4) \psi,$$

oder in kompakter und manifest kovarianter Form:

$$\left(-\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0. \quad (7.6)$$

Dies ist die freie **Klein-Gordon-Gleichung** (E. Schrödinger 1926, W. Gordon 1926, O. Klein 1927). Hier tritt wie in den Maxwell-Gleichungen der d'Alembert-Operator ($\square = -\partial_\mu \partial^\mu$) auf. Indem wir (7.6) von links mit ψ^* multiplizieren und die komplex konjugierte Gleichung subtrahieren, erhalten wir

$$\psi^* \partial_\mu \partial^\mu \psi - \psi \partial_\mu \partial^\mu \psi^* = 0.$$

Dies kann umgeformt werden zu

$$\partial_\mu \underbrace{(\psi^* \partial^\mu \psi - \psi \partial^\mu \psi^*)}_{= \frac{2m\hbar}{c} j^\mu \text{ (Vierer-Strom)}} = 0.$$

Diese Gleichung hat die Form einer *Kontinuitätsgleichung*,

$$\partial_\mu j^\mu = \partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \quad (7.7)$$

mit dem Vierer-Strom $j^\mu = (c\rho, \vec{j})$, wobei

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad \text{und} \quad (7.8)$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right). \quad (7.9)$$

Hier stoßen wir aber auf folgendes Problem: Analog zur nicht-relativistischen Theorie sollte

$$\rho = |\psi|^2 \stackrel{!}{\geq} 0$$

gelten, denn wir möchten ρ als Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthaltsort des Teilchens interpretieren. Als solche darf ρ aber nicht negativ sein. Da (7.6) eine DGL 2. Ordnung ist, und damit ψ und $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ bei $t = 0$ unabhängig voneinander gewählt werden können, ist

$$\rho < 0 \quad \text{möglich!} \quad \downarrow$$

Daher kann ρ keine *Wahrscheinlichkeitsdichte* (≥ 0) sein, und die Klein-Gordon-Gleichung ist deshalb keine befriedigende relativistische, quantenmechanische Einteilchentheorie.¹

7.2 Dirac-Gleichung

Um das Problem der negativen Wahrscheinlichkeitsdichten zu vermeiden, versuchen wir es mit einer DGL 1. Ordnung, von der Form

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\hbar c}{i} \alpha^k \partial_k + \beta mc^2 \right) \psi = H\psi, \quad (7.10)$$

wobei die Summe über $k = 1, 2, 3$ läuft. Allerdings kann mit skalaren α^k, β die Gleichung (7.10) nicht Lorentz-kovariant sein (nicht einmal invariant unter räumlichen Drehungen). Als Ausweg nehmen wir an, α^k und β seien hermitesche $N \times N$ Matrizen und ψ ein N -Vektor,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}. \quad (7.11)$$

Folgende Forderungen müssen von (7.10) erfüllt werden:

¹Es ist aber möglich, ausgehend von der Klein-Gordon-Gleichung eine quantisierte Feldtheorie aufzustellen.

(i) Jede Komponente von ψ muss wegen

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad \rightarrow \quad H^2$$

die Klein-Gordon-Gleichung (7.6) erfüllen.

(ii) Lorentz-Kovarianz.

(iii) Existenz eines erhaltenen Vierer-Stroms (d.h. $\partial_\mu j^\mu = 0$), wobei $j^0 = c\rho \geq 0$ eine *nicht-negative* Dichte ist.

Bedingung (i): Wende nochmals $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ auf (7.10) an:

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi &= -\hbar^2 c^2 \frac{1}{2} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j \psi + \frac{\hbar m c^3}{i} (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \partial_i \psi + \beta^2 m^2 c^4 \psi \\ &\stackrel{!}{=} (-\hbar^2 c^2 \partial_i \partial_i + m^2 c^4) \psi. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Dabei wurde

$$\begin{aligned} \alpha^i \alpha^j \partial_i \partial_j &= \alpha^i \alpha^j \partial_j \partial_i = \alpha^j \alpha^i \partial_i \partial_j \\ \Rightarrow \alpha^i \alpha^j \partial_i \partial_j &= \frac{1}{2} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j \end{aligned}$$

und $\Delta = \sum_i \partial_i^2 = \partial_i \partial_i$ benutzt. Aus (7.12) folgt durch Koeffizientenvergleich für α_i und β :

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta^{ij} \mathbf{1}_N, \quad (7.13)$$

$$\alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0, \quad (7.14)$$

$$(\alpha^i)^2 = \beta^2 = \mathbf{1}_N. \quad (7.15)$$

Eigenschaften der Matrizen α_i und β :

(a) Aus (7.15) folgt, dass die Hermiteschen $N \times N$ -Matrizen α_i, β nur Eigenwerte ± 1 haben können.

(b) Multipliziere (7.14) mit β und benütze (7.15):

$$\beta \alpha^i \beta = -\alpha^i.$$

Mit der zyklischen Invarianz der Spur folgt

$$\begin{aligned} -\text{Tr}(\alpha^i) &= \text{Tr}(\beta \alpha^i \beta) = \text{Tr}(\beta^2 \alpha^i) = \text{Tr}(\alpha^i), \\ \Rightarrow \text{Tr}(\alpha^i) &= 0. \end{aligned}$$

Multipliziere (7.14) mit α^i und erhalte analog

$$-\text{Tr}(\beta) = \text{Tr}(\alpha^i \beta \alpha^i) = \text{Tr}(\beta) = 0.$$

Insgesamt: $\text{Tr}(\alpha^i) = \text{Tr}(\beta) = 0$.

(c) (b) $\Rightarrow 0 = \text{Spur} = \text{Summe der Eigenwerte}$.

(a) \Rightarrow Eigenwerte sind ± 1 .

\Rightarrow Gleiche Anzahl der Eigenwerte $+1$ wie -1 . $\Rightarrow N$ gerade.

$N = 2$ geht nicht, da es nur 3 antikommutierende 2×2 -Matrizen gibt (z.B. $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$) und (7.13), (7.14) so nicht erfüllt werden könnte. $N = 4$ geht, z.B. mit den hermiteschen und antikommutierenden Matrizen

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad (7.16)$$

wobei σ^i die Pauli-Matrizen sind. Gleichung (7.10) mit (7.16) ist die (freie) *Dirac-Gleichung* in Standard-Darstellung. Der Zustand wird durch einen *Vierer-Spinor* ψ dargestellt.

Bedingung (ii): Um Lorentz-Kovarianz nachzuprüfen, multipliziere die Dirac-Gleichung (7.10) von links mit β/c :

$$-i\hbar \underset{=: \gamma^0}{\overset{= \frac{\partial_t}{c}}{\beta}} \partial_0 \psi - i\hbar \underbrace{\beta \alpha^i}_{=: \gamma^i} \partial_i \psi + mc\psi = 0.$$

Mit den Definitionen ($i = 1, 2, 3$):

$$\gamma^0 := \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad (7.17)$$

$$\gamma^i := \beta \alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.18)$$

lässt sich die *Dirac-Gleichung* schreiben als

$$\left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0. \quad (7.19)$$

Die γ^μ mit $\mu = 0, 1, 2, 3$ sind die *Dirac-Matrizen in der Standarddarstellung*. Diese Gleichung ist Lorentz-kovariant, weil das Vierer-Skalarprodukt $\gamma^\mu \partial_\mu$ durch LT erhalten bleibt. Allerdings muss der Vierer-Spinor selber auch transformiert werden (dazu später).

Eigenschaften der γ -Matrizen:

(a) γ^0 hermitesch, γ^i anti-hermitesch:

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0 \quad (\gamma^i)^\dagger = (\beta \alpha^i)^\dagger = (\alpha^i)^\dagger \beta^\dagger = \alpha^i \beta = -\beta \alpha^i = -\gamma^i. \quad (7.20)$$

(b)

$$(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}, \quad (\gamma^i)^2 = -\mathbb{1}. \quad (7.21)$$

(c)

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}. \quad (7.22)$$

Notation:

(a) Feynman „slash“:

$$\not{v} := \gamma^\mu v_\mu = \gamma^0 v_0 - \vec{\gamma} \cdot \vec{v}. \quad (7.23)$$

(b) Herunterziehen des Index:

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\nu. \quad (7.24)$$

Nun betrachten wir eine Basistransformation für den Vierer-Spinor. Sei M eine reguläre 4×4 Matrix, so dass

$$\tilde{\psi} = M\psi \quad \Leftrightarrow \quad \psi = M^{-1}\tilde{\psi}. \quad (7.25)$$

Daraus folgt unter Benützung der Dirac-Gleichung (7.19),

$$M \left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) M^{-1} \tilde{\psi} = 0,$$

und schließlich

$$\left(-i\tilde{\gamma}^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \tilde{\psi} = 0, \quad (7.26)$$

mit $\tilde{\gamma}^\mu = M\gamma^\mu M^{-1}$. So erhält man zur Standard-Darstellung äquivalente Darstellungen der Dirac-Gleichung (Beispiele: Majorana-Darstellung, Chirale Darstellung).

Jetzt betrachten wir das Verhalten der Dirac-Gleichung unter LT,

$$x' = \Lambda x + a \quad (7.27)$$

Wir machen den Ansatz

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x), \quad (7.28)$$

wobei $S(\Lambda)$ eine 4×4 Matrix bezeichnet². Aus der Dirac-Gleichung

$$\left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0$$

²Die unitäre 4×4 Matrix $S(\Lambda)$ wirkt auf den Raum der 4-Spinoren ψ im Unterschied zur reellen symmetrischen 4×4 Matrix Λ , welche auf den Minkowski-Raum (Raumzeit) wirkt.

erhalten wir mit (7.27), (7.28) und $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu$,

$$S(\Lambda) \left(-i\gamma^\mu \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu + \frac{mc}{\hbar} \right) S(\Lambda)^{-1} \psi'(x') = 0,$$

und weiter

$$\left(-iS(\Lambda) \Lambda^\nu{}_\mu \gamma^\mu S(\Lambda)^{-1} \partial'_\nu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x') = 0.$$

Dies sollte äquivalent sein zu

$$\left(-i\gamma^\mu \partial'_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(x') = 0.$$

Durch Vergleich ergibt sich die Bedingung

$$S(\Lambda)^{-1} \gamma^\nu S(\Lambda) \stackrel{!}{=} \Lambda^\nu{}_\mu \gamma^\mu. \quad (7.29)$$

Diese Gleichung muss nun für gegebenes Λ nach S aufgelöst werden. Die Form von $S(\Lambda)$ findet man über eine infinitesimale LT,

$$\Lambda^\nu{}_\mu = g^\nu{}_\mu + \Delta\omega^\nu{}_\mu, \quad (7.30)$$

wobei $g^\nu{}_\mu$ die Identität und $\Delta\omega^\nu{}_\mu$ eine kleine Abweichung ist. Die Bedingung an Λ lautet

$$\forall x \quad (x')^2 = x^2.$$

Mit $x' = \Lambda x$, $x^2 = x^T g x$ (mit der Transposition T) und $(x')^2 = x'^T g x' = x^T \Lambda^T g \Lambda x$ gilt daher

$$\Lambda^T g \Lambda = g \quad (7.31)$$

bzw., wegen $\Lambda^T = \Lambda$,

$$g = \Lambda g \Lambda. \quad (7.32)$$

In Komponentenschreibweise ergibt dies

$$g^{\lambda\rho} = \Lambda^\lambda{}_\mu g^{\mu\nu} \Lambda^\rho{}_\nu. \quad (7.33)$$

Mit (7.30) ergibt sich hieraus

$$g^{\lambda\rho} = (g^\lambda{}_\mu + \Delta\omega^\lambda{}_\mu) g^{\mu\nu} (g^\rho{}_\nu + \Delta\omega^\rho{}_\nu) = g^{\lambda\rho} + \Delta\omega^{\lambda\rho} + \Delta\omega^{\rho\lambda} + O(\Delta\omega^2)$$

und somit

$$\Delta\omega^{\lambda\rho} = -\Delta\omega^{\rho\lambda}. \quad (7.34)$$

D.h. $\Delta\omega$ ist ein antisymmetrischer Tensor, und hat damit 6 unabhängige Elemente,

$$\Delta\omega = \begin{pmatrix} 0 & \Delta\omega^{01} & \Delta\omega^{02} & \Delta\omega^{03} \\ -\Delta\omega^{01} & 0 & \Delta\omega^{12} & \Delta\omega^{13} \\ -\Delta\omega^{02} & -\Delta\omega^{12} & 0 & \Delta\omega^{23} \\ -\Delta\omega^{03} & -\Delta\omega^{13} & -\Delta\omega^{23} & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.35)$$

Beispiele:

$$\begin{aligned} \Delta\omega^{01} = \Delta\beta, & \quad (\text{andere} = 0) : \text{ infinitesimaler Boost in } x\text{-Richtung,} \\ \Delta\omega^{12} = \Delta\phi, & \quad (\text{andere} = 0) : \text{ räumliche Drehung um die } z\text{-Achse.} \end{aligned}$$

Selbstverständlich gilt für die Identität

$$\Lambda^\nu{}_\mu = g^\nu{}_\mu \Rightarrow S(\Lambda) = \mathbb{1}.$$

Damit entwickeln wir $S(\Lambda)$ nach $\tau = \mathcal{O}(\Delta\omega)$:

$$\begin{aligned} S(\Lambda) &= \mathbb{1} + \tau + \mathcal{O}(\Delta\omega^2), \\ S(\Lambda)^{-1} &= \mathbb{1} - \tau + \mathcal{O}(\Delta\omega^2). \end{aligned} \quad (7.36)$$

Für (7.29) folgt somit

$$\begin{aligned} (\mathbb{1} - \tau)\gamma^\mu(\mathbb{1} + \tau) &= \gamma^\mu + \gamma^\mu\tau - \tau\gamma^\mu \stackrel{(7.30)}{=} \gamma^\mu + \Delta\omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu, \\ \Rightarrow \gamma^\mu\tau - \tau\gamma^\mu &= \Delta\omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu. \end{aligned} \quad (7.37)$$

Zur Lösung τ von (7.37) beweisen wir folgenden Satz:

Es gilt:

1. Die Lösung von (7.37) ist eindeutig.
2. Die Lösung von (7.37) ist gegeben durch

$$\tau = -\frac{i}{4}\Delta\omega^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu} \quad (7.38)$$

$$\text{mit } \sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]. \quad (7.39)$$

Beweis: Die Lösung kann direkt durch Einsetzen überprüft werden. Zum Beweis der Eindeutigkeit nehmen wir an, τ_1 und τ_2 seien Lösungen für (7.37). Setzt man diese in (7.37) ein und zieht die Gleichungen voneinander ab, erhält man

$$[\gamma^\mu, \Delta\tau] = 0 \quad (\mu = 0, 1, 2, 3).$$

Als Transformationsmatrix für Spinoren muss $S(\Lambda)$ unitär sein, (7.28). Alle unitären Operatoren lassen sich als e^{iA} schreiben, wobei A hermitesch ist. Wegen (7.36) muss daher τ/i hermitesch sein. Somit hat $\Delta\tau/i$ die Form

$$\Delta\tau/i = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C \end{pmatrix}, \quad A^\dagger = A, \quad C^\dagger = C.$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} 0 &= [\Delta\tau/i, \gamma^0] = \begin{pmatrix} A & -B \\ B^\dagger & -C \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} A & B \\ -B^\dagger & -C \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -B \\ B^\dagger & 0 \end{pmatrix} = 0, \\ \Rightarrow B &= 0. \end{aligned}$$

Genauso

$$\begin{aligned} 0 &= [\Delta\tau/i, \gamma^i] = \begin{pmatrix} 0 & A\sigma^i \\ -C\sigma^i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i C \\ -\sigma^i A & 0 \end{pmatrix}, \\ \Rightarrow A\sigma^i &= \sigma^i C. \end{aligned} \tag{7.40}$$

Da die Pauli-Matrizen σ^i zusammen mit $\sigma^0 := \mathbb{1}_2$ linear unabhängig sind, kann man A und C durch diese Basis der 2×2 -Matrizen darstellen,

$$\begin{aligned} A &= a_\mu \sigma^\mu = a_0 \mathbb{1}_2 + a_k \sigma^k, \\ C &= c_\mu \sigma^\mu = c_0 \mathbb{1}_2 + c_k \sigma^k. \end{aligned}$$

Aus (7.40) folgt damit

$$\begin{aligned} a_0 \sigma^i + a_k \underset{=\delta_{ki}\sigma^0 + \epsilon^{kij}\sigma^j}{\overset{\uparrow}{\sigma^k \sigma^i}} &= c_0 \sigma^i + c_k \underset{=\delta_{ki}\sigma^0 + \epsilon^{ikj}\sigma^j}{\overset{\uparrow}{\sigma^i \sigma^k}} \\ a_i \sigma^0 + a_0 \sigma^i + a_k \epsilon^{kij} \sigma^j &= c_i \sigma^0 + c_0 \sigma^i - c_k \epsilon^{kij} \sigma^j. \end{aligned}$$

Wegen der Eindeutigkeit der Basisdarstellung folgt

$$\left. \begin{array}{l} a_i = c_i \\ a_0 = c_0 \\ a_k = -c_k \end{array} \right\} \Rightarrow a_\mu = c_\mu \left. \vphantom{\begin{array}{l} a_i = c_i \\ a_0 = c_0 \\ a_k = -c_k \end{array}} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} a_k = c_k = 0 \\ a_0 = c_0 = \lambda \in \mathbb{C}. \end{array}$$

Also $\Delta\tau/i = \lambda \mathbb{1}$. Da S unitär ist,

$$\det S = 1, \tag{7.41}$$

folgt

$$\begin{aligned} 1 &= \det S = \det(\mathbb{1} + \tau) = \underbrace{\det \mathbb{1}}_{=1} + \text{Tr}(\tau) + O(\Delta\omega^2), \\ \Rightarrow \text{Tr} \tau &= 0 \quad \Rightarrow \lambda = 0. \end{aligned}$$

Damit wird die Lösung von (7.37) eindeutig.

Bedingung (iii): Um einen erhaltenen Vierer-Strom zu konstruieren, definieren wir zum Vierer-Spinor

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (7.42)$$

mit dem hermitesch adjungierten Spinor

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \quad (7.43)$$

den *adjungierten Spinor*

$$\bar{\psi} := \psi^\dagger \gamma^0. \quad (7.44)$$

Multipliziere die Dirac-Gleichung von links mit $\bar{\psi}$:

$$\psi^\dagger \gamma^0 \left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0.$$

Adjungierte Relation (benütze $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0$):

$$\psi^\dagger \left(+i(\gamma^\mu)^\dagger \overleftarrow{\partial}_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \gamma^0 \psi = 0.$$

Dabei wirkt $\overleftarrow{\partial}_\mu$ nach links auf ψ^\dagger . Subtrahiere die Gleichungen voneinander:

$$\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \partial_\mu \psi + (\partial_\mu \psi^\dagger) (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 \psi = 0. \quad (7.45)$$

Wegen

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \begin{cases} +\gamma^\mu & : \mu = 0 \\ -\gamma^\mu & : \mu \neq 0 \end{cases} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$$

und $(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}$ erhält man aus (7.45)

$$\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu (\partial_\mu \psi) + (\partial_\mu \psi^\dagger) \gamma^0 \gamma^\mu \psi = 0.$$

Daraus erhält man die *Kontinuitätsgleichung*

$$\partial_\mu \underbrace{(\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi)}_{=: j^\mu} = 0$$

mit dem **Vierer-Strom**

$$j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi. \quad (7.46)$$

Die j^0 -Komponente ist positiv definit,

$$j^0 = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \psi = \sum_{\mu=1}^4 |\psi_\mu|^2 \geq 0 \quad (7.47)$$

und erlaubt damit die Interpretation als Wahrscheinlichkeitsdichte.

7.3 Lösungen der Dirac-Gleichung für freie Teilchen

Mit $\hbar = c = 1$ wird die Dirac-Gleichung (7.19) zu

$$(-i\gamma^\mu \partial_\mu + m)\psi = 0. \quad (7.48)$$

Die Translationsinvarianz dieser Gleichung (kein Potential $V(\vec{r})$) bewirkt einen erhaltenen Impuls. Die Lösungen sind also ebene Wellen

$$\psi(x) = u_k e^{-ik_\mu x^\mu} \quad (7.49)$$

mit $k_\mu = (E, -\vec{k})$ und $x^\mu = (t, \vec{r})$, d.h. $k_\mu x^\mu = Et - \vec{k} \cdot \vec{x}$. Setzt man diese Lösungen in (7.48) ein, folgt wegen $i\partial_\mu \rightarrow k_\mu$ das Eigenwertproblem

$$(-\gamma^\mu k_\mu + m)u_k = 0. \quad (7.50)$$

Dies ist ein Eigenwertproblem, bei dem für vorgegebenes \vec{k} die Energie E und der Spinor u_k gesucht werden. Die Existenz einer Lösung von (7.50) erfordert, dass $\det(-\gamma^\mu k_\mu + m) = 0$, woraus sich die relativistische Dispersionsrelation $E = \pm\sqrt{m^2 + \vec{k}^2}$ ergibt. Zur Lösung des Eigenwertproblems für freie Teilchen unterscheiden wir zwischen Teilchen mit Masse und solchen ohne Masse.

7.3.1 Ruhende Teilchen mit endlicher Masse

Mit $m > 0$ und $k_\mu = (E, \vec{0})$ folgt aus (7.50) die Eigenwertgleichung

$$(-\gamma^0 E + m)u_{k_0} = \begin{pmatrix} m - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m + E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m + E \end{pmatrix} u_{k_0} = 0, \quad (7.51)$$

mit den Lösungen

$$\text{positive Energie: } E = +m > 0 \Rightarrow u_{k_0}^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{k_0}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.52)$$

$$\text{negative Energie: } E = -m < 0 \Rightarrow v_{k_0}^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_{k_0}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.53)$$

Zurück in (7.49):

$$\text{positive Energie: } \psi_+^1(x) = e^{-imt} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_+^2(x) = e^{-imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.54)$$

$$\text{negative Energie: } \psi_-^1(x) = e^{+imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_-^2(x) = e^{+imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.55)$$

7.3.2 Teilchen mit endlichem Impuls und endlicher Masse

Mit $\vec{k} \neq 0$ und ($m > 0$) wird (7.50) zu

$$(\gamma^\mu k_\mu - m) u_k = 0 \quad \text{bzw.} \quad (7.56)$$

$$(\gamma^\mu k_\mu + m) v_k = 0, \quad (7.57)$$

wobei für die Lösungen v_k mit $E < 0$ das Vorzeichen von k umgedreht wurde, so dass auch hier $k_0 \geq 0$ ist. Außerdem gilt

$$\begin{aligned} (\gamma^\mu k_\mu - m) (\gamma^\nu k_\nu + m) &= (\gamma^\mu k_\mu + m) (\gamma^\nu k_\nu - m) = \gamma^\mu k_\mu \gamma^\nu k_\nu - m^2 \\ &= \underbrace{k_\mu k_\nu}_{=k_\nu k_\mu} \gamma^\mu \gamma^\nu - m^2 = \frac{1}{2} k_\mu k_\nu \underbrace{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}}_{=2g^{\mu\nu}} - m^2 \\ &= k_\mu k^\mu - m^2 = 0. \end{aligned}$$

Daraus folgt: Falls für einen beliebigen Vierer-Vektor v

$$\tilde{v} := (\gamma^\nu k_\nu \mp m) v \neq 0$$

gilt, dann ist \tilde{v} eine Lösung der jeweils anderen Gleichung (7.57) bzw. (7.56). Wir erhalten einen vollständigen Satz von unabhängigen Lösungen durch Anwenden von (7.56) auf die vollständige Eigenbasis für $\vec{k} = 0$, (7.52) und (7.53):

$$\begin{aligned} u_k^r &:= N_k^+ (\gamma^\mu k_\mu + m) u_{k_0}^r, \\ v_k^r &:= N_k^- (\gamma^\mu k_\mu - m) v_{k_0}^r, \end{aligned}$$

wobei N_k^\pm Normierungskonstanten sind. Ausserdem definieren wir für $r = 1, 2$

$$u_{k_0}^r = \begin{pmatrix} \chi_r \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.58)$$

$$v_{k_0}^r = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_r \end{pmatrix}, \quad (7.59)$$

wobei

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Die anderen 4 Möglichkeiten sind linear abhängig. Man erhält

$$N_k^+ = N_k^- = \frac{1}{\sqrt{2m(m+E)}} \quad \text{und} \quad (7.60)$$

$$u_k^r = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \chi_r \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{\sqrt{2m(m+E)}} \chi_r \end{pmatrix}, \quad (7.61)$$

$$v_k^r = \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{\sqrt{2m(m+E)}} \chi_r \\ \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \chi_r \end{pmatrix}. \quad (7.62)$$

Für $\vec{k} = 0$ und $E = m$ erhält man wieder (7.52) und (7.53). Man beachte, dass die Lösungen v_k^r zu betragsmässig beliebig grossen negativen Energien $E = -\sqrt{m^2 + \vec{k}^2}$ gehören. Dies ist insofern problematisch, als ein solches System durch Zerfälle beliebig viel Energie abgeben und somit instabil wäre (s. Abschnitt 7.7 unten).

7.3.3 Masselose Teilchen

Beispiele für Teilchen mit $m = 0$:

- Neutrinos ($m \approx 0$),
- ultrarelativistische Elektronen ($p \gg m$),
- Band-Elektronen in Graphen.

Die Dirac-Gleichung (7.19)

$$-i\gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0 \quad (7.63)$$

lautet mit den α_k , β -Matrizen und $m = 0$

$$i\partial_t \psi = -ic\alpha^k \partial_k \psi.$$

Bemerkung: β tritt nicht auf! Daraus folgt:

- 3 antikommutierende Matrizen α^k genügen.

- $N = 2$ ausreichend.
- Pauli-Matrizen σ^k .

Wir können aber auch von (7.63) ausgehen: Definiere

$$\gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \quad (7.64)$$

In der Standard-Darstellung (7.17), (7.18) folgt

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.65)$$

Es gilt generell

$$\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0 \quad (\mu = 0, 1, 2, 3), \quad (7.66)$$

$$(\gamma^5)^2 = \mathbb{1}, \quad (7.67)$$

$$(\gamma^5)^\dagger = \gamma^5. \quad (7.68)$$

Durch Multiplikation mit $\gamma^5\gamma^0 = -i\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ werden die Dirac-Matrizen zu

$$\begin{aligned} \gamma^5\gamma^0\gamma^i &= i\epsilon^{ijk}\gamma^j\gamma^k = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix} =: \Sigma^i \quad \text{und} \\ \gamma^5\gamma^0\gamma^0 &= \gamma^5, \end{aligned}$$

so dass aus (7.63) die Gleichung

$$i\partial_t\gamma^5\psi = \vec{\Sigma} \cdot \vec{p}\psi. \quad (7.69)$$

wird. Diese Gleichung lösen wir wiederum mit einem Ansatz ebener Wellen (positive/negative Energie),

$$\psi(x) = e^{\mp ikx}\psi_k = e^{\mp i(Et - \vec{k} \cdot \vec{x})}\psi_k.$$

Aus (7.69) folgt damit ($k_0 = \pm E \geq 0$)

$$E\gamma^5\psi_k = \vec{\Sigma} \cdot \vec{k}\psi_{\vec{k}}. \quad (7.70)$$

Wegen $k_\mu k^\mu \equiv k^2 = m^2 = 0$ ist

$$E = \pm k_0 = \pm |\vec{k}|.$$

Wir definieren noch den Einheitsvektor

$$\hat{k} := \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} = \pm \frac{\vec{k}}{E} \quad (E > 0),$$

womit aus (7.70)

$$\vec{\Sigma} \cdot \hat{k} \psi_k = \pm \gamma^5 \psi_k. \quad (7.71)$$

wird. Wegen $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0$ ist $[\gamma^5, \Sigma^i] = 0$ und deshalb

$$[\gamma^5, \vec{\Sigma} \cdot \hat{k}] = 0. \quad (7.72)$$

Die hermiteschen Operatoren γ^5 und $\vec{\Sigma} \cdot \hat{k}$ haben deshalb gemeinsame Eigenzustände. $\vec{\Sigma} \cdot \hat{k}$ heißt *Helizitätsoperator* und ist die Projektion des Drehimpulses (s. unten) entlang \vec{k} . γ^5 heißt *Chiralitätsoperator* und beschreibt das Verhalten von Zuständen bei Raumspiegelung. Wegen

$$(\vec{\Sigma} \cdot \hat{k})^2 = (\gamma^5)^2 = \mathbb{1} \quad (7.73)$$

und

$$\text{Tr}(\vec{\Sigma} \cdot \hat{k}) = \text{Tr} \gamma^5 = 0 \quad (7.74)$$

haben beide Operatoren die jeweils zweifach entarteten Eigenwerte $+1$ und -1 . Die Eigenzustände ergeben sich aus

$$\gamma^5 u_\pm(\vec{k}) = \pm u_\pm(\vec{k}) \quad (\text{positive Energie}), \quad (7.75)$$

$$\gamma^5 v_\pm(\vec{k}) = \pm v_\pm(\vec{k}) \quad (\text{negative Energie}). \quad (7.76)$$

In der Standard-Darstellung (7.64) gilt

$$u_\pm(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a_\pm(\vec{k}) \\ \pm a_\pm(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (7.77)$$

$$v_\pm(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} b_\pm(\vec{k}) \\ \pm b_\pm(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (7.78)$$

Aus (7.71) folgt dann

$$\pm \vec{\sigma} \cdot \hat{k} a_\pm(\vec{k}) = a_\pm(\vec{k}); \quad (7.79)$$

dies wird gelöst von

$$a_+(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad (7.80)$$

$$a_-(\vec{k}) = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (7.81)$$

und analog für $b_{\pm}(\vec{k})$. Dabei ist

$$\hat{k} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Bemerkung: Man kann (7.71) 2×2 -blockdiagonal machen, indem man zur *chiralen Darstellung* übergeht:

$$\psi^{ch} = U^\dagger \psi, \quad (7.82)$$

$$\gamma^{\mu, ch} = U^\dagger \gamma^\mu U, \quad (7.83)$$

$$\text{mit } U = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} + \gamma^5 \gamma^0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & -\mathbb{1} \\ \mathbb{1} & \mathbb{1} \end{pmatrix}. \quad (7.84)$$

Dann wird (7.71) zu

$$i\partial_t \psi^{ch} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \end{pmatrix} \psi^{ch}. \quad (7.85)$$

In dieser Blockdiagonalform spricht man von der (*Dirac-*) *Weyl-Gleichung*.

7.4 Kopplung an das elektromagnetische Feld

Analog zur nicht-relativistischen Theorie verwenden wir die Ersetzung

$$\begin{aligned} \vec{p} &\rightarrow \vec{p} - e\vec{A} \text{ und} \\ H &\rightarrow H - e\Phi, \end{aligned}$$

bzw. für den Vierer-Vektor

$$p \rightarrow p - eA$$

wobei

$$\begin{aligned} p^\mu &= \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right) \quad \text{Viererimpuls,} \\ A^\mu &= \left(\frac{\Phi}{c}, \vec{A} \right) \quad \text{Viererpotential.} \end{aligned}$$

Dies führt zur Dirac-Gleichung im elektromagnetischen Feld in kovarianter Form,

$$(-\gamma^\mu (i\hbar\partial_\mu - eA_\mu) + mc) \psi = 0. \quad (7.86)$$

Indem wir von links mit $c\gamma^0 = c\beta$ multiplizieren und $(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}$ benutzen, erhalten wir den Hamilton-Operator H durch

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \underbrace{\left(c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) + \beta mc^2 + e\Phi \right)}_{=H} \psi. \quad (7.87)$$

7.5 Nicht-relativistischer Grenzfall, Pauli-Gleichung

Für kleine Geschwindigkeiten des Teilchens erwarten wir als Grenzfall die Schrödinger-Gleichung mit der nicht-relativistischen kinetischen Energie. Setzt man $v = \frac{\hbar k}{m} \ll c$ bzw. (mit $\hbar = c = 1$) $k \ll m$ in die Lösungen der freien Dirac-Gleichung, (7.61) und (7.62), ein, folgt

$$u_k^r = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \chi_r \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{\sqrt{2m(m+E)}} \chi_r \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \chi_r \\ \frac{k}{m} \chi_r \end{pmatrix}, \quad (7.88)$$

$$v_k^r = \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{\sqrt{2m(m+E)}} \chi_r \\ \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \chi_r \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \frac{k}{m} \chi_r \\ \chi_r \end{pmatrix}. \quad (7.89)$$

Nun betrachten wir beliebige Lösungen positiver Energie $E > 0$ (für $E < 0$ analog) und zerlegen den Vierer-Spinor in zwei Zweierspinoren $\tilde{\phi} \gg \tilde{\chi}$ („große und kleine Komponente“):

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}.$$

So wird (7.87) mit $\vec{\pi} := \vec{p} - e\vec{A}$ zu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \tilde{\chi} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \tilde{\phi} \end{pmatrix} + e\Phi \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ -\tilde{\chi} \end{pmatrix}. \quad (7.90)$$

Im nicht-relativistischen Limes ist die Ruheenergie die größte Energie. Deshalb separieren wir deren Dynamik durch

$$\begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} =: e^{-imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

ab, so dass sich ϕ zeitlich nur langsam verändert. Statt (7.90) haben wir nun

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \chi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \phi \end{pmatrix} + e\Phi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (7.91)$$

Vernachlässige in der unteren Gleichung $\dot{\chi}$ und $e\Phi\chi$ gegen $mc^2\chi$ und erhalte

$$\chi \approx \underbrace{\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc}}_{\propto \frac{v}{c}} \phi, \quad (7.92)$$

d.h. die kleine Komponente χ ändert sich schnell aber nur geringfügig, und folgt im Wesentlichen starr der grossen Komponente. Setze (7.92) in (7.91) ein und erhalte für die obere Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) + e\Phi \right) \phi. \quad (7.93)$$

Es gilt

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = a_i b_j \sigma^i \sigma^j = a_i b_j (\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma^k) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}), \quad (7.94)$$

und damit

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) = \pi^2 + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{\pi} \times \vec{\pi}) \stackrel{(*)}{=} \pi^2 - e\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B}. \quad (7.95)$$

Der letzte Schritt (*) folgt aus

$$\begin{aligned} (\vec{\pi} \times \vec{\pi})_x \phi &= (\pi_y \pi_z - \pi_z \pi_y) \phi = [\pi_y, \pi_z] \phi \\ &= [p_y - eA_y, p_z - eA_z] = e(-[p_y, A_z] + [p_z, A_y]) \phi \\ &= ie\hbar(\partial_y A_z - \partial_z A_y) \phi = ie\hbar B_x \phi. \end{aligned}$$

Jetzt können wir (7.95) in (7.93) einsetzen:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 - \underbrace{\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}}_{\text{Zeeman-Term}} + e\Phi \right) \phi. \quad (7.96)$$

Dies ist die *Pauli-Gleichung* für Spin-1/2-Teilchen mit dem 2-Spinor $\phi = \begin{pmatrix} \phi_{\uparrow} \\ \phi_{\downarrow} \end{pmatrix}$. Betrachte ein homogenes Magnetfeld, $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ mit $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$ und $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$. Bahndrehimpuls und Spin sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \vec{r} \times \vec{p}, \\ \vec{S} &= \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}. \end{aligned}$$

Dann ist

$$\begin{aligned} (\vec{p} - e\vec{A})^2 &= p^2 - e\vec{p} \cdot \vec{A} - e\vec{A} \cdot \vec{p} + e^2 \vec{A}^2 \\ &\stackrel{\vec{\nabla} \cdot \vec{A}=0}{=} p^2 - 2e\vec{A} \cdot \vec{p} + e^2 A^2 \\ &= p^2 - e(\vec{B} \times \vec{r}) \cdot \vec{p} + e^2 A^2 = p^2 - e\vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) + e^2 A^2 \\ &= p^2 - e\vec{B} \cdot \vec{L} + e^2 A^2. \end{aligned}$$

Und aus (7.96) wird

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m} - \underbrace{\frac{e}{2m} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}}_{=\vec{\mu}} + \frac{e^2}{2m} A^2 + e\Phi \right) \phi. \quad (7.97)$$

Mit dem magnetischen Moment $\vec{\mu}$,

$$\begin{aligned}\vec{\mu} &= \vec{\mu}_{\text{Bahn}} + \vec{\mu}_{\text{Spin}}, \\ \vec{\mu}_{\text{Bahn}} &= \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}, \\ \vec{\mu}_{\text{Spin}} &= g\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar}.\end{aligned}$$

Dabei ist $g = 2$ der *gyromagnetische (Landé-) Faktor*. Es stellt sich also heraus, dass die Dirac-Gleichung eine Beschreibung von Spin-1/2 Teilchen, z.B. Elektronen, liefert. Das gyromagnetische Verhältnis wird dabei (bis auf kleine Strahlungskorrekturen) richtig vorausgesagt.

7.6 Relativistische Korrekturen

Nachdem wir den nicht-relativistischen Grenzfall der Dirac-Gleichung kennengelernt haben, gehen wir nochmals zurück und betrachten die führenden relativistische Korrekturen zur Pauli-Gleichung (7.96). Als Methode verwenden wir eine systematische Entkopplung der großen und kleinen Komponenten ϕ und χ des Vierer-Spinors ψ mittels *Foldy-Wouthuysen-Transformation* (F-W). In der Herleitung der Pauli-Gleichung hatte die kleine Komponente χ keine eigene Dynamik, sondern folgte starr der großen Komponente ϕ (siehe (7.92)). Nun nehmen wir auch die Dynamik von χ (näherungsweise) mit.

7.6.1 Foldy-Wouthuysen-Transformationen

Wir beginnen mit der Dirac-Gleichung wie in (7.87),

$$i\partial_t\psi = H\psi \quad (\hbar = 1), \quad (7.98)$$

und führen folgende unitäre Transformation durch,

$$\psi = e^{-iS}\psi' \quad (7.99)$$

mit $S = S^\dagger$. Im allgemeinen ist S zeitabhängig. Mit (7.99) in (7.98) folgt

$$i\partial_t\psi = i\partial_t e^{-iS}\psi' = ie^{-iS}\partial_t\psi' + i(\partial_t e^{-iS})\psi' = H\psi = He^{-iS}\psi',$$

somit erhalten wir die transformierte Gleichung

$$i\partial_t\psi' = \underbrace{(e^{iS}(H - i\partial_t)e^{-iS})}_{=:H'}\psi' = H'\psi',$$

wobei die Ableitung ∂_t nur auf e^{-iS} , nicht aber auf den Zustand wirkt. Wir möchten nun S so wählen, dass

$$H' = e^{iS}(H - i\partial_t)e^{-iS} \quad (7.100)$$

die Komponenten ϕ und χ nicht mischt (zumindest näherungsweise). Dazu betrachten wir

$$H = \underbrace{c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e\vec{A})}_{=: \mathcal{O}} + \beta mc^2 + \underbrace{e\Phi}_{=: \mathcal{E}} \quad (7.101)$$

mit den Matrizen

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}.$$

Der „ungerade“ Term \mathcal{O} mischt ϕ und χ und soll durch die F-W-Transformation eliminiert werden. Die „geraden“ Terme \mathcal{E} und βmc^2 mischen ϕ und χ nicht. Weil $\beta mc^2 \gg \mathcal{O}$, \mathcal{E} können wir eine Entwicklung in \mathcal{O}/mc^2 und \mathcal{E}/mc^2 (kleiner Parameter „ $1/m$ “) durchführen. Die Vertauschungsrelationen

$$\beta\mathcal{E} = \mathcal{E}\beta, \quad (7.102)$$

$$\beta\mathcal{O} = -\mathcal{O}\beta \quad (7.103)$$

begründen die Bezeichnungen „gerader“ und „ungerader“ Term. Zerlege den Hamiltonoperator (7.100) in zwei Teile,

$$H' = e^{iS}(H - i\partial_t)e^{-iS} = e^{iS}He^{-iS} + e^{iS}(-i\partial_t)e^{-iS}. \quad (7.104)$$

Der erste Term wird mit der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel (BCH)

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2}[A, [A, B]] + \dots + \frac{1}{n!} \underbrace{[A, [A, \dots [A, B] \dots]]}_{n\text{-mal}} + \dots \quad (7.105)$$

entwickelt und der zweite Term direkt³

$$\begin{aligned} e^{iS}(-i\partial_t)e^{-iS} &= \left(\mathbb{1} + iS - \frac{1}{2}S^2 + \dots \right) (-i\partial_t) \left(\mathbb{1} - iS - \frac{1}{2}S^2 + \frac{i}{6}S^3 + \dots \right) \\ &= \left(\mathbb{1} + iS - \frac{1}{2}S^2 + \dots \right) \\ &\quad \times \left(-\dot{S} + \frac{i}{2}\dot{S}S + \frac{i}{2}S\dot{S} + \frac{1}{6}\dot{S}SS + \frac{1}{6}S\dot{S}S + \frac{1}{6}SS\dot{S} + \dots \right) \\ &= -\dot{S} + \frac{i}{2}\dot{S}S + \frac{i}{2}S\dot{S} + \frac{1}{6}\dot{S}S^2 + \frac{1}{6}S\dot{S}S + \frac{1}{6}S^2\dot{S} \\ &\quad - iS\dot{S} - \frac{1}{2}S\dot{S}S - \frac{1}{2}S^2\dot{S} + \frac{1}{2}S^2\dot{S} + \dots \\ &= -\dot{S} - \frac{i}{2}[S, \dot{S}] + \frac{1}{6}[S, [S, \dot{S}]] + \dots \end{aligned} \quad (7.106)$$

³Man kann für den zweiten Term auch die BCH Formel verwenden, wenn man berücksichtigt, dass die Ableitung nur auf e^{-iS} wirkt und die Terme, in denen ∂_t ganz rechts steht, weglässt.

Aus (7.105) und (7.106) zusammen folgt für (7.104):

$$\begin{aligned}
 H' &= H + i[S, H] + \frac{i^2}{2}[S, [S, H]] + \frac{i^3}{6}[S, [S, [S, H]]] + \frac{i^4}{24}[S, [S, [S, [S, H]]]] \\
 &\quad - \dot{S} - \frac{i}{2}[S, \dot{S}] - \frac{i^2}{6}[S, [S, \dot{S}]] + \dots
 \end{aligned} \tag{7.107}$$

So wird (7.101) mit der Konvention $c = 1$ zu

$$H' = \beta m + \mathcal{E} + \mathcal{O} + im[S, \beta] + i[S, \mathcal{E}] + i[S, \mathcal{O}] + \dots \tag{7.108}$$

Der große ungerade Term \mathcal{O} soll verschwinden. Durch geschickte Wahl von S hebt er sich mit dem Term $im[S, \beta]$ weg. Dazu wähle

$$S := \frac{1}{im}A,$$

mit der Bedingung

$$[A, \beta] \stackrel{!}{=} -\mathcal{O}.$$

Lösung:

$$\begin{aligned}
 A &:= \frac{1}{2}\beta\mathcal{O}, \\
 \Rightarrow S &= -\frac{i}{2m}\beta\mathcal{O}.
 \end{aligned}$$

Dabei kann $S \propto \frac{1}{m}$ als „kleiner Parameter“ aufgefasst werden. Zur Berechnung der Terme in (7.107) eliminieren wir ungerade Terme bis $1/m^2$ und berechnen die gerade Terme bis $1/m^3$,

$$\begin{aligned}
 i[S, H] &= -\mathcal{O} + \frac{\beta}{2m}[\mathcal{O}, \mathcal{E}] + \frac{\beta}{m}\mathcal{O}^2, \\
 \frac{i^2}{2}[S, [S, H]] &= -\frac{\beta\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{1}{2m^2}\mathcal{O}^3, \\
 \frac{i^3}{6}[S, [S, [S, H]]] &= \frac{\mathcal{O}^3}{6m^2} - \frac{1}{6m^3}\beta\mathcal{O}^4 - \frac{\beta}{48m^3}[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]]], \\
 \frac{i^4}{24}[S, [S, [S, [S, H]]]] &= \frac{\beta\mathcal{O}^4}{24m^3}, \\
 -\dot{S} &= \frac{i\beta\dot{\mathcal{O}}}{2m}, \\
 -\frac{i}{2}[S, \dot{S}] &= -\frac{i}{8m^2}[\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}].
 \end{aligned}$$

Also wird (7.108) zu

$$\begin{aligned}
 H' &= \beta m \\
 &+ \underbrace{\beta \left(\frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] - \frac{i}{8m^2} [\mathcal{O}, \dot{\mathcal{O}}]}_{=: \mathcal{E}'} \\
 &+ \underbrace{\frac{\beta}{2m} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{\mathcal{O}^3}{3m^2} + \frac{i\beta \dot{\mathcal{O}}}{2m}}_{=: \mathcal{O}'}.
 \end{aligned}$$

Die ungeraden Terme \mathcal{O}' treten nur noch mit $\mathcal{O}(m^{-1})$ auf, nicht mehr mit $\mathcal{O}(m^0)$ wie in \mathcal{O} .

Mit einer *weiteren F-W-Transformation* können die ungeraden Terme weiter reduziert werden,

$$\begin{aligned}
 S' &:= \frac{-i\beta}{m} \mathcal{O}' = \frac{-i\beta}{2m} \left(\frac{\beta}{2m} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{\mathcal{O}^3}{3m^2} + \frac{i\beta \dot{\mathcal{O}}}{2m} \right), \\
 \Rightarrow H'' &= e^{iS'} (H' - i\partial_t) e^{-iS'} = \beta m + \mathcal{E}' + \underbrace{\frac{\beta}{2m} [\mathcal{O}', \mathcal{E}'] + \frac{i\beta \dot{\mathcal{O}}'}{2m}}_{=: \mathcal{O}''} + \mathcal{O}(m^{-3}).
 \end{aligned}$$

Die ungeraden Terme in \mathcal{O}'' treten nur noch mit $\mathcal{O}(m^{-2})$ auf, im Gegensatz zu \mathcal{O}' mit ungeraden Termen $\propto m^{-1}$. Nun eliminieren wir auch noch die $\mathcal{O}(m^{-2})$ Terme mit einer *dritten F-W-Transformation*,

$$\begin{aligned}
 S'' &:= \frac{-i\beta \mathcal{O}''}{2m}, \\
 \Rightarrow H''' &= \beta m + \mathcal{E}' = \beta \left(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} + \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}] + i\dot{\mathcal{O}}]. \quad (7.109)
 \end{aligned}$$

Umformung der einzelnen Terme:

$$\frac{\mathcal{O}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \right)^2 \stackrel{(*)}{=} \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 - \frac{e}{2m} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B}. \quad (7.110)$$

Dabei sieht man (*) mit

$$\alpha^i \alpha^j = \delta^{ij} + i\epsilon^{ijk} \Sigma^k, \quad \Sigma^k = \begin{pmatrix} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sigma^k \end{pmatrix},$$

ein, siehe Herleitung der Pauli-Gleichung (7.96). Für das zweite Argument im Kommutator von (7.109) finden wir

$$[\mathcal{O}, \mathcal{E}] + i\dot{\mathcal{O}} = [\alpha^i (p^i - eA^i), e\Phi] - ie\alpha^i \dot{A}^i = -ie\alpha^i (\partial_i \Phi - \dot{A}^i) = ie\alpha^i E^i.$$

Damit wird der Kommutator zu

$$\begin{aligned}
[\mathcal{O}, \vec{\alpha} \cdot \vec{E}] &= \alpha^i \alpha^j (p^i - eA^i) E^j - \alpha^j E^j \alpha^i (p^i - eA^i) \\
&= (p^i - eA^i) E^i - E^i (p^i - eA^i) + i\epsilon^{ijk} \Sigma^k (p^i - eA^i) E^j - i\epsilon^{jik} \Sigma^k E^j (p^i - eA^i) \\
&= (\vec{p} \cdot \vec{E}) + \vec{\Sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E}) - 2i\vec{\Sigma} \cdot (\vec{E} \times (\vec{p} - e\vec{A})) .
\end{aligned}$$

Somit ist der letzte Term in (7.109):

$$-\frac{ie}{8m^2} [\mathcal{O}, \vec{\alpha} \cdot \vec{E}] = -\frac{e}{8m^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} - \frac{ie}{8m^2} \vec{\Sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E}) - \frac{e}{4m^2} \vec{\Sigma} \cdot (\vec{E} \times (\vec{p} - e\vec{A})) . \quad (7.111)$$

Durch Einsetzen von (7.110) und (7.111) in (7.109) erhalten wir

$$\begin{aligned}
H''' &= \beta \left(mc^2 + \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} - \frac{1}{8m^3 c^2} \left((\vec{p} - e\vec{A})^2 - e\vec{\Sigma} \cdot \vec{B} \right)^2 \right) + e\Phi \\
&\quad - \frac{e}{2m} \beta \vec{\Sigma} \cdot \vec{B} - \frac{ie}{8m^2 c^2} \vec{\Sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{E}) \\
&\quad - \frac{e}{4m^2 c^2} \vec{\Sigma} \cdot (\vec{E} \times (\vec{p} - e\vec{A})) - \frac{e}{8m^2 c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} .
\end{aligned} \quad (7.112)$$

Diese transformierte Form des Hamilton-Operators ist unser Ausgangspunkt zur Diskussion der relativistischen Korrekturen in der Pauli-Gleichung.

7.6.2 Pauli-Gleichung mit relativistischen Korrekturen

Die Komponenten ϕ und χ sind nun völlig entkoppelt, es treten nur gerade Terme auf. Betrachtet man nur die Komponente ϕ folgt mit der Annahme $\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0$,

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \left\{ mc^2 + e\Phi + \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 - \frac{e}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right. \\
&\quad \left. - \frac{p^4}{8m^3 c^2} - \frac{e}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \times (\vec{p} - e\vec{A})) - \frac{e}{8m^2 c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \right\} \phi ,
\end{aligned} \quad (7.113)$$

die *Pauli-Gleichung mit relativistischen Korrekturen*.

Bemerkung: Beim \mathcal{O}^4 Term haben wir nur den führenden Beitrag $\propto p^4$ mitgenommen.

7.6.3 Diskussion der relativistischen Korrekturen

1. Die *relativistische Massenkorrektur*

$$-\frac{p^4}{8m^3 c^2} \quad (7.114)$$

folgt aus der Entwicklung der relativistischen kinetischen Energie,

$$\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots$$

2. Die *Spin-Bahn-Kopplung*⁴ bewirkt den Term

$$-\frac{e}{4m^2c^2}\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{E} \times (\vec{p} - e\vec{A}) \right), \quad (7.115)$$

wobei $\vec{E} \times (\vec{p} - e\vec{A})$ das effektive Magnetfeld durch Lorentz-Transformation ins Ruhesystem des Elektrons ist. Für $\vec{A} = 0$, $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r})$ und $\Phi(\vec{r}) = \Phi(r)$ ist

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}) = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r}$$

und

$$\vec{\Sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}) = -\frac{1}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} \vec{\Sigma} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = -\frac{1}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} \vec{\Sigma} \cdot \vec{L}.$$

Daraus folgt der Spin-Bahn-Hamiltonoperator

$$H_{\text{Spin-Bahn}} = \frac{e}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} \vec{\sigma} \cdot \vec{L}, \quad (7.116)$$

mit Spin $\vec{\sigma}$ und Bahndrehimpuls \vec{L} . Dieser erklärt:

- Korrekturen der Atomspektren: Aufhebung der Entartung von Drehimpulsmultipletts, z.B. im H-Atom,

$$\Delta E_{n,j=l\pm\frac{1}{2},l} = Ry \frac{Z^2}{n^2} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right),$$

mit $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$.

- Spin-Aufspaltung in Festkörpern, z.B. Halbleitern.

3. Eine etwas vereinfachte Erklärung für den *Darwin-Term*⁵

$$-\frac{e}{8m^2c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{e}{8m^2c^2} \Delta\Phi(\vec{r}) \quad (7.117)$$

ist eine „Zitterbewegung“ (vgl. *Diffusionsgleichung*), verursacht durch die Beimischung von Lösungen negativer Energie. Dies führt zu einer Impulsunschärfe $\Delta p \approx mc$, so dass wegen der Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar \Rightarrow \Delta x \approx \frac{\hbar}{\Delta p} \approx \frac{\hbar}{mc} = \lambda_C$$

das Potential auf die Compton-Wellenlänge λ_C „ausgeschmiert“ wird:

$$\langle \Phi(\vec{r} + \Delta\vec{x}) \rangle \approx \Phi(\vec{r}) + \langle \Delta\vec{x} \rangle \cdot \vec{\nabla}\Phi(\vec{r}) + \frac{1}{2} \langle \Delta x^2 \rangle \Delta\Phi(\vec{r}). \quad (7.118)$$

⁴Statt Spin-Bahn-Kopplung wird auch der Begriff Spin-Orbit-Kopplung benützt.

⁵Benannt nach Charles Galton Darwin (1887–1962), einem Enkel von Charles Darwin, dem Begründer der Evolutionstheorie.

Problem bei dieser Erklärung: Sie stimmt nur, wenn die Spinor-Struktur mitgenommen wird. Die F-W-Transformation ist nicht-lokal,

$$\psi'(\vec{r}) = \int d^3r' K(\vec{r}, \vec{r}') \psi(\vec{r}') \underset{\text{Taylor}}{\approx} \psi(\vec{r}) + \vec{K}_1 \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) + \frac{1}{2} K_2 \psi(\vec{r}) + \dots,$$

wobei die Matrix-Integriertsterme K den Hauptbeitrag für $|\vec{r} - \vec{r}'| \ll \lambda_C$ liefern. Die Korrektur $\frac{1}{2} K_2 \psi(\vec{r})$ gehört zum Darwin-Term.

4. Weitere, hier nicht diskutierte Korrekturen sind die Hyperfeinwechselwirkung (mit Kernspins) und der Lamb-Shift (von der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes stammend).

7.7 Interpretation der Dirac-Gleichung

Gestützt auf den nicht-relativistischen Grenzfall haben wir bisher die Dirac-Gleichung als Einteilchen-Wellengleichung für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (z.B. Elektronen) aufgefasst. Die Dichte $\rho = j^0 = \psi^\dagger \psi \geq 0$ ist positiv. Ein Problem stellt aber die Existenz von Lösungen negativer Energie, $E < 0$, dar. Können wir diese einfach ignorieren?

Nein, denn ein Teilchen welches anfangs nur positive Energie-Komponenten hat,

$$\psi(t=0) = \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix},$$

aber räumlich stark lokalisiert ist, $\Delta x \lesssim \lambda_C = \frac{h}{mc}$, erhält mit der Zeitentwicklung der Dirac-Gleichung eine Komponente negativer Energie,

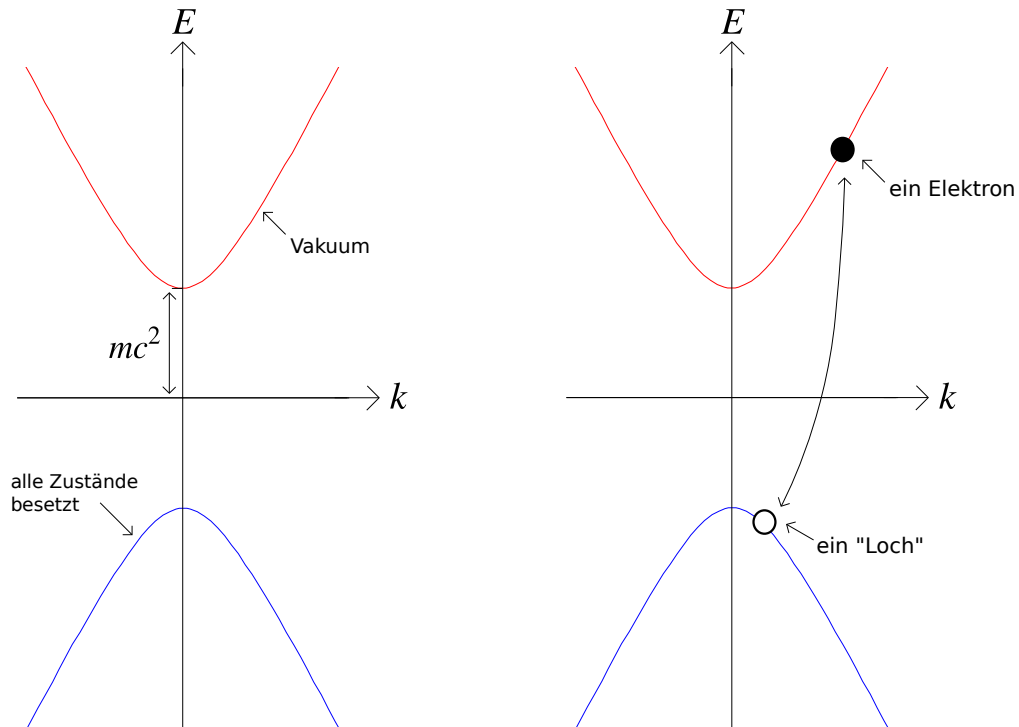
$$\psi(t > 0) = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \chi \neq 0.$$

Problem: Ein Teilchen könnte durch die Kopplung ans elektromagnetische Feld immer in einen Zustand mit tieferer (negativer) Energie zerfallen. Wegen der Existenz von Zuständen mit beliebig tiefer (negativer) Energie würde dies Instabilität bedeuten!

Dirac hat dazu folgenden Ausweg gefunden (1930):

1. Alle Zustände negativer Energie sind im Vakuum besetzt.
2. Wegen dem Pauli-Prinzip können Teilchen dann nicht zerfallen, da die Zustände tieferer Energie schon besetzt sind.

Ein Teilchen ist also eine *Anregung* aus dem Vakuum:



Bemerkungen:

- Das „Loch“ ist ein fehlendes Elektron, d.h. ein „Teilchen“ mit Ladung $-(-e) = +e$.
- Diese Löcher heißen auch *Antiteilchen*, im Fall von Elektronen heißen sie *Positronen*.
- Antiteilchen und Teilchen können sich gegenseitig auslöschen, *annihilieren*.
- Man beachte die Analogie zum gefüllten Fermi-See in der nicht-relativistischen Theorie der Metalle (Kapitel 4.2).
- Die Löcher-Interpretation führt uns zur Vielteilchentheorie, d.h. zur Quantenfeldtheorie (QFT).

Kapitel 8

Quantenelektrodynamik

8.1 Elektronen

Ausgehend von der Dirac-Gleichung stellen wir nun eine relativistische Vielteilchentheorie auf (Dirac-Feld). Es führen mehrere Wege zum Dirac-Feld, wir wählen hier den aus Kapitel 4.1 bekannten Weg der zweiten Quantisierung. Ein Überblick ist in Abb. 8.1 dargestellt.

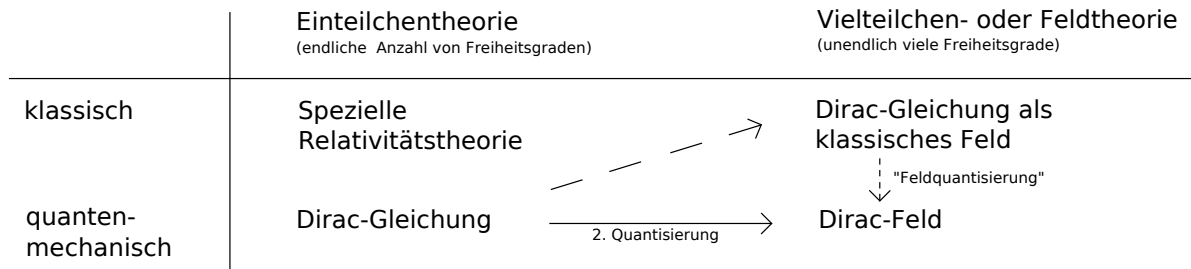


Abbildung 8.1: Mögliche Herleitungen des Dirac-Feldes

8.1.1 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Die Einteilchen-Lösungen der Dirac-Gleichung sind (vergleiche (7.61) und (7.62))

$$\psi_{rk}^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}}}} u_r(k) e^{-ikx}, \quad \psi_{rk}^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}}}} w_r(k) e^{ikx}$$

für das Elektron ($\psi^{(+)}$) bzw. das Positron ($\psi^{(-)}$). Dabei ist

$$u_r(k) = \sqrt{\frac{E_{\vec{k}} + m}{2m}} \begin{pmatrix} \chi_r \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{m + E_{\vec{k}}} \chi_r \end{pmatrix}, \quad (8.1)$$

$$w_r(k) = \begin{cases} v_2(k) : r = 1 \\ -v_1(k) : r = 2 \end{cases} = -\sqrt{\frac{E_{\vec{k}} + m}{2m}} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{m + E_{\vec{k}}} i\sigma_y \chi_r \\ i\sigma_y \chi_r \end{pmatrix}, \quad (8.2)$$

mit $c = 1$, $r = 1, 2$, $\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $k = (E, \vec{k})$ und $i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$. Damit haben wir die Positron- (Antiteilchen-, Löcher-) Zustände so definiert, dass sie für gegebenes $r = 1, 2$ denselben Spin wie das entsprechende Teilchen haben. Es gelten die Orthogonalitätsrelationen

$$\begin{aligned} \bar{u}_r(k) u_s(k) &= \delta_{rs}, \\ \bar{w}_r(k) w_s(k) &= -\delta_{rs}, \\ \bar{u}_r(k) w_s(k) &= 0, \\ \bar{w}_r(k) u_s(k) &= 0, \end{aligned} \quad (8.3)$$

wobei $\bar{u}_r(k) = u_r(k)^\dagger \gamma^0$ etc. die adjungierten Spinoren bezeichnen. Wir definieren nun wie in Kapitel 4.1 die zugehörigen Vielteilchenzustände und die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

b_{rk}^\dagger erzeugt ein Elektron und
 b_{rk} vernichtet ein Elektron

mit Spinor $u_r(k)e^{-ikx}$, Energie $E = k_0 = \sqrt{m^2 + (\vec{k})^2} > 0$ und Spin (im Ruhesystem) $S = +\frac{1}{2}$ (für $r = 1$) bzw. $S = -\frac{1}{2}$ (für $r = 2$). Analog:

d_{rk}^\dagger erzeugt ein Positron und
 d_{rk} vernichtet ein Positron

mit Spinor $w_r(k)e^{ikx}$, Energie $E = k_0 = \sqrt{m^2 + (\vec{k})^2} > 0$ und Spin (im Ruhesystem) $S = +\frac{1}{2}$ (für $r = 1$) bzw. $S = -\frac{1}{2}$ (für $r = 2$). Bei den Vertauschungsrelationen *müssen* wir die fermionischen wählen (Antikommutatoren), ansonsten ist die Energie nicht nach unten beschränkt und somit das System instabil. Also:

$$\begin{aligned} \{b_{rk}, b_{r'k'}^\dagger\} &= \{d_{rk}, d_{r'k'}^\dagger\} = \delta_{rr'} \delta_{kk'}, \\ \{b_{rk}, b_{r'k'}\} &= \{b_{rk}^\dagger, b_{r'k'}^\dagger\} = \{d_{rk}, d_{r'k'}\} = \{d_{rk}^\dagger, d_{r'k'}^\dagger\} = 0, \\ \{b_{rk}, d_{r'k'}\} &= \{b_{rk}, d_{r'k'}^\dagger\} = \{b_{rk}^\dagger, d_{r'k'}\} = \{b_{rk}^\dagger, d_{r'k'}^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Mit diesen Operatoren können wir sofort den Energie-Impuls-Operator hinschreiben ($\hbar = 1$):

$$P^\mu = \sum_{\vec{k}, r} k^\mu (b_{rk}^\dagger b_{rk} + d_{rk}^\dagger d_{rk}). \quad (8.5)$$

Die Null-Komponente daraus ist der Hamiltonoperator, mit $k^0 = \sqrt{(\vec{k})^2 + m^2} = E_{\vec{k}}$,

$$H_e = P^0 = \sum_{\vec{k}, r} E_{\vec{k}} (b_{rk}^\dagger b_{rk} + d_{rk}^\dagger d_{rk}). \quad (8.6)$$

Die Gesamtladung

$$Q = -e \sum_{\vec{k}, r} \left(\underbrace{b_{rk}^\dagger b_{rk}}_{\substack{\text{Elektronen:} \\ -e}} - \underbrace{d_{rk}^\dagger d_{rk}}_{\substack{\text{Positronen:} \\ +e}} \right) \quad (8.7)$$

kommutiert mit dem Energie-Impuls-Operator,

$$[P^\mu, Q] = 0, \quad (8.8)$$

insbesondere ist die Gesamtladung eine Erhaltungsgröße:

$$[H_e, Q] = 0. \quad (8.9)$$

8.1.2 Feldoperatoren

Versuche, mit

$$\psi^\dagger(x) = \sum_{k, r} \psi_{rk}^{(+)\dagger}(x) b_{rk}^\dagger = \sum_{k, r} \sqrt{\frac{m}{V E_{\vec{k}}}} u_r^\dagger(k) e^{ikx} b_{rk}^\dagger$$

ein Elektron am Punkt $x = (t, \vec{r})$ zu erzeugen. Wegen der Lokalisierung auf einen Punkt, d.h., auf ein Gebiet kleiner als die Compton-Wellenlänge λ_C , wird aber dieser Zustand unter der freien Dirac-Gleichung nicht stationär sein, sondern zwischen Elektron- und Loch-Zuständen oszillieren. Wir müssen die Feldoperatoren durch einen *vollständigen* Satz von Zuständen ausdrücken, einschließlich der Lösungen negativer Energie. Deshalb definiert man den Feldoperator als

$$\psi(x) = \sum_{k, r} \sqrt{\frac{m}{V E_{\vec{k}}}} \left(b_{rk} u_r(k) e^{-ikx} + d_{rk}^\dagger w_r(k) e^{ikx} \right) \quad (8.10)$$

und den adjungierten Feldoperator als

$$\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x) \gamma^0 = \sum_{k, r} \sqrt{\frac{m}{V E_{\vec{k}}}} \left(d_{rk} \bar{w}_r(k) e^{-ikx} + b_{rk}^\dagger \bar{u}_r(k) e^{ikx} \right). \quad (8.11)$$

Der Vorfaktor resultiert aus der Normierung unter Berücksichtigung der Längenkontraktion. Damit und mit den Orthogonalitätsrelationen (8.3) kann man zeigen, dass

$$H_e = \int d^3r \bar{\psi}(r') (-i\gamma^i \partial_i + m) \psi(\vec{r}). \quad (8.12)$$

Für die gleichzeitigen Antikommutatoren gilt

$$\{\psi_\alpha(t, \vec{r}), \bar{\psi}_\beta(t, \vec{r}')\} = \gamma_{\alpha\beta}^0 \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (8.13)$$

$$\{\psi_\alpha(t, \vec{r}), \psi_\beta^\dagger(t, \vec{r}')\} = \delta_{\alpha\beta} \delta^3(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (8.14)$$

Eine weitere nützliche Größe ist der *Energie-Impuls-Tensor*,

$$T^{\mu\nu}(x) = i\bar{\psi}(x)\gamma^\mu \partial^\nu \psi(x), \quad (8.15)$$

der die Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0 \quad (8.16)$$

erfüllt (freie Teilchen). Beweis:

$$\begin{aligned} & (-i\gamma^\mu \partial_\mu + m) \psi = 0 \Rightarrow i\gamma^\mu \partial_\mu \psi = m\psi, \\ \text{adjungieren:} \quad & \psi^\dagger \left(i\gamma^{\mu\dagger} \overleftarrow{\partial}_\mu + m \right) \gamma^0 = 0, \\ \text{nutze} \quad & \gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \quad \gamma^{i\dagger} = -\gamma^i, \quad \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} : \\ & \psi^\dagger \gamma^0 \left(i\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu + m \right) = 0 \Rightarrow \bar{\psi} i\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu = -m\bar{\psi}, \\ \Rightarrow \quad & \partial_\mu T^{\mu\nu} = i\bar{\psi}(x) \left(\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu \partial^\nu + \partial^\nu \gamma^\mu \partial_\mu \right) \psi(x) = \bar{\psi}(-m + m)\psi = 0. \end{aligned}$$

Oder mit dem Noether-Theorem.

Man findet aus (8.16)

$$\partial_t T^{0\nu} = -\partial_i T^{i\nu}.$$

Mit dem Satz von Gauß ergibt sich, falls $T^{i\nu}$ im Unendlichen genügend schnell abfällt:

$$\partial_t \int d^3r T^{0\nu} = 0.$$

Bemerkungen:

(i) Die Komponenten

$$T^{0\nu} = i\bar{\psi}\gamma^0\partial^\nu\psi = i\psi^\dagger\partial^\nu\psi$$

heißen *Energie-Impuls-Dichte* und

$$T^{00} \equiv P^0 = i\psi^\dagger\partial_t\psi$$

ist die Energie-Dichte.

(ii) Der Energie-Impuls-Vierer-Vektor

$$p^\mu \equiv \int d^3r T^{0\mu}$$

ist eine erhaltene Größe.

Als nächstes betrachten wir den *Drehimpuls-Tensor*,

$$M^{\mu\nu\lambda} := \frac{1}{2} \bar{\psi} \gamma^\mu \sigma^{\nu\lambda} \psi + x^\nu T^{\mu\lambda} - x^\lambda T^{\mu\nu},$$

mit $\sigma^{\nu\lambda} = \frac{i}{2} [\gamma^\nu, \gamma^\lambda] = \epsilon^{\nu\lambda\rho} \Sigma^\rho$ wie in (7.2). Dieser hat folgende Eigenschaften:

- $M^{\mu\nu\lambda} = -M^{\mu\lambda\nu}$.
- Erfüllt 6 unabhängige Kontinuitätsgleichungen: $\partial_\mu M^{\mu\nu\lambda} = 0$. Beweis: Einsetzen oder Noether-Theorem.

Es ergeben sich die erhaltene Größen

$$M^{\nu\lambda} := \int d^3r M^{0\nu\lambda} = \int d^3r \psi^\dagger \left(\frac{1}{2} \sigma^{\nu\lambda} + x^\nu p^\lambda - x^\lambda p^\nu \right) \psi, \quad (8.17)$$

aus deren räumliche Komponenten

$$M^{ij} = \int d^3r \psi^\dagger \left(\underbrace{\frac{1}{2} \sigma^{ij}}_{\text{Spin}} + \underbrace{x^i p^j - x^j p^i}_{\text{Bahndrehimpuls}} \right) \psi = \epsilon^{ijk} J^k, \quad (8.18)$$

man den Drehimpulsvektor $\vec{J} = \int d^3x \psi^\dagger(x) \left(\frac{1}{2} \vec{\Sigma} + \vec{r} \times \vec{p} \right) \psi(x)$ erhält.

8.1.3 Spin-Statistik-Theorem

Das Spin-Statistik-Theorem (Fierz 1939, Pauli 1940) stellt einen direkten Zusammenhang zwischen dem Spin einer Teilchensorte und deren Vertauschungsrelationen (Bose oder Fermi) her.¹ Die Aussage des Theorems ist:

Teilchen mit halbzahligem Spin ($1/2, 3/2, \dots$), z.B. Elektronen, sind *Fermionen*, solche mit ganzzahligem Spin ($0, 1, 2, \dots$) sind *Bosonen*.

Zum Beweis kann man versuchen, die bekannten Feldtheorien sowohl mit Fermi- wie auch mit Bose-VR zu quantisieren. Jeweils bei einer der beiden Möglichkeiten stellt man einen

¹ Letztere werden wegen den Auswirkungen in der statistischen Mechanik als Teilchenstatistik bezeichnet.

Widerspruch zur Kausalität im Sinne der speziellen Relativitätstheorie fest. Die Forderung der Kausalität bedeutet, dass Operatoren $O(x)$, die auf raumartig getrennte Regionen in der Raumzeit wirken keinen Einfluss aufeinander haben können und somit kommutieren müssen, d.h.

$$(x - x')^2 < 0 \implies [O(x), O(x')] = 0. \quad (8.19)$$

Hier betrachten wir das Dirac-Feld für Spin-1/2-Teilchen und skizzieren kurz den Fall von Spin-0 Teilchen.

(i) Spin-1/2 Teilchen (oder allgemein Teilchen mit halbzahligem Spin (1/2, 3/2, 5/2,...)) haben eine gerade Anzahl von Spinor-Komponenten.

- Quantisierung der (Dirac-) Feldoperatoren mit Anti-Vertauschungsrelationen (Fermi-Statistik):

$$\begin{aligned} \{\psi_\alpha(x), \bar{\psi}_\beta(x')\} &\stackrel{(8.4)}{=} \stackrel{(8.10)}{=} \stackrel{(8.11)}{=} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{m}{\sqrt{E_{\vec{k}} E_{\vec{k}'}}} \sum_{r, r'} \delta_{rr'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \\ &\times \left(u_{r\alpha}(k) \bar{u}_{r'\beta}(k') e^{-ikx + ik'x'} + w_{r\alpha}(k) \bar{w}_{r'\beta}(k') e^{ikx - ik'x'} \right) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{m}{E_{\vec{k}}} \left(e^{-ik(x-x')} \sum_r u_{r\alpha}(k) \bar{u}_{r\beta}(k) \right. \\ &\quad \left. + e^{ik(x-x')} \sum_r w_{r\alpha}(k) \bar{w}_{r\beta}(k) \right) \\ &\stackrel{(*)}{=} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_{\vec{k}}} \left(e^{-ik(x-x')} \left(\frac{\not{k} + m}{2m} \right)_{\alpha\beta} \right. \\ &\quad \left. + e^{ik(x-x')} \left(\frac{\not{k} - m}{2m} \right)_{\alpha\beta} \right) \\ &= (i\not{\partial} + m)_{\alpha\beta} \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_k} \left(e^{-ik(x-x')} - e^{ik(x-x')} \right) \\ &= (i\not{\partial} + m)_{\alpha\beta} i\Delta(x - x'), \end{aligned} \quad (8.20)$$

mit

$$\Delta(x) = \frac{1}{2i} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_{\vec{k}}} (e^{-ikx} - e^{ikx}),$$

wobei $k_0 = E_{\vec{k}}$. Außerdem wurde im Schritt (*) verwendet, dass mit (8.1) und

(8.2)

$$\begin{aligned} \sum_{r=1,2} u_r \bar{u}_r &= \frac{\not{k} + m}{2m} \quad \text{bzw.} \\ - \sum_{r=1,2} w_r \bar{w}_r &= \frac{-\not{k} + m}{2m} \end{aligned}$$

gilt.

- Eigenschaften von $\Delta(x)$:

(a)

$$\Delta(x) = -i \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^3} \delta(k^2 - m^2) \epsilon(k^0) e^{-ikx}$$

mit $\epsilon(k^0) = \theta(k^0) - \theta(-k^0)$.Beweis: Einsetzen und k^0 -Integration ausführen.

(b) Mit (a) gilt auch

$$\Delta(-x) = -\Delta(x)$$

(c) Für eigentliche, orthochrone LT Λ ist

$$\Delta(\Lambda x) = \Delta(x),$$

d.h. Δ ist Lorentz-invariant.Beweis: Mit (a) und der Substitution $k' = \Lambda^{-1}k$.(d) Für raumartige Vektoren x (also $x^2 < 0$) gilt neben (b) auch

$$\Delta(-x) = \Delta(x).$$

Beweis: Benütze (c) um x auf einen reinen Raumvektor (Zeitkomponente verschwindet) zu transformieren, dann (a).(e) Für raumartige Vektoren x gilt somit:

$$\Delta(x) = 0 \quad (\text{für } x^2 < 0). \quad (8.21)$$

- Spin-Statistik-Theorem

Wegen der *Mikrokausalität* (oder *Lokalität*) müssen raumartig getrennte Observa-

ble $O(x)$, $O(x')$ mit $(x - x')^2 < 0$ vertauschen. Wähle

$$\begin{aligned}
O(x) &= \bar{\psi}(x)\psi(x) = \sum_{\alpha=0}^3 \bar{\psi}_{\alpha}(x)\psi_{\alpha}(x) \\
\Rightarrow \quad & [\bar{\psi}(x)\psi(x), \bar{\psi}(x')\psi(x')] \\
&= \bar{\psi}_{\alpha}(x)[\psi_{\alpha}(x), \bar{\psi}(x')\psi(x')] + [\bar{\psi}_{\alpha}(x), \bar{\psi}(x')\psi(x')]\psi_{\alpha}(x) \\
&= \bar{\psi}_{\alpha}(x) (\{\psi_{\alpha}(x), \bar{\psi}_{\beta}(x')\}\psi_{\beta}(x') - \bar{\psi}_{\beta}(x')\{\psi_{\alpha}(x), \psi_{\beta}(x')\}) \\
&\quad + (\{\bar{\psi}_{\alpha}(x), \bar{\psi}_{\beta}(x')\}\psi_{\beta}(x') - \bar{\psi}_{\beta}(x')\{\bar{\psi}_{\alpha}(x), \psi_{\beta}(x')\}) \psi_{\alpha}(x) \\
&= \bar{\psi}_{\alpha}(x) ((i\cancel{\partial} + m)_{\alpha\beta}i\Delta(x - x')) \psi_{\beta}(x') \\
&\quad + \bar{\psi}_{\beta}(x') ((-i\cancel{\partial} + m)_{\beta\alpha}i\Delta(x - x')) \psi_{\alpha}(x) \\
&= 0, \text{ falls } (x - x')^2 < 0, \text{ wegen (8.21).}
\end{aligned}$$

- Man kann auch versuchen, das Dirac-Feld mit den Bose-Vertauschungsrelationen zu quantisieren:

$$\begin{aligned}
& [\bar{\psi}(x)\psi(x), \bar{\psi}(x')\psi(x')] \\
&= \bar{\psi}_{\alpha}(x)[\psi_{\alpha}(x), \bar{\psi}(x')\psi(x')] + [\bar{\psi}_{\alpha}(x), \bar{\psi}(x')\psi(x')]\psi_{\alpha}(x) \\
&= \bar{\psi}_{\alpha}(x) (\bar{\psi}_{\beta}(x')[\psi_{\alpha}(x), \psi_{\beta}(x')] + [\psi_{\alpha}(x), \bar{\psi}_{\beta}(x')]\psi_{\beta}(x')) + \\
&\quad + (\bar{\psi}_{\beta}(x')[\bar{\psi}_{\alpha}(x), \psi_{\beta}(x')]\psi_{\alpha}(x) + [\bar{\psi}_{\alpha}(x), \bar{\psi}_{\beta}(x')]\psi_{\beta}(x')) \psi_{\alpha}(x).
\end{aligned}$$

Im weiteren Vorgehen muss man nun Kommutatoren statt der Anti-Kommutatoren (8.4) benutzen. Die (8.20) entsprechende Rechnung führt auf

$$[\psi_{\alpha}(x), \bar{\psi}_{\beta}(x')] = (i\cancel{\partial} + m)_{\alpha\beta}i\Delta_1(x - x')$$

mit

$$\Delta_1(x) = \frac{1}{2i} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_{\vec{k}}} (e^{-ikx} + e^{ikx}).$$

Die Funktion $\Delta_1(x)$ verschwindet im Allgemeinen *nicht* für $x^2 < 0$, die Mikrokausalität ist verletzt! †

Das Dirac-Feld muss also unbedingt mit den Fermi-Vertauschungsrelationen (8.4) quantisiert werden.

- (ii) Spin-0 Teilchen (oder allgemein Teilchen mit ganzzahligem Spin (0,1,2,...)) werden mittels der Klein-Gordon-Gleichung (7.6) beschrieben.

- Bei Quantisierung mit Bose-Vertauschungsrelationen,

$$[\phi(x), \phi(x')] = i\Delta(x - x'),$$

ist die Mikrokausalität erfüllt.

- Bei Quantisierung mit Fermi-Vertauschungsrelationen würde die Mikrokausalität verletzt.

8.2 Photonen

Ausgehend von den Maxwell-Gleichungen von Kapitel 6 erhalten wir durch Feldquantisierung das quantisierte Strahlungsfeld, siehe Abb. 8.2.

	Einteilchentheorie (endliche Anzahl von Freiheitsgraden)	Vielteilchen- oder Feldtheorie (unendlich viele Freiheitsgrade)
klassisch	harmonischer Oszillator	Maxwell-Theorie
quantenmechanisch	quantenmechanischer harmonischer Oszillator	↓ "Feldquantisierung" quantisiertes Strahlungsfeld (Photonen)

Abbildung 8.2: Quantisierung des Strahlungsfeldes.

8.2.1 Klassisches Strahlungsfeld

Das elektromagnetische Feld wird beschrieben durch die Maxwell-Gleichungen (5.6)–(5.8),

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= \rho / \epsilon_0, & \vec{\nabla} \times \vec{B} - \dot{\vec{E}} / c^2 &= \mu_0 \vec{j}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0, & \vec{\nabla} \times \vec{E} + \dot{\vec{B}} &= 0,\end{aligned}$$

wobei \vec{E} das elektrische Feld, \vec{B} die magnetische Induktion („Magnetfeld“), ρ die Ladungsdichte, \vec{j} die Stromdichte, ϵ_0 die Vakuum-Dielektrizitätskonstante, μ_0 die Permeabilität des Vakuums und $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-\frac{1}{2}}$ die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum bezeichnen. Mit der Viererstromdichte

$$j^\mu = (\rho c, \vec{j}). \quad (8.22)$$

und dem Feldtensor

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}.$$

lassen sich die Maxwell-Gleichungen in kovarianter Form schreiben (vgl. (6.8) und (6.9)),

$$\text{inhomogen: } \partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu, \quad (8.23)$$

$$\text{homogen: } \partial^\lambda F^{\mu\nu} + \partial^\mu F^{\nu\lambda} + \partial^\nu F^{\lambda\mu} = 0. \quad (8.24)$$

Außerdem erfüllt die Stromdichte die Kontinuitätsgleichung,

$$\partial_\mu j^\mu = 0. \quad (8.25)$$

Wir lösen die homogenen Gleichungen (8.24) durch das Vektorpotential $A^\mu = (\Phi, \vec{A})$,

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu.$$

Mit den inhomogenen Gleichungen (8.23) folgt dann

$$\underbrace{\partial_\mu \partial^\mu}_{=-\square} A^\nu - \partial^\nu \partial_\mu A^\mu = \mu_0 j^\nu. \quad (8.26)$$

Der Übersichtlichkeit wegen setzen wir nun $\epsilon_0 = \mu_0 = c = 1$.

Eichtransformationen

Das Vektorpotential A^μ ist durch (8.26) nicht eindeutig festgelegt, sondern nur bis auf Eichtransformationen

$$A^\mu \rightarrow A'^\mu = A^\mu + \partial^\mu \lambda \quad (8.27)$$

wobei $\lambda(x)$ eine beliebige (differenzierbare) Funktion sein kann. Dabei bleiben $F^{\mu\nu}$, \vec{E} und \vec{B} invariant. Mögliche Eichungen:

$$\begin{aligned} \text{Lorenz-Eichung:} & \quad \partial_\mu A^\mu = 0, \\ \text{Coulomb-Eichung:} & \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \partial_i A^i = 0. \\ & \quad (= \text{transversale Eichung}) \end{aligned}$$

Hier verwenden wir die Coulomb-Eichung. Mit

$$\partial_\nu A^\nu = \partial_0 A^0 + \underbrace{\partial_i A^i}_{=0} = \frac{\partial \Phi}{\partial t}$$

wird (8.26) zu

$$-\square A^\mu - \partial^\mu \partial_0 A^0 = j^\mu.$$

Für $\mu = 0$ finden wir daraus die *Poisson-Gleichung*,

$$-\Delta \Phi = \partial_\nu \partial^\nu \Phi - \partial^0 \partial_0 \Phi = \rho, \quad (8.28)$$

mit der Lösung

$$\Phi(\vec{r}, t) = A^0(\vec{r}, t) = \int d^3 r' \frac{\rho(\vec{r}', t)}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (8.29)$$

Für $\mu = i = 1, 2, 3$ ergibt sich die Gleichung

$$\partial_\nu \partial^\nu A_i + \partial_i \partial_0 A_0 = j_i. \quad (8.30)$$

Den zweiten Term auf der linken Seite kann man durch die Lösung für $\Phi = A^0$ ausdrücken,

$$\begin{aligned} \partial_i \partial_t A_0(\vec{r}, t) &\stackrel{(8.29)}{=} \partial_i \int d^3 r' \frac{\partial_t \rho(\vec{r}', t)}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} \\ &\stackrel{(8.25)}{=} -\partial_i \int d^3 r' \frac{\partial'_k j_k(\vec{r}')}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} \\ &\stackrel{(*)}{=} -\partial_i \partial_k \int d^3 r' \frac{j_k(\vec{r}')}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} =: \frac{\partial_i \partial_k}{\Delta} j_k(\vec{r}). \end{aligned}$$

Den Schritt (*) sieht man mit partieller Integration ein. Damit wird (8.30) zur Wellengleichung:

$$-\square A_i = \left(\delta_{ik} - \frac{\partial_i \partial_k}{\Delta} \right) j_k. \quad (8.31)$$

Die Gleichungen (8.28) und (8.31) sind analog zu (5.13) und (5.12), jedoch mit der Coulomb-Eichung anstelle der Lorenz-Eichung. Im weiteren Vorgehen werden wir die Coulomb-Eichung verwenden.

Zur Notation:

$$\begin{aligned} g(\vec{r}) &= \int d^3 r' \frac{f(\vec{r}')}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} = -\frac{1}{\Delta} f(\vec{r}), \\ \Rightarrow -\Delta g(\vec{r}) &= f(\vec{r}). \end{aligned}$$

Den Integrationsterm

$$-\frac{1}{\Delta} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (8.32)$$

nennt man *Green-Funktion* des Coulomb-Potentials.

Lagrange-Dichte für das elektromagnetische Feld

Wie die Newtonschen Gleichungen können wir auch die Maxwell-Gleichungen im Lagrange-Formalismus aus einer Lagrange-Funktion erzeugen. Weil die dynamischen Variablen in der Elektrodynamik Felder sind, ist die Lagrange-Funktion das Integral $L = \int d^3 r \mathcal{L}(\vec{r})$ über die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}(A_\mu, \dot{A}_\mu) = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - j_\mu A^\mu. \quad (8.33)$$

Die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\partial_\mu (-F^{\mu\nu}) = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu A_\nu)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\nu} = -j^\nu$$

ergeben die Maxwell-Gleichungen (5.5) bis (5.8). Der zur Variablen A_μ kanonisch konjugierte Impuls ist

$$\pi^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_\mu} = -F^{0\mu}, \quad (8.34)$$

so dass

$$\pi^0 = 0, \quad \pi^i = E^i. \quad (8.35)$$

Wegen $\pi^0 = 0$ ist A^0 konstant. Da es im gesamten Formalismus lediglich auf Ableitungen des Potentials A^μ ankommt, können wir $A^0 = 0$ wählen.

Für freie Felder $j^\mu = 0$ erhalten wir aus (8.33)

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\vec{E}^2 - \vec{B}^2). \quad (8.36)$$

Die entsprechende Hamilton-Dichte ist

$$\mathcal{H} = \pi^i \dot{A}^i - \mathcal{L} = \frac{1}{2} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2). \quad (8.37)$$

Die rechte Seite von (8.31) verschwindet wegen $j^\mu = 0$, so dass wir die Wellengleichung

$$\square A_i = 0 \quad (8.38)$$

erhalten. Die allgemeine Lösung dieser homogenen Wellengleichung ist

$$A^\mu(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \frac{1}{\sqrt{2|\vec{k}|V}} \left(e^{-ikx} \epsilon_{\vec{k},\lambda}^\mu a_{\vec{k},\lambda} + e^{ikx} (\epsilon_{\vec{k},\lambda}^\mu)^* a_{\vec{k},\lambda}^\dagger \right) \quad (8.39)$$

mit

$$\begin{aligned} k^0 &= |\vec{k}|, \\ \vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} &= 0 \quad (\text{wegen Coulomb-Eichung, } \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0), \\ \epsilon_{\vec{k},\lambda}^0 &= 0 \quad (\text{wegen } A^0 = 0), \\ \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda'} &= \delta_{\lambda,\lambda'} \quad (\text{lineare Unabhängigkeit der Lösungen in (8.39)}). \end{aligned} \quad (8.40)$$

Bemerkung: In (8.39) sind $a_{\vec{k},\lambda}$ und $a_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ vorerst komplexe *Zahlen* (also $a_{\vec{k},\lambda}^\dagger = a_{\vec{k},\lambda}^*$), wir werden aber sehen, dass sie in der quantisierten Theorie zu Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren werden.

Damit ist das elektrische Feld

$$\vec{E} = -\dot{\vec{A}} = -\sum_{\vec{k},\lambda} \sqrt{\frac{|\vec{k}|}{2V}} \left(-ie^{-ikx} \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} + ie^{ikx} (\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})^* a_{\vec{k},\lambda}^* \right), \quad (8.41)$$

und analog für das Magnetfeld. Für die Energiedichten im elektrischen und magnetischen Feld finden wir

$$\int d^3r |\vec{E}(\vec{r})|^2 = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{|\vec{k}|}{2} \left(a_{\vec{k}, \lambda}^* a_{\vec{k}, \lambda} + a_{-\vec{k}, \lambda} a_{-\vec{k}, \lambda}^* \right) = \int d^3r |\vec{B}(\vec{r})|^2. \quad (8.42)$$

Dabei wird im letzten Schritt $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ verwendet. Die Hamiltonfunktion

$$H = \int d^3r \mathcal{H}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{|\vec{k}|}{2} \left(a_{\vec{k}, \lambda}^* a_{\vec{k}, \lambda} + a_{-\vec{k}, \lambda} a_{-\vec{k}, \lambda}^* \right)$$

beschreibt einen harmonischen Oszillator für jedes Paar (\vec{k}, λ) . Dies kann man mit den Substitutionen

$$\begin{aligned} \omega_{\vec{k}} &= |\vec{k}|, \\ a_{\vec{k}, \lambda} &= \sqrt{\frac{\omega_{\vec{k}}}{2\hbar}} x_{\vec{k}, \lambda} + \sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega_{\vec{k}}}} i p_{\vec{k}, \lambda}, \\ a_{\vec{k}, \lambda}^* &= \sqrt{\frac{\omega_{\vec{k}}}{2\hbar}} x_{\vec{k}, \lambda} - \sqrt{\frac{1}{2\hbar\omega_{\vec{k}}}} i p_{\vec{k}, \lambda}. \end{aligned} \quad (8.43)$$

explizit sehen. Damit wird die Hamiltonfunktion zu

$$H = \sum_{\vec{k}, \lambda} \left(\frac{p_{\vec{k}, \lambda}^2}{2} + \omega_{\vec{k}}^2 \frac{x_{\vec{k}, \lambda}^2}{2} \right). \quad (8.44)$$

8.2.2 Feldquantisierung

In (8.44) werden $x_{\vec{k}, \lambda}$ und $p_{\vec{k}, \lambda}$ auch *Quadraturen* des elektromagnetischen Feldes genannt. Die harmonischen Oszillatoren können nun wie üblich (siehe Kapitel 4.1) *unabhängig voneinander* quantisiert werden, indem $x_{\vec{k}, \lambda}$ und $p_{\vec{k}, \lambda}$ als Operatoren mit der Vertauschungsrelation

$$[x_{\vec{k}, \lambda}, p_{\vec{k}', \lambda'}] = i\hbar \delta_{\lambda, \lambda'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$

aufgefasst werden. Dann findet man für die Operatoren $a_{\vec{k}, \lambda}$ und $a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger$, welche die komplexen Amplituden $a_{\vec{k}, \lambda}$ und $a_{\vec{k}, \lambda}^*$ ersetzen, aus (8.43) die Relationen

$$[a_{\vec{k}, \lambda}, a_{\vec{k}', \lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda, \lambda'} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, \quad (8.45)$$

$$[a_{\vec{k}, \lambda}, a_{\vec{k}', \lambda'}] = [a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger, a_{\vec{k}', \lambda'}^\dagger] = 0. \quad (8.46)$$

Die Anregung, die durch den Operator $a_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ erzeugt wird, heißt *Photon* mit Impuls \vec{k} , Energie $|\vec{k}|$ und Polarisation (oder Helizität) λ . Gleichung (8.39) kann nun als *Feldoperator* für das quantisierte elektromagnetische Feld aufgefasst werden.

Bemerkung: Im Unterschied zu $\psi(x)$ und $\bar{\psi}(x)$ beim Dirac-Feld sind $\vec{A}(x)$, $\vec{E}(x)$ und $\vec{B}(x)$ alleamt hermitesche Operatoren und somit physikalische Observablen (siehe (8.10) und (8.11)).

Der Hamiltonoperator des freien elektromagnetischen Feldes ist nun

$$H_p = \sum_{\vec{k},\lambda} c|\vec{k}| \left(a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (8.47)$$

Etwas störend ist hier noch die divergierende Nullpunktsenergie $\sum_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{2} \rightarrow \infty$, die oft durch Einführung des *normalgeordneten Produkts* wegdefiniert wird. Dabei werden bei Operatorprodukten die Vernichtungsoperatoren immer rechts der Erzeugungsoperatoren geschrieben:

$$H_p = : \frac{1}{2} \int d^3r (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) : = \sum_{\vec{k},\lambda} |\vec{k}| a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda}. \quad (8.48)$$

Der Impulsoperator des Strahlungsfeldes (*Poynting-Vektor*) ist

$$\vec{p} = : \int d^3r \vec{E} \times \vec{B} : = \sum_{\vec{k},\lambda} \vec{k} a_{\vec{k},\lambda}^\dagger a_{\vec{k},\lambda}. \quad (8.49)$$

Kommutatoren der kanonischen Variablen (aus (8.39) und (8.41) mit (8.45) und (8.46)):

$$\left[A^i(\vec{r}, t), \dot{A}^j(\vec{r}', t) \right] = i \left(\delta^{ij} - \frac{\partial^i \partial^j}{\Delta} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (8.50)$$

$$\left[A^i(\vec{r}, t), A^j(\vec{r}', t) \right] = \left[\dot{A}^i(\vec{r}, t), \dot{A}^j(\vec{r}', t) \right] = 0. \quad (8.51)$$

Der Operator in Klammern auf der rechten Seite von (8.50) stammt daher, dass wegen der Coulomb-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ das elektromagnetische Feld \vec{A} und damit auch \vec{E} *transversal* sind, d.h. die Polarisation $\vec{e}_{\vec{k},\lambda}$ muss immer senkrecht auf \vec{k} stehen, siehe auch (8.40). Die Quantisierungseigenschaften hängen mit \vec{A} von der gewählten Eichung ab. Die Felder \vec{E} und \vec{B} sowie deren Kommutatoren sind aber eichinvariant:

$$\begin{aligned} \left[E^i(\vec{r}, t), E^j(\vec{r}', t) \right] &= \left[B^i(\vec{r}, t), B^j(\vec{r}', t) \right] = 0, \\ \left[E^i(\vec{r}, t), B^j(\vec{r}', t) \right] &= i\epsilon^{ijk} \partial_k \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \end{aligned}$$

Diese Kommutatoren sind lokal, im Gegensatz zu (8.50), wo der nicht-lokale Operator $1/\Delta$ auftritt.

8.3 Licht und Materie: QED

In den Kapiteln 8.1 und 8.2 haben wir uns das freie quantisierte Dirac-Feld (nicht-wechselwirkende Elektronen) bzw. das freie quantisierte Strahlungsfeld (nicht-wechselwirkendes Photon) betrachtet. Nun sollen diese beiden Felder gekoppelt werden, um Streuprozesse zwischen Photonen und Elektronen bzw. Strahlungsübergänge verstehen zu können. Wir betrachten diese Prozesse aber nicht im Detail, sie sind das Thema der „Quantenfeldtheorie“. Zur Herleitung des entsprechenden Hamiltonoperators beginnen wir mit dem für Elektronen, (8.12),

$$H_e = \int d^3r \bar{\psi}(\vec{r}) (-i\gamma^i \partial_i + m) \psi(\vec{r})$$

und machen die übliche Ersetzung für die Kopplung an das elektromagnetische Feld:

$$p_\mu = i\partial_\mu \rightarrow p_\mu - eA_\mu \quad (p_0 \hat{=} H),$$

wobei aber hier A^i ein *Feldoperator* ist. Daraus folgt

$$\begin{aligned} H_e &\rightarrow H_e + H_{ep} \quad \text{mit} \\ H_{ep} &= e \int d^3r \bar{\psi}(\vec{r}) \gamma^\mu A_\mu \psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (8.52)$$

Insgesamt ist

$$H = H_e + H_p + H_{ep},$$

wobei

$$H_p = \sum_{\vec{k}, \lambda} |\vec{k}| a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda} \quad (8.53)$$

aus (8.48) und

$$A^\mu(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{1}{\sqrt{2|\vec{k}|V}} \left(e^{-ikx} \epsilon_{\vec{k}, \lambda}^\mu a_{\vec{k}, \lambda} + e^{ikx} (\epsilon_{\vec{k}, \lambda}^\mu)^* a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \right)$$

aus (8.39) bekannt sind.

Bemerkung: Man kann auch nicht-relativistische Elektronen an das quantisierte elektromagnetische Feld koppeln. Dann ist

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \sum_i \left(\vec{p}_i - e\vec{A}(\vec{r}_i) \right)^2 + \sum_i V(\vec{r}_i) + \sum_i e\Phi(\vec{r}_i) + H_p = H_e + H_{ep} + H_p, \\ H_e &= \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right), \\ H_{ep} &= -\frac{e}{m} \sum_i \vec{A}(\vec{r}_i) \cdot \vec{p}_i + \frac{e^2}{2m} \sum_i A(\vec{r}_i)^2 + \sum_i e\Phi(\vec{r}_i) \end{aligned} \quad (8.54)$$

und H_p wie in (8.53). Für schwache Felder ist der zweite Term von (8.54) $\propto A^2$ viel kleiner als der erste $\propto A$.

Wir betrachten nur die folgenden Prozesse:

- (i) Strahlungsübergänge und
- (ii) Streuvorgänge.

8.3.1 Strahlungsübergänge

Beispiel: H-Atom, hier können die Elektronen nicht-relativistisch behandelt werden.

Berechnung von Emission und Absorption

Wir benutzen Fermis Goldene Regel (3.35) aus der zeitabhängige Störungstheorie. Die Übergangsrates zwischen zwei Eigenzuständen $|i\rangle$ und $|j\rangle$ von $H_0 = H_e + H_p$ ist

$$\Gamma_{i \rightarrow j} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) |\langle j | H_{ep} | i \rangle|^2 \quad (8.55)$$

mit den Zuständen

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |a\rangle |n\rangle_{\vec{k}, \lambda} \dots \text{ und} \\ |j\rangle &= |b\rangle |n \pm 1\rangle_{\vec{k}, \lambda} \dots \end{aligned}$$

Diese ergeben sich aus dem Zustand des Elektrons sowie der Anzahl der Photonen. Für Emission eines Photons gilt $n \rightarrow n + 1$, und man findet die Rate

$$\Gamma_{a \rightarrow b}^{\text{em}} \stackrel{(8.55)}{=} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \lambda} \delta(\underbrace{\epsilon_b - \epsilon_a}_{\text{Elektronen-niveaus}} + \underbrace{\hbar\omega_{\vec{k}}}_{\text{Photon} = c\hbar|\vec{k}|}) \frac{e^2}{2m^2|\vec{k}|} (n+1) \left| \langle b | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda})^* \cdot \vec{p} | a \rangle \right|^2 \quad (8.56)$$

Dabei wurde

- in (8.54) nur der erste Term berücksichtigt,
- $\vec{A}(\vec{r})$ aus (8.39) in der Schrödingerdarstellung (d.h. ohne Zeitabhängigkeit) in (8.54) eingesetzt und
- $\vec{k}, \lambda \langle n+1 | a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger | n \rangle_{\vec{k}, \lambda} = \sqrt{n+1}$ benutzt.

Im Kontinuumslimites kann man die Summe durch ein Integral ersetzen,

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk k^2 \int d\Omega_{\vec{k}} \quad \text{Oberflächenintegral}$$

Damit wird (8.56) zu

$$\begin{aligned} \Gamma_{a \rightarrow b}^{\text{em}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{2m^2} (n+1) \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int dk k \delta(\epsilon_b - \epsilon_a + c\hbar|\vec{k}|) \int d\Omega_{\vec{k}} \left| \langle b | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})^* \cdot \vec{p} | a \rangle \right|^2 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 \omega (n+1)}{2(2\pi)^3 m^2 c} \sum_{\lambda} \int d\Omega_{\vec{k}} \left| \langle b | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})^* \cdot \vec{p} | a \rangle \right|^2, \end{aligned}$$

wobei ω durch $\hbar\omega = c\hbar|\vec{k}| \stackrel{!}{=} \epsilon_a - \epsilon_b$ festgelegt ist. In der *Dipolnäherung*

$$e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 1 - i\vec{k} \cdot \vec{r} + \dots \approx 1$$

wird dies zu ($c = 1$)

$$\Gamma_{a \rightarrow b}^{\text{em}} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 \omega}{2(2\pi)^3 m^2} (n+1) \sum_{\lambda} \int d\Omega_{\vec{k}} \left| \langle b | (\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})^* \cdot \vec{p} | a \rangle \right|^2 \quad (8.57)$$

Dipol-Matrixelement

$$= \sum_{\lambda=1,2} \int d\Omega_{\vec{k}} \Gamma_{a \rightarrow b, \vec{k}, \lambda}^{\text{em}} \quad (8.58)$$

mit der winkelaufgelösten Emissionsrate

$$\Gamma_{a \rightarrow b, \vec{k}, \lambda}^{\text{em}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 \omega}{2(2\pi)^3 m^2} (n+1) \left| \langle b | (\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda})^* \cdot \vec{p} | a \rangle \right|^2. \quad (8.59)$$

Eine analoge Rechnung für Absorption $n \rightarrow n - 1$ resultiert in

$$\Gamma_{a \rightarrow b, \vec{k}, \lambda}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 \omega}{2(2\pi)^3 m^2} n \left| \langle b | \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{p} | a \rangle \right|^2. \quad (8.60)$$

Der Faktor n rührt von $\langle n-1 | a | n \rangle = \sqrt{n}$ her. Hier ist ω durch $\hbar\omega = c\hbar|\vec{k}| \stackrel{!}{=} \epsilon_b - \epsilon_a$ festgelegt. Vorsicht: Bei gleichem Ausgangszustand $|a\rangle$ sind die Endzustände $|b\rangle$ von (8.59) und (8.60) selbstverständlich verschieden!

Bemerkung: Auch für $n = 0$ (keine Photonen, Vakuum) gilt $\Gamma_{a \rightarrow b}^{\text{em.}} \neq 0$. Der Term in (8.57), der nicht von n abhängt heißt deshalb *spontane Emission*, der Term $\propto n$ heißt *induzierte Emission*. Die spontane Emission ist ein reiner Quanteneffekt und tritt auf, weil die Operatoren $a_{\vec{k},\lambda}$ und $a_{\vec{k},\lambda}^\dagger$ nicht vertauschen.

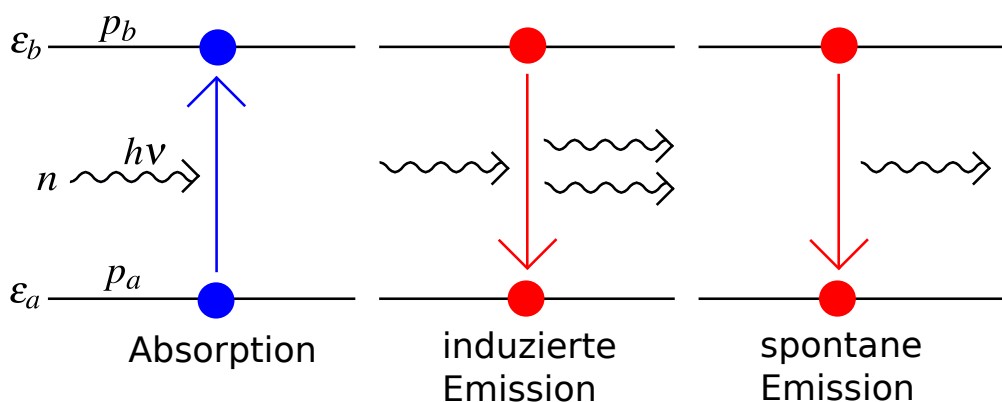


Abbildung 8.3: Absorption und induzierte Emission reichen für thermisches Gleichgewicht nicht aus, es muss auch spontane Emission geben. Die Anzahl n der Photonen ist im Gleichgewicht konstant.

Einstein A und B Koeffizienten

Einstein hat schon vor der Entwicklung der modernen Quantenmechanik vieles über das eben Hergeleitete gefunden. Betrachte ein Atom im Kontakt mit dem Strahlungsfeld (und dabei nur die Mode mit $\hbar\omega = \epsilon_b - \epsilon_a$). Da Photonen Bosonen sind, ist die Besetzungszahl des Zustands $|\vec{k}, \lambda\rangle$ im thermodynamischen Gleichgewicht durch die Bose-Einstein-Verteilungsfunktion gegeben:

$$n := n_{\vec{k}, \lambda} = \frac{1}{e^{\frac{c\hbar|\vec{k}|}{k_B T}} - 1}. \quad (8.61)$$

Das Verhältnis der Besetzung des oberen zum unteren Zustand wird im thermodynamischen Gleichgewicht durch die Boltzmann-Verteilung beschrieben:

$$\frac{p_b}{p_a} = e^{-\frac{c\hbar|\vec{k}|}{k_B T}}. \quad (8.62)$$

Gäbe es lediglich Absorption und induzierte Emission, wäre die zeitliche Änderung der Photonenanzahl gegeben durch die Rategleichung

$$\dot{n} = \underbrace{-Bnp_a}_{\text{Absorption}} + \underbrace{Bnp_b}_{\text{induzierte Emission}}. \quad (\text{Falsch! } \ddagger)$$

Dabei ist B ein reeller Koeffizient. (Aus einer Rechnung mit dem klassischen Strahlungsfeld folgt, dass die Koeffizienten für Absorption und induzierte Emission gleich sind.) Im Gleichgewicht ($\dot{n} = 0$) müsste dann aber $p_a = p_b$ sein, was nicht (8.62) entspricht. Es braucht etwas mehr Emission als Absorption, um das „korrekte“ thermodynamische Gleichgewicht zu erreichen, Abbildung 8.3. Einstein hat so also die spontane Emission „erraten“ und hat sie mit einem weiteren Koeffizienten A angesetzt:

$$\dot{n} = -Bnp_a + Bnp_b + Ap_b = -Bn(p_a - p_b) + Ap_b = 0. \quad (8.63)$$

Diese Bedingung für den stationären Zustand können wir nach A/B auflösen,

$$\frac{A}{B} = n \frac{p_a - p_b}{p_b} \stackrel{(8.61)}{=} \stackrel{(8.62)}{=} \frac{1}{e^{\frac{c\hbar|\vec{k}|}{k_B T}} - 1} \left(e^{\frac{c\hbar|\vec{k}|}{k_B T}} - 1 \right) = 1.$$

Also $A = B$. Dies entspricht genau unserem Resultat (8.59), mit

$$A = B = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 \omega}{2(2\pi)^3 m^2} \left| \langle b | (\vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda})^* \cdot \vec{p} | a \rangle \right|^2. \quad (8.64)$$

8.3.2 Streuvorgänge

Wir betrachten einen Streuvorgang (s. Abbildung 8.4). Zur Beschreibung verwenden wir die Streumatrix.

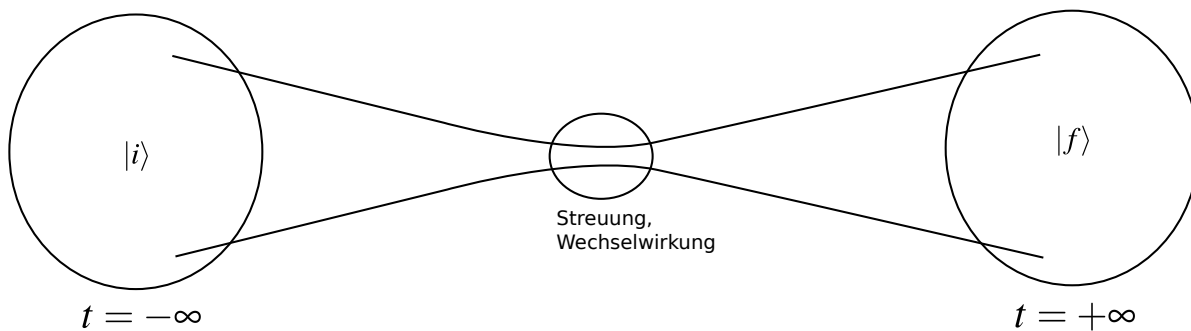


Abbildung 8.4: Streuvorgang

Streumatrix

Wir benutzen wieder die zeitabhängige Störungstheorie in der Wechselwirkungsdarstellung (siehe Kapitel 3.2), mit dem Hamiltonoperator

$$H = H_0 + H', \quad (8.65)$$

wobei

$$H_0 = H_e + H_p \quad (8.66)$$

der Hamilton-Operator der ungekoppelten Felder ist, deren Eigenzustände bekannt sind, und

$$H' = H_{ep} \quad (8.67)$$

die Elektron-Photon-Kopplung, die wir als kleine Störung behandeln. Im Weiteren benützen wir das Wechselwirkungsbild (siehe Kapitel 3.2), wo der Zustand $|\psi_I\rangle = e^{iH_0t}|\psi\rangle$ die Schrödinger-Gleichung

$$i\partial_t|\psi_I\rangle = H'_I|\psi_I\rangle, \quad (8.68)$$

erfüllt. Die Operatoren im Wechselwirkungsbild sind $A_I = e^{iH_0t}Ae^{-iH_0t}$. Formal kann (8.68) durch

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t)|\psi_I(t=0)\rangle, \quad (8.69)$$

gelöst werden, mit

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= T \exp\left(-i \int_{t_0}^t dt_1 H'_I(t_1)\right) \\ &= \mathbb{1} - i \int_{t_0}^t dt_1 H'_I(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H'_I(t_1) H'_I(t_2) + \dots \end{aligned} \quad (8.70)$$

Die Übergangsrate vom Anfangszustand $|i\rangle$ in den Endzustand $|f\rangle$ ist (s. Abb. 8.4)

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{1}{t - t_0} |\langle f|U_I(t, t_0)|i\rangle|^2. \quad (8.71)$$

Der Anfangszustand

$$|i\rangle = |\psi_I(-\infty)\rangle, \quad t_0 = -\infty$$

ist ein Zustand nicht-wechselwirkender, freier Teilchen, ebenso der Endzustand

$$|\psi_I(t = \infty)\rangle = U_I(\infty, -\infty)|i\rangle.$$

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Endzustand $|f\rangle$ berechnet man mit

$$\langle f|\psi_I(t = \infty)\rangle = \langle f|U_I(\infty, -\infty)|i\rangle = \langle f|S|i\rangle = S_{fi}, \quad (8.72)$$

wobei S die *Streumatrix* ist. Für die Übergangsrate gilt also

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |\langle f|S|i\rangle|^2, \quad (8.73)$$

mit

$$S = U_I(\infty, -\infty) = T \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 H'_I(t_1)\right) = \mathbb{1} - i \int_{-\infty}^{\infty} dt H'_I(t) + \dots \quad (8.74)$$

Wegen $S = U_I(\infty, -\infty)$ und $U_I^\dagger = U_I^{-1}$ ist die Streumatrix unitär,

$$S^\dagger S = S S^\dagger = \mathbb{1}.$$

Für Strahlungsübergänge hat S die Form

$$S = T \exp\left(-i \int d^4x \mathcal{H}'_I(x)\right) \quad (8.75)$$

mit der Wechselwirkungs-Hamilton-Dichte

$$\mathcal{H}'_I(x) = e : \bar{\psi}_I(x) \gamma^\mu A_{I,\mu}(x) \psi_I(x) : , \quad (8.76)$$

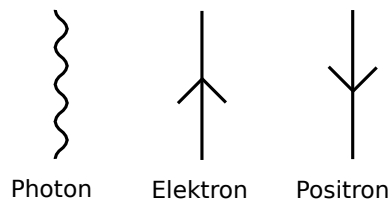
siehe (8.67) und (8.52).

Prozesse tiefster Ordnung

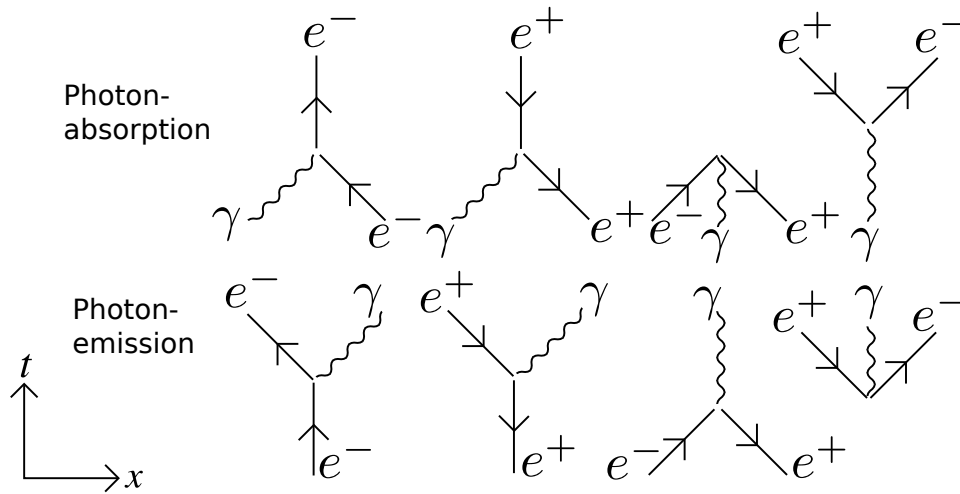
Wir zerlegen die Feldoperatoren $\bar{\psi}_I, \psi_I$ und $A_{I,\mu}$ in Anteile positiver (Emission) und negativer (Absorption) Energie:

$$S = \mathbb{1} - ie \int d^4x : (\bar{\psi}_I^+ + \bar{\psi}_I^-) \gamma^\mu (A_{I,\mu}^+ + A_{I,\mu}^-) (\psi_I^+ + \psi_I^-) : + \text{Terme h\u00f6herer Ordnung} .$$

Dies ergibt insgesamt 8 Terme, die wir mittels der Linien

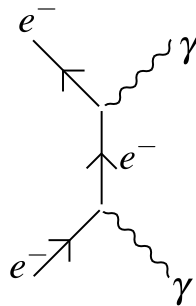


als *Feynman-Graphen* darstellen k\u00f6nnen:

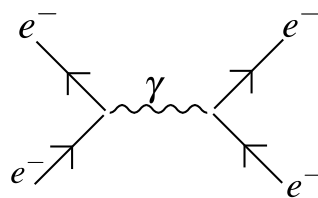


Energie- und Impulserhaltung erlauben diese Prozesse nicht als *reelle* Streuübergänge 1. Ordnung. Sie können aber als Teilprozesse von Prozessen höherer Ordnung auftreten, z.B.:

- Compton-Streuung (Streuung eines Elektrons an einem Photon) oder



- Elektron-Elektron Streuung (Møller-Streuung).



Die Streurrate für solche Prozesse pro eingehendem Teilchenfluss und pro ausgehendem Raumwinkel heißt *differentieller Wirkungsquerschnitt* $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ und wird mit der hier angedeuteten Störungstheorie (bzw. den daraus abgeleiteten *Feynman-Regeln*) berechnet. Details der Quantenelektrodynamik werden in der Quantenfeldtheorie behandelt.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics* (Addison Wesley, 1993).
- [2] F. Schwabl, *Quantenmechanik und Quantenmechanik für Fortgeschrittene* (Springer, 2007 und 2005).
- [3] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik*, Bände 4, 5/2 und 7 (Springer, 2005, 2006 und 2005).
- [4] A. Messiah, *Quantenmechanik 2* (de Gruyter, 1990).
- [5] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction* (Oxford, 2004).