

Quantentheorie II

Gerhard Soff

Institut für Theoretische Physik

Technische Universität Dresden

Vorlesung im Wintersemester 1998/99

Vorbemerkungen

Im Rahmen dieser Vorlesung sollen fortgeschrittenere Bereiche der Quantenmechanik vermittelt werden und eine Einführung in moderne Aspekte der Quantentheorie erfolgen. Diese Vorlesung ist primär vorgesehen für Studenten des 6. Semesters, also für den Zeitrahmen nach dem Vordiplom im Rahmen des Hauptstudiums. Da aber die Kenntnisse der Statistischen Physik und Thermodynamik nicht zu den essentiellen Voraussetzungen für das Verständnis der Vorlesungsinhalte zählen, kann die Vorlesung Quantentheorie II auch direkt nach der Quantenmechanik gehört werden. Grundsätzlich ist es sinnvoll, daß bereits profunde Kenntnisse der theoretischen Mechanik, insbesondere der speziellen Relativitätstheorie, der Theoretischen Elektrodynamik und der Quantenmechanik vorliegen. Neue mathematische Methoden, die über den Lehrstoff der Mathematik-Vorlesungen im Grundstudium hinausgehen, werden explizit im Rahmen dieser Vorlesung behandelt.

Das Verständnis der Inhalte der Vorlesung Quantentheorie II bildet die Basis für das erfolgreiche Absolvieren fortgeschrittener Lehrveranstaltungen der Theoretischen Physik. Moderne Aspekte der Atomphysik, der Quantenfeldtheorie, die theoretische Festkörperphysik und die Elementarteilchenphysik erfordern unabdingbar die solide Beherrschung der Quantentheorie II.

Inhaltlich wollen wir folgende Teilbereiche behandeln:

1. Dirac-Gleichung
2. Zweite Quantisierung
3. Zeitabhängige Störungstheorie
4. Streutheorie
5. Pfadintegraldarstellung
6. Supersymmetrie

Bezüglich der ergänzenden Literatur sei auf das folgende umfangreiche Literaturverzeichnis verwiesen:

1. E. Fick, *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*,
(Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt am Main, 1974)
2. H. Kalka, G. Soff, *Supersymmetrie*,
(Teubner, Stuttgart, 1997)

3. R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*,
(Mc Graw-Hill, New York, 1965)
4. W. Greiner, *Theoretische Physik, Band 6, Relativistische Quantenmechanik*,
(Harri Deutsch, Thun, 1981)
5. W. Greiner, J. Reinhardt, *Theoretische Physik, Band 7A, Feldquantisierung*,
(Harri Deutsch, Thun, 1993)
6. S. Gasiorowicz, *Quantenphysik*,
(Oldenbourg, München, 1998)
7. L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik IVa, Relativistische Quantentheorie*,
(Akademie-Verlag, Berlin, 1975)
8. E. Merzbacher, *Quantum mechanics*,
(Wiley, New York, 1961)
9. A. Messiah, *Quantum mechanics*,
(North-Holland, Amsterdam, 1961)
10. L. I. Schiff, *Quantum mechanics*,
(Mc Graw-Hill, Tokyo, 1955)
11. I. I. Sakurai, *Advanced quantum mechanics*,
(Addison-Wesley, Reading, 1967)
12. C. Cohen-Tannoudij, *Quantenmechanik*,
(Walter de Gruyter, Berlin, 1997)
13. E. M. Rose, *Relativistische Elektronentheorie*,
(Bibliographisches Institut, Mannheim, 1971)
14. W. Nolting, *Quantenmechanik, Teil 2*,
(Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1993)
15. R. Jelitto, *Theoretische Physik 5: Quantenmechanik II*,
(Aula-Verlag, Wiesbaden, 1984)
16. M. Schubert, G. Weber, *Quantentheorie*,
(Spektrum, Heidelberg, 1993)

17. L. E. Ballentine, *Quantum mechanics*,
(Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1990)
18. G. Baym, *Lectures on quantum mechanics*,
(Addison-Wesley, Reading, 1969)
19. L. S. Schulman, *Techniques and applications of path integration*,
(Wiley, New York, 1981)

Es wird auch für diese Vorlesung angestrebt, ein Vorlesungsscript zu erstellen, das im World Wide Web für jeden Interessenten zur Verfügung gestellt werden soll. Wie bei allen Scripten dieses Vorlesungszyklus muß erneut betont werden, daß auch dieses Script kein Originalwerk repräsentiert. Vielmehr basiert es auf den im Literaturverzeichnis angegebenen Monographien. Gleichwohl reflektiert es die in den jeweiligen Vorlesungen präsentierten Inhalte. Bei der Erstellung der Übungsaufgaben und bei der Betreuung der Übungsgruppen haben mitgewirkt: Dr. Ralf Schützhold, Dr. Ralf Kuhn, Dr. Sven Zschocke und Dr. Michael Meyer-Hermann. Mein ausdrücklicher und besonderer Dank gilt Frau Dipl.-Ing. Gundula Schädlich für das Erstellen der umfangreichen LATEX-Texte sowie für das Zeichnen der Figuren mit Hilfe des Software-Pakets „Corel Draw“. Ebenfalls bedanken möchte ich mich bei Dr. Jörg Bergmann für seine Zuarbeit bei der Erstellung des LATEX-Textes.

Die Inhalte der Vorlesung Quantentheorie II repräsentieren einen essentiellen Anteil des Prüfungstoffes in der Diplomprüfung in Theoretischer Physik.

Diese Vorlesung findet jeweils dienstags und donnerstags in der 2. Doppelstunde, also um 9.20 Uhr, im Hörsaal C213 statt. Grundvoraussetzung für die Erlangung des zugehörigen Scheins ist das erfolgreiche Absolvieren der wöchentlichen Übungen mit jeweils einer Doppelstunde. Ferner gibt es am Ende des Semesters einen Leistungsnachweis durch eine Klausur. Bei Nichtbestehen der Klausur kann die Scheinvergabe auch aufgrund einer erfolgreichen mündlichen Prüfung erfolgen.

Inhaltsverzeichnis

1	Dirac-Gleichung	6
1.1	Einführung in die Klein-Gordon-Gleichung	6
1.2	Einführung in die Dirac-Theorie	11
1.3	Freie Bewegung eines Dirac-Teilchens	16
1.4	Dirac-Teilchen im Zentralkraftfeld	25
1.5	Spin und Konstanten der Bewegung	27
1.6	Spin-Winkelfunktion	31
1.7	Abseparation der Winkel	37
1.8	Lösung der Dirac-Gleichung für das Coulomb-Potential	40
1.9	Lagrange-Formalismus für Felder	49
1.9.1	Die Euler-Lagrange-Gleichungen	49
1.9.2	Kontinuitätsgleichung	51
1.9.3	Das Noether-Theorem	52
1.9.4	Symmetrien	56
1.9.5	Lagrange-Dichten	56
2	Zeitabhängige Störungstheorie	59
2.1	Gekoppelte Kanalgleichungen	59
2.2	Unitaritätsrelationen der Besetzungsamplituden	66
2.3	Fermi's Goldene Regel	68
2.4	Eine atomare Uhr für nukleare Reaktionszeiten	72
3	Zweite Quantisierung	76
3.1	Permutationen	77
3.2	Identische Teilchen	83
3.3	Der antisymmetrische Raum U_N^-	85
3.4	Der unitäre Raum U^-	87
3.5	Besetzungszahl-Operatoren	94
3.6	Feldoperatoren	97
3.7	Funktional und Funktionalableitung	97
3.8	Schrödinger-Feldtheorie	103
3.9	Anwendung des Lagrange-Formalismus für Felder	109
3.10	Das quantisierte Schrödinger-Feld	111
3.11	Teilchenzahl-Operatoren	115
3.12	Teilchenzahl-Operatoren für Fermionen	120
3.13	Die Fermi-Verteilung	123

3.14	Die Hartree-Fock-Theorie	124
4	Streutheorie	132
4.1	Einführung in die Problematik	132
4.2	Die Bornsche Näherung	140
4.3	Der Wirkungsquerschnitt	142
4.4	Die S-Matrix und das optische Theorem	145
4.5	Partialwellenanalyse der Streuung	149
5	Die Pfadintegral-Darstellung der Quantenmechanik	155
5.1	Vorwort zur Pfadintegral-Methode	155
5.2	Quantenfluktuationen und die Summe über alle Pfade	155
5.3	Repetitorium zur Greenschen Funktion in der Quantenmechanik	160
5.4	Die Eigenfunktionsdarstellung der Greenschen Funktion	161
5.5	Einführung der Pfadintegration – Diskussionen im Rahmen des Hamilton-Formalismus	162
5.6	Die Wirkung in der klassischen Mechanik	165
5.7	Die klassische Wirkung für den harmonischen Oszillator und für das freie Teilchen	168
5.8	Die Pfadintegraldarstellung des Propagators unter Verwendung der Lagrange-Funktion	172
5.9	Die Ableitung der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion aus der Schrödinger - Theorie	173
5.10	Die Ableitung der Schrödinger - Gleichung aus der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion	182
5.11	Ausführung der Pfadintegration – Die freie Propagation	184
5.12	Abseparation des klassischen Pfades	185
5.13	Die Greensche Funktion für das Potential des harmonischen Oszillators	188
5.14	Die Eigenfunktionen für das Potential des harmonischen Oszillators	190
6	Supersymmetrie	195
6.1	Einführung	195
6.2	Das einfachste supersymmetrische Modell	196
6.3	Erzeuger und Vernichter	197
6.4	SUSY-Operatoren	200

1 Dirac-Gleichung

1.1 Einführung in die Klein-Gordon-Gleichung

Der nichtrelativistische Energiesatz

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

übertragen auf die Operatorform

$$\hat{E} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

mit den Operatoren

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.3)$$

und

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \quad (1.4)$$

führt auf die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad , \quad (1.5)$$

indem man die Operatoren (1.2) auf die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ anwendet. Zu betonen bleibt, daß m die Ruhemasse des betrachteten Teilchens bezeichnet. Die Schrödinger-Gleichung (1.3) ist in der Ortsdarstellung angegeben.

Um zu einer relativistische Wellengleichung zu gelangen, ist es naheliegend, vom relativistischen Energie-Impuls-Erhaltungssatz auszugehen. Es gilt

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = m^2 c^2 \quad (1.6)$$

mit dem kontravarianten Vierervektor

$$p^\mu = \left\{ \frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right\} \quad (1.7)$$

und den kovarianten Vierervektor

$$p_\mu = g_{\mu\nu} p^\nu = \left\{ \frac{E}{c}, -p_x, -p_y, -p_z \right\}. \quad (1.8)$$

Hierbei haben wir für den Fundamentaltensor $g_{\mu\nu}$ die folgende Signatur gewählt

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Ebenso ist

$$x^\mu = \{ct, x, y, z\} = \{ct, \mathbf{r}\} \quad (1.10)$$

und

$$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = \{ct, -x, -y, -z\} = \{ct, -\mathbf{r}\} \quad (1.11)$$

Ferner haben wir von der Einsteinschen Summenkonvention gebrauch gemacht: Über doppelt vorkommende Indizes, wobei einer kontravariant und der andere kovariant ist, wird automatisch summiert.

Wir übertragen den relativistischen Energiesatz der klassischen Mechanik mit Hilfe des Korrespondenzprinzips auf die Operatorebene. Mit dem kontravarianten Operator

$$\hat{p}^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial(ct)}, -\nabla \right\} \quad (1.12)$$

und dem kovarianten Operator

$$\hat{p}_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} = i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial(ct)}, \nabla \right\} \quad (1.13)$$

folgt für das Viererskalarprodukt

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} = -\hbar^2 \square = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right\}. \quad (1.14)$$

Wir lassen (1.14) auf die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ wirken und erhalten als relativistische Wellengleichung die Klein-Gordon Gleichung

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu \Psi(\mathbf{r}, t) = m^2 c^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.15)$$

Die Klein-Gordon-Gleichung wurde im Jahre 1926 von Klein, Gordon, Schrödinger und anderen als relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung vorgeschlagen, die im selben Jahr erstmals als quantenmechanische Grundgleichung vorgestellt wurde.

Explizit ausgeschrieben lautet (1.15)

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.16)$$

Ein augenfälliger Unterschied der Klein-Gordon-Gleichung zur Schrödinger-Gleichung ist die Tatsache, daß sie auch bezüglich der Zeitkoordinate eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist. Entsprechend des Kovarianzprinzips werden Zeit- und Raumkoordinaten gleichberechtigt behandelt. Auffällig ist ferner auch das Auftreten des Quadrats der Ruheenergie m^2c^4 . Man sieht der Klein-Gordon Gleichung direkt an, daß sie Lorentz-kovariant ist, da $\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu$ eine Lorentz-Invariante ist.

Freie Lösungen haben abgesehen von einem trivialen Normierungsfaktor die Form

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}^\mu x_\mu} = e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}. \quad (1.17)$$

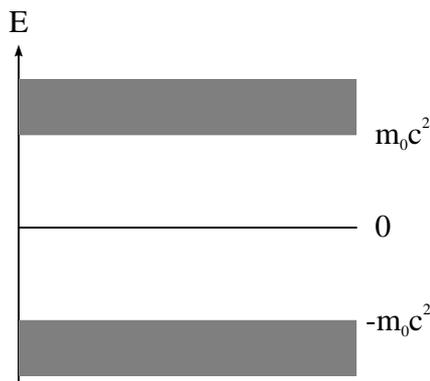
Die Anwendung des Klein-Gordon Operators (1.14) auf die ebenen Wellen als Lösung führt wieder auf den relativistischen Energiesatz

$$\frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = m^2 c^2 \quad (1.18)$$

und somit auf

$$E = \pm c \sqrt{m^2 c^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (1.19)$$

Es treten daher formal Lösungen sowohl zu positiven wie auch zu negativen Energien auf.



Lösungsspektrum der freien Klein-Gordon Gleichung.

Wir wollen nun ein äußeres elektromagnetische Feld ankopeln. Damit tritt das Teilchen in Wechselwirkung mit der Umgebung. Im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik geschah diese Ankopplung durch die minimale Substitution

$$\hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA_0 \quad (1.20)$$

und

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (1.21)$$

Diese Art der Ankopplung repräsentiert ein eichinvariantes Konzept. Eine Eichtransformation der elektromagnetischen Potentiale ändert zwar die formale Struktur der Wellengleichung, führt aber in der Lösung nur zu einer unbeobachteten Phasentransformation der Wellenfunktion und kann durch diese kompensiert werden. In Observablen machen sich diese Eichtransformationen nicht bemerkbar. In vierdimensionaler Notation machen wir nun die minimale Substitution

$$\hat{p}^\mu \rightarrow \hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \quad (1.22)$$

mit dem kontravarianten elektromagnetischen Vierervektor

$$A^\mu = \{A_0, \mathbf{A}\} \quad . \quad (1.23)$$

Damit resultiert für die Klein-Gordon Gleichung unter Einbeziehung des elektromagnetischen Feldes

$$\left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu\right) \left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu\right) \Psi(\mathbf{r}, t) = m^2 c^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.24)$$

oder

$$\left[g^{\mu\nu} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\nu} - \frac{e}{c} A_\nu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{e}{c} A_\mu \right) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = m^2 c^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (1.25)$$

Aus der Klein-Gordon-Gleichung konstruieren wir nun eine Kontinuitätsgleichung und untersuchen die Ladungsdichte und den Stromdichtevektor. Dazu multiplizieren wir (1.25) mit Ψ^* und subtrahieren dann den komplex konjugierten Ausdruck. Dies ergibt zunächst

$$\left[g^{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x^\nu} - \frac{e}{c i\hbar} A_\nu \right) \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{e}{c i\hbar} A_\mu \right) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{m^2 c^2}{-\hbar^2} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.26)$$

und ebenso

$$\left[g^{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x^\nu} + \frac{e}{c i\hbar} A_\nu \right) \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{e}{c i\hbar} A_\mu \right) \right] \Psi^*(\mathbf{r}, t) = \frac{m^2 c^2}{-\hbar^2} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (1.27)$$

Somit bekommen wir

$$\begin{aligned} & \Psi^* g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \\ & + \Psi^* g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \left(-\frac{e}{c i\hbar} A_\mu \right) \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \frac{e}{c i\hbar} A_\mu \Psi^*(\mathbf{r}, t) \\ & + \Psi^* g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \left(-\frac{e}{c i\hbar} A_\mu \right) \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) g^{\mu\nu} \frac{e}{c i\hbar} A_\nu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Psi^*(\mathbf{r}, t) = 0 \end{aligned} \quad (1.28)$$

Im etwas kompakteren Form erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 = & g^{\mu\nu} \left[\frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right) \right. \\ & \left. - 2 \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \frac{e}{i\hbar c} A_\nu \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right) \right] \end{aligned} \quad (1.29)$$

Multipliziert mit $\frac{i\hbar e}{2m}$ führt dies auf

$$0 = g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{i\hbar e}{2m} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right) + g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \left(-\frac{e^2}{mc} A_\nu \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right) . \quad (1.30)$$

Damit definieren wir

$$j_\nu = \frac{i\hbar e}{2m} \left(\Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \right) - \frac{e^2}{mc} A_\nu \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) . \quad (1.31)$$

Wir bezeichnen die Größe

$$j_\nu = \{c\rho, \mathbf{j}\} . \quad (1.32)$$

als den Viererstrom der Klein-Gordon-Theorie. Dies führt auf die Kontinuitätsgleichung

$$g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} j_\nu = 0 \quad (1.33)$$

oder

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu = 0 . \quad (1.34)$$

Mit der abkürzenden Bezeichnung

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (1.35)$$

können wir dies auch schreiben als

$$\partial_\mu j^\mu = 0 . \quad (1.36)$$

Für die Ladungsdichte bekommen wir

$$\rho = \frac{i\hbar e}{2mc^2} \left(\Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right) - \frac{e^2}{mc^2} A_0 \Psi \Psi^* . \quad (1.37)$$

Für Zentralfelder $eA_0(r)$ und für stationäre Zustände der Form

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon t} \quad (1.38)$$

mit der Energiegröße ϵ reduziert sich (1.37) auf

$$\rho(\mathbf{r}) = e \frac{\epsilon - eA_0(r)}{mc^2} \Phi(\mathbf{r}) \Phi^*(\mathbf{r}) . \quad (1.39)$$

Aus (1.39) wird ersichtlich, daß die Ladungsdichte *kein* einheitliches Vorzeichen aufweist. Ferner betonen wir erneut, daß die Klein-Gordon Gleichung ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist. Zur Lösung dieser Differentialgleichung muß auch bezüglich der Zeitvariablen zweimal integriert werden, und es treten zwei Integrationskonstanten auf. Diese werden fixiert durch die zu einem beliebigen Zeitpunkt t frei wählbaren Anfangsbedingungen für $\Psi(\mathbf{r}, t)$ wie auch unabhängig davon für $\partial\Psi(\mathbf{r}, t)/\partial t$. Damit ist auch der Ausdruck (1.37) für die Ladungsdichte ρ keineswegs positiv definiert. Der Ausdruck für ρ hat dadurch auch keine Wahrscheinlichkeitsinterpretation.

Dieses Manko hat ursprünglich dazu geführt, daß die Klein-Gordon-Gleichung als relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung verworfen wurde. Es zeigte sich jedoch empirisch, daß die Klein-Gordon-Gleichung die relevante Wellengleichung zur relativistischen Beschreibung von Spin-0-Teilchen ist, zum Beispiel von Pionen. Es muß jedoch gleichfalls betont werden, daß es in der Natur keine fundamentalen Elementarteilchen gibt, die durch die Klein-Gordon-Gleichung beschrieben werden.

1.2 Einführung in die Dirac-Theorie

Dirac stellte im Jahre 1928 eine relativistisch kovariante Wellengleichung in Schrödinger-Form auf

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \quad . \quad (1.40)$$

H bezeichnet hierbei den relativistischen Hamilton-Operator. Grundprinzip bei der Aufstellung der Wellengleichung (1.40) war, daß diese eine Differentialgleichung linear in der Zeitableitung sein soll. Die zweite Ableitung in der Zeit in der Klein-Gordon-Theorie führte zu Schwierigkeiten bezüglich der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Dichte ρ . Dem Kovarianzprinzip folgend sollen Raum- und Zeitkoordinaten gleichberechtigt sein. Daher sollte auch im Hamilton-Operator H die Ableitung in den Raumkoordinaten linear auftreten. Wir machen daher den linearen Ansatz

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-i\hbar c \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) + \beta mc^2 \right] \Psi = H \Psi \quad . \quad (1.41)$$

Die bisher unbekanntenen Koeffizienten α_i und β müssen noch fixiert werden. Die Größen können keine einfachen c -Zahlen sein. Als Ansatz für diese Koeffizienten nehmen wir eine Matrixstruktur an. Damit haben wir für die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ von der Schreibweise her die formale Struktur eines Spaltenvektors mit N Komponenten $\Psi_\sigma(\mathbf{r}, t)$, die wir mit dem Index σ durchzählen. Wir schreiben explizit

$$i\hbar \frac{\partial\Psi_\sigma}{\partial t} = -i\hbar c \sum_{\tau=1}^N \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right)_{\sigma\tau} \Psi_\tau + mc^2 \sum_{\tau=1}^N \beta_{\sigma\tau} \Psi_\tau$$

$$= \sum_{\tau=1}^N (H)_{\sigma\tau} \Psi_{\tau} . \quad (1.42)$$

Die natürliche Zahl N bleibt zunächst unbestimmt. Eine positiv definite Dichte läßt sich sofort angeben.

$$\rho(\mathbf{r}) = \Psi^+(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \dots, \Psi_N^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N \Psi_i^*(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}) . \quad (1.43)$$

Wir werden diese Dichte noch ableiten. $\Psi^+(\mathbf{r})$ bezeichnet also den komplex konjugierten und transponierten Ausdruck von $\Psi(\mathbf{r})$. Als essentielle Forderung gilt, daß für ein freies Teilchen wieder die relativistische Energie-Impuls Beziehung gelten soll, d.h.

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 . \quad (1.44)$$

Ferner soll die Kontinuitätsgleichung für den Viererstrom gelten. Außerdem muß die Bewegungsgleichung der Forderung der Lorentz-Kovarianz genügen. Die Forderung (1.44) wird erfüllt, wenn jede einzelne Komponente der mehrkomponentigen Größe Ψ der Klein-Gordon Gleichung genügt.

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = (-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) . \quad (1.45)$$

Wir wenden den Dirac-Operator (1.42) ein zweites Mal auf diese Gleichung an und erhalten

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} &= -\hbar^2 c^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^i \partial x^j} \\ &\quad - i \hbar m c^3 \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial \Psi}{\partial x^i} + \beta^2 m^2 c^4 \Psi . \end{aligned} \quad (1.46)$$

Ein Vergleich mit der Klein-Gordon Gleichung führt sofort auf die Algebra der Matrizen α_i und β

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i &= 2 \delta_{ij} , \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i &= 0 , \\ \beta^2 &= 1 . \end{aligned} \quad (1.47)$$

Damit der Hamilton-Operator H hermitesch ist und somit reelle Eigenwerte hat, müssen auch die Matrizen α_i, β hermitesch sein

$$\alpha_i^{\dagger} = \alpha_i , \quad (1.48)$$

$$\beta^+ = \beta \quad . \quad (1.49)$$

Aufgrund der Antikommutationsrelationen (1.47) können die Eigenwerte dieser Matrizen nur ± 1 sein. Mit Hilfe der Antikommutatorrelation (1.47) können wir auch zeigen, daß die Spur der α_i verschwindet. Wir verwenden dabei, daß für zwei Matrizen \hat{A} und \hat{B} gilt $\text{Sp } \hat{A} \hat{B} = \text{Sp } \hat{B} \hat{A}$. Es folgt

$$\text{Sp } \alpha_i = \text{Sp } \beta^2 \alpha_i = \text{Sp } \beta \alpha_i \beta = -\text{Sp } \alpha_i \beta^2 = -\text{Sp } \alpha_i = 0 \quad . \quad (1.50)$$

Die Algebra (1.47) der Koeffizienten α_i und β kann mit einfachen Zahlen aus \mathbb{R} oder \mathbb{C} nicht erfüllt werden. Als Ansatz wählen wir zunächst quadratische $(N \times N)$ -Matrizen. Damit nimmt auch Ψ formal die Struktur eines Spaltenvektors mit N -Komponenten an. Die Algebra der α_i entspricht formal der der (2×2) Paulischen Spinmatrizen σ_i . Eine direkte Identifikation der α_i mit den σ_i ist jedoch nicht möglich, da die Matrix β nicht mit in die Algebra eingebunden werden kann. Die Paulischen Spinmatrizen σ_i zusammen mit der (2×2) -Einheitsmatrix bilden eine vollständige Basis aller (2×2) -Matrizen. Damit kann aber nicht die zweite Relation der Algebra (1.47) befriedigt werden. Die Eigenwerte der Matrizen α_i und β sind ± 1 . Damit aber die Spurfreiheit der α_i gesichert ist, müssen gleichviel positive wie negative Eigenwerte auftreten. Dies impliziert, daß die Dimension der α_i und β geradzahlig sein muß. Die minimale Dimension, um die Algebra der Dirac-Gleichung sowie deren Spurfreiheit zu erfüllen, ist damit $N = 4$.

Eine mögliche Realisierung der Algebra (1.47) ist gegeben durch die (4×4) -Matrizen

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad . \quad (1.52)$$

Hierbei bezeichnen die σ_i die drei Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad . \quad (1.53)$$

$\mathbf{1}$ ist die (2×2) -Einheitsmatrix. Die Pauli-Matrizen erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij} \quad . \quad (1.54)$$

Damit lautet die freie Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -i\hbar c \sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} \Psi(\mathbf{r}, t) + \beta mc^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.55)$$

oder

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.56)$$

Hierbei haben wir die α -Matrizen formal zu einem Vektor zusammengefaßt,

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \quad . \quad (1.57)$$

Als nächstes wollen wir die zugehörige Kontinuitätsgleichung und die Viererstromdichte der Dirac-Theorie konstruieren. Hierzu multiplizieren wir die Dirac-Gleichung (1.56) von links mit $\Psi^+ = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*)$ und die hermitesch konjugierte Form der Dirac-Gleichung (1.56) von rechts mit Ψ . Die Subtraktion beider Ausdrücke liefert

$$i\hbar \frac{\partial(\Psi^+ \Psi)}{\partial t} = -i\hbar c \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} (\Psi^+ \alpha_k \Psi) \quad . \quad (1.58)$$

Dies hat die Form der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0 \quad (1.59)$$

mit der positiv definiten Dichte

$$\rho = \Psi^+ \Psi = \sum_{i=1}^4 \Psi_i^* \Psi_i \quad (1.60)$$

und der Stromdichte

$$\mathbf{j} = c \Psi^+ \boldsymbol{\alpha} \Psi \quad . \quad (1.61)$$

Wir wollen nun die Dirac-Gleichung in kompakter vierdimensionaler Notation darstellen. Wir multiplizieren dazu die Dirac-Gleichung von links mit β/c

$$\left(\beta i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)} + \sum_{k=1}^3 \beta \alpha_k i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k} - mc \right) \Psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad . \quad (1.62)$$

Mit den neudefinierten Matrizen

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \beta \quad , \\ \gamma^i &= \beta \alpha_i \end{aligned} \quad (1.63)$$

können wir formal schreiben

$$i\hbar \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \Psi - mc \Psi = 0 \quad . \quad (1.64)$$

Unter Ausnutzung der Summenkonvention läßt sich dies auch ausdrücken als

$$\left(i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \Psi = 0 \quad , \quad (1.65)$$

und mit

$$p_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (1.66)$$

erhalten wir

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc) \Psi = 0 \quad . \quad (1.67)$$

Wir können die Algebra (1.47) der Dirac-Matrizen α_i und β umschreiben in die Antikommutatorrelation

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2 g^{\mu\nu} \quad . \quad (1.68)$$

Aus (1.63) und der Vertauschungsrelation (1.68) erkennen wir, daß die γ^i mit $i = 1, 2, 3$ antihermitesch und unitär sind

$$\gamma^{i+} = -\gamma^i \quad , \quad (1.69)$$

$$(\gamma^i)^{-1} = \gamma^{i+} \quad . \quad (1.70)$$

γ^0 hingegen ist hermitesch und unitär

$$\gamma^{0+} = \gamma^0 \quad , \quad (1.71)$$

$$(\gamma^0)^{-1} = \gamma^{0+} \quad . \quad (1.72)$$

Eine der möglichen expliziten Darstellungen lautet

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad (1.73)$$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad . \quad (1.74)$$

$\mathbf{1}$ kennzeichnet erneut die (2×2) -Einheitsmatrix. Um die Schreibweise noch weiter zu vereinfachen, führen wir neue Notationen ein. Es sei

$$\not{A} \equiv \gamma^\mu A_\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\mu A^\nu = \gamma^0 A^0 - \sum_{i=1}^3 \gamma^i A^i = \gamma^0 A^0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{A} \quad . \quad (1.75)$$

Den Schrägstrich / bezeichnet man als Feynman-Dolch. Gleichermäßen gilt

$$\not{\nabla} \equiv \gamma^\mu \partial_\mu = \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \gamma^0 \frac{\partial}{\partial(ct)} + \sum_{i=1}^3 \gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} = \gamma^0 \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \quad . \quad (1.76)$$

Damit kann die Dirac-Gleichung geschrieben werden als

$$(i\hbar \not{\nabla} - mc)\Psi = 0 \quad . \quad (1.77)$$

Mit $p_\mu = i\hbar \partial/\partial x^\mu$ folgt weiter

$$(\not{p} - mc)\Psi = 0 \quad . \quad (1.78)$$

Mit dem Dirac-Operator

$$D := \not{p} - mc \quad (1.79)$$

erhalten wir in kompakter Schreibweise

$$D\Psi = 0 \quad . \quad (1.80)$$

Führt man die elektromagnetischen Potentiale durch minimale und somit eichinvariante Kopplung ein, so ergibt sich

$$\left(\not{p} - \frac{e}{c}\not{A} - mc\right)\Psi = 0 \quad . \quad (1.81)$$

1.3 Freie Bewegung eines Dirac-Teilchens

Wir notieren die freie Dirac-Gleichung in der Form

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2\beta)\Psi \quad . \quad (1.82)$$

Die stationären Zustände folgen aus dem Ansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\epsilon t\right\} \quad (1.83)$$

für die Zeitentwicklung der Wellenfunktion. Dies führt auf die stationäre Dirac-Gleichung

$$\epsilon\Phi(\mathbf{r}) = H\Phi(\mathbf{r}) \quad . \quad (1.84)$$

Für die späteren Anwendungen erweist es sich als vorteilhaft, die vierkomponentige Größe

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (1.85)$$

mit

$$\phi := \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} \quad (1.86)$$

und

$$\chi := \begin{pmatrix} \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{pmatrix} \quad (1.87)$$

in zwei zweikomponentige Größen, dies sind die Spinoren ϕ und χ , aufzuteilen. Wir verwenden die explizite Darstellung der α - und β - Matrizen. Damit lautet die stationäre Dirac-Gleichung

$$\epsilon \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (1.88)$$

oder komponentenweise ausgeschrieben

$$\epsilon\phi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi + mc^2\phi, \quad (1.89)$$

$$\epsilon\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\phi - mc^2\chi. \quad (1.90)$$

Die freie Bewegung ist gekennzeichnet durch Zustände mit scharfem Impuls \mathbf{p} . Wir setzen daher an

$$\begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right\}. \quad (1.91)$$

Einsetzen in (1.89) und (1.90) liefert

$$(\epsilon - mc^2)\phi_0 - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi_0 = 0, \quad (1.92)$$

$$-c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\phi_0 + (\epsilon + mc^2)\chi_0 = 0. \quad (1.93)$$

Hierbei wurde der Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ aufgrund des Ansatzes (1.91) durch seinen Eigenwert \mathbf{p} ersetzt. Das lineare Gleichungssystem für ϕ_0 und χ_0 hat nur dann eine nichttriviale Lösung, wenn die Koeffizientendeterminante verschwindet. Dies impliziert

$$\begin{vmatrix} \epsilon - mc^2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & \epsilon + mc^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (1.94)$$

oder

$$\epsilon^2 - m^2c^4 - c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = 0. \quad (1.95)$$

Alle Größen, die hier auftreten, müssen noch als mit der 2x2-Einheitsmatrix multipliziert betrachtet werden. Wir verwenden jetzt die Relation

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}). \quad (1.96)$$

Die Paulischen Spinmatrizen sind

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.97)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.98)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.99)$$

Es gelten die Vertauschungsrelationen

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z, \quad (1.100)$$

$$\sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \quad (1.101)$$

$$\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y, \quad (1.102)$$

sowie

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1}. \quad (1.103)$$

Diese Gleichungen lassen sich kompakt schreiben als

$$\sigma_j \sigma_k = \sum_{l=1}^3 i \epsilon_{jkl} \sigma_l + \delta_{jk}. \quad (1.104)$$

Hier ist ϵ_{jkl} ein antisymmetrische Tensor dritter Stufe. Damit folgt

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) &= \sum_{j,k=1}^3 \sigma_j A_j \sigma_k B_k = \sum_{j,k=1}^3 (\delta_{jk} + \sum_{l=1}^3 i \epsilon_{jkl} \sigma_l) A_j B_k \\ &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \sum_{l=1}^3 \sigma_l \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{jkl} A_j B_k = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}). \end{aligned} \quad (1.105)$$

Gleichung (1.95) führt damit auf

$$\epsilon^2 = m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2 \quad (1.106)$$

oder

$$\epsilon = \pm E_p \quad (1.107)$$

mit

$$E_p := c \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}. \quad (1.108)$$

Es gibt somit Lösungen zu positiven wie auch zu negativen Energien. Für ein gegebenes ϵ erhalten wir aus (1.93)

$$\chi_0 = \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{mc^2 + \epsilon} \phi_0. \quad (1.109)$$

Für ϕ_0 nehmen wir jetzt als Ansatz den Zweier–Spinor

$$\phi_0 = U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} \quad (1.110)$$

mit der Norm

$$U^\dagger U = U_1^* U_1 + U_2^* U_2 = 1, \quad (1.111)$$

wobei U_1 und U_2 c -Zahlen sind. Somit erhalten wir die Lösungen zu positiven und negativen Energien der freien Dirac–Gleichung

$$\Psi_{\mathbf{p},\lambda}(\mathbf{r}, t) = N \begin{pmatrix} U \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{mc^2 + \lambda E_p} U \end{pmatrix} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda E_p t)}}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}. \quad (1.112)$$

$\lambda = \pm 1$ charakterisiert die Lösungen zu positiver bzw. negativer Energie mit dem Zeitentwicklungsfaktor $\varepsilon = \lambda E_p$. Der Faktor $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ kennzeichnet den Normierungsfaktor einer ebenen Welle in einer Dimension. Der Normierungsfaktor N bestimmt sich aus der Forderung

$$\int \Psi_{\mathbf{p},\lambda}^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}',\lambda'}(\mathbf{r}, t) d^3r = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (1.113)$$

Einsetzen ergibt

$$N^2 \cdot \left(U^\dagger U + U^\dagger \frac{c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{(mc^2 + \lambda E_p)^2} U \right) = 1 \quad (1.114)$$

und weiter

$$N^2 \left(1 + \frac{c^2 \mathbf{p}^2}{(mc^2 + \lambda E_p)^2} \right) = 1. \quad (1.115)$$

Wir bekommen also

$$\begin{aligned} N &= \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)^2}{(mc^2 + \lambda E_p)^2 + c^2 \mathbf{p}^2}} = \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)^2}{(m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2) + 2mc^2 \lambda E_p + E_p^2}} \\ &= \sqrt{\frac{(mc^2 + \lambda E_p)^2}{2(mc^2 + \lambda E_p)\lambda E_p}} = \sqrt{\frac{mc^2 + \lambda E_p}{2\lambda E_p}}. \end{aligned} \quad (1.116)$$

Die Lösungen (1.112) sind Eigenzustände des Impulsoperators

$$\hat{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p},\lambda}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{p},\lambda}(\mathbf{r}, t). \quad (1.117)$$

Zu jedem Impuls \mathbf{p} gehören zwei Arten von Zuständen, nämlich solche mit $\lambda = +1$ ($\varepsilon = +E_p$) und solche mit $\lambda = -1$ ($\varepsilon = -E_p$). Es gibt jedoch eine weitere Quantenzahl, die Helizität,

die zur weiteren Klassifikation der freien Einteilchenzustände herangezogen werden kann. Der Operator

$$\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \quad (1.118)$$

vertauscht mit dem Hamilton–Operator der freien Dirac–Gleichung. Der Operator

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (1.119)$$

kann als Verallgemeinerung des Spin–Operators in der nichtrelativistischen Quantenmechanik betrachtet werden. Wir berechnen nun den angesprochenen Kommutator

$$[H, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = c[\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] . \quad (1.120)$$

Weiter folgt durch explizites Einsetzen der gewählten Darstellung

$$\begin{aligned} & (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) - (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})^2 \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})^2 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})^2 \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})^2 & 0 \end{pmatrix} = 0 . \end{aligned} \quad (1.121)$$

Zusammengefaßt ergibt sich also

$$[H, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = 0 \quad (1.122)$$

und ebenso

$$[\hat{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = 0 . \quad (1.123)$$

Daraus resultiert, daß $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}$ gleichzeitig mit H und $\hat{\boldsymbol{p}}$ diagonalisiert werden kann. Dasselbe trifft auf den Helizitätsoperator

$$\Lambda_S = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\Sigma} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{|\boldsymbol{p}|} = \boldsymbol{S} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{|\boldsymbol{p}|} \quad (1.124)$$

zu. Die Helizität stellt die Projektion des Spins auf die Impulsachse dar.

Bewegt sich die ebene Welle in z –Richtung, dann ist

$$\boldsymbol{p} = (0, 0, p) \quad (1.125)$$

und

$$\Lambda_S = S_z = \frac{\hbar}{2} \Sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.126)$$

mit den Eigenwerten $\pm \hbar/2$. Die Eigenvektoren von Λ_S sind durch

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} U_{-1} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ U_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ U_{-1} \end{pmatrix} \quad (1.127)$$

mit

$$U_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.128)$$

und

$$U_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.129)$$

gegeben. Jetzt können wir die vollständige Klassifikation der ebenen Dirac–Wellen, die sich in z –Richtung bewegen, vornehmen. Wir bezeichnen sie mit $\Psi_{p_z, \lambda, s_z}(\mathbf{r}, t)$ und notieren

$$\begin{aligned} \Psi_{p, \lambda, +\frac{1}{2}}(\mathbf{r}, t) &= \frac{N}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\sigma_z p}{mc^2 + \lambda E_p} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz - \lambda E_p t)}, \\ \Psi_{p, \lambda, -\frac{1}{2}}(\mathbf{r}, t) &= \frac{N}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c\sigma_z p}{mc^2 + \lambda E_p} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}(pz - \lambda E_p t)}. \end{aligned} \quad (1.130)$$

Die Lösungen erfüllen die Orthonormalitätsrelation

$$\int \Psi_{p_z, \lambda, s_z}^\dagger \Psi_{p'_z, \lambda', s'_z} d^3r = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{s_z s'_z} \delta(p_z - p'_z). \quad (1.131)$$

Für viele Betrachtungen ist es weiterhin zweckmäßig, noch den Vorzeichenoperator Λ einzuführen

$$\Lambda = \frac{H}{\sqrt{H^2}} = \frac{c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2}{c\sqrt{\hat{\mathbf{p}}^2 + m^2 c^2}}. \quad (1.132)$$

Λ kommutiert natürlich mit dem Hamilton–Operator der freien Dirac–Gleichung. Λ ist hermitesch und unitär,

$$\Lambda = \Lambda^\dagger = \Lambda^{-1}. \quad (1.133)$$

In der Impulsdarstellung nimmt Λ eine besonders einfache Gestalt an,

$$\Lambda = \frac{c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + \beta mc^2}{E_p} . \quad (1.134)$$

Für diesen Vorzeichenoperator gilt

$$\Lambda \Psi_{p,\lambda,s_z} = \frac{\varepsilon}{E_p} \Psi_{p,\lambda,s_z} = \frac{\lambda E_p}{E_p} \Psi_{p,\lambda,s_z} = \lambda \Psi_{p,\lambda,s_z} . \quad (1.135)$$

Λ hat als Eigenwert offensichtlich das Vorzeichen $\lambda = \pm 1$ des Zeitentwicklungsfaktors.

Wir werten nun generell das Produkt $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ aus. Es folgt unter Verwendung der expliziten Darstellung

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 & p_x \\ p_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ip_y \\ ip_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_z & 0 \\ 0 & -p_z \end{pmatrix} . \quad (1.136)$$

Mit der Definition

$$p_{\pm} = p_x \pm ip_y \quad (1.137)$$

folgt

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_z & p_- \\ p_+ & -p_z \end{pmatrix} . \quad (1.138)$$

Wir führen jetzt einen Nomenklaturwechsel durch, um eine Anpassung an Bezeichnungen in der Literatur zu erreichen. In vierdimensionaler Form schreiben wir jetzt

$$\Psi(x) = e^{-ipx/\hbar} u(\mathbf{p}) , \quad (1.139)$$

wobei der vierkomponentige Spaltenvektor $u(\mathbf{p})$ die Gleichung

$$(\not{p} - mc) u(\mathbf{p}) = 0 \quad (1.140)$$

befriedigt. Es sei nun $u_+(\mathbf{p})$ eine Lösung für $E(\mathbf{p}) = +c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}$, dann befriedigt $u_+(\mathbf{p})$ die Gleichung

$$(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) u_+(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p}) u_+(\mathbf{p}) . \quad (1.141)$$

In dieser Nomenklatur lauten die Lösungen für die Spinoren für positive Energie und für den Impuls \mathbf{p}

$$\begin{aligned} u_+^{(1)}(\mathbf{p}) &= \sqrt{\frac{E(\mathbf{p}) + mc^2}{2E(\mathbf{p})}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E(\mathbf{p}) + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} , \\ u_+^{(2)}(\mathbf{p}) &= \sqrt{\frac{E(\mathbf{p}) + mc^2}{2E(\mathbf{p})}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E(\mathbf{p}) + mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (1.142)$$

Die Normierungskonstante wurde so bestimmt, daß gilt

$$u^\dagger u = 1. \quad (1.143)$$

Ferner stellen wir die Orthogonalitätsrelation fest

$$u_+^{(r)\dagger}(\mathbf{p}) u_+^{(s)}(\mathbf{p}) = \delta_{rs} \quad \text{für } r, s = 1, 2. \quad (1.144)$$

Oftmals ist es vorteilhaft, eine andere Normierung zu wählen, nämlich

$$u_+^\dagger(\mathbf{p}) u_+(\mathbf{p}) = \frac{E(\mathbf{p})}{mc^2}, \quad (1.145)$$

da diese Normierung invariant bei Lorentz-Transformationen ist. Diese Konvention macht eine Normierung ausgedrückt durch den adjungierten Spinor $\bar{u}(\mathbf{p})$ sehr einfach. Wir schreiben (1.141) mit $p_0 = \pm E(\mathbf{p})/c$

$$\begin{aligned} p_0 u &= (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc) u, \\ p_0 u^\dagger &= u^\dagger (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc). \end{aligned} \quad (1.146)$$

Wir multiplizieren die erste Gleichung von links mit $u^\dagger \beta$ und die zweite von rechts mit βu . Nach Addition bekommen wir

$$2p_0 u^\dagger \beta u = 2mc u^\dagger u, \quad (1.147)$$

da β und $\boldsymbol{\alpha}$ antikommutieren. Mit der Normierungsübereinkunft (1.145) $u^\dagger u = |p_0|/mc$ und mit der Definition

$$\bar{u} = u^\dagger \beta \quad (1.148)$$

erhalten wir

$$\bar{u} u = \frac{p_0}{|p_0|} = \lambda. \quad (1.149)$$

$\bar{u} u$ ist also plus oder minus Eins je nach Vorzeichen der Energie. Multiplizieren wir (1.146) von rechts mit β , so bewirkt dies

$$\bar{u}(\mathbf{p})(\not{\boldsymbol{p}} - mc) = 0. \quad (1.150)$$

Wir multiplizieren nun (1.140) mit $\bar{u} \gamma^\mu$ von links sowie (1.150) mit $\gamma^\mu u$ von rechts. Die Addition liefert

$$\begin{aligned} 2mc \bar{u}(\mathbf{p}) \gamma^\mu u(\mathbf{p}) &= \bar{u}(\mathbf{p})(\not{\boldsymbol{p}} \gamma^\mu + \gamma^\mu \not{\boldsymbol{p}}) u(\mathbf{p}) = p_\nu \bar{u}(\mathbf{p})(\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) u(\mathbf{p}) \\ &= p_\nu \bar{u}(\mathbf{p}) 2g^{\mu\nu} u(\mathbf{p}) = 2p^\mu \bar{u}(\mathbf{p}) u(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (1.151)$$

und weiter

$$\bar{u}(\mathbf{p})\gamma^\mu u(\mathbf{p}) = \lambda \frac{p^\mu}{mc}. \quad (1.152)$$

Hierbei haben wir von der Normierung (1.149) Gebrauch gemacht.

Wir wollen nun die Orthogonalitätsrelationen studieren. Zu diesem Zweck bezeichnen wir mit $u_+^r(\mathbf{p})$, $r = 1, 2$, die beiden Lösungen mit positiver Energie, die dem Impuls \mathbf{p} entsprechen, und mit den Helizitäten $+1$ oder -1 . Diese beiden Lösungen sind orthogonal, denn sie entsprechen verschiedenen Eigenwerten des Helizitätsoperators

$$\bar{u}_+^r(\mathbf{p})u_+^s(\mathbf{p}) = \delta_{rs} \quad \text{mit} \quad r, s = 1, 2. \quad (1.153)$$

Ebenso sind die Lösungen $u_-(-\mathbf{p})$ zum Impuls $-\mathbf{p}$ und zu negativer Energie orthogonal zu $\bar{u}_+^r(\mathbf{p})$. Hier gelten die Gleichungen

$$(\not{\mathbf{p}} + mc) u_-(-\mathbf{p}) = 0, \quad (1.154)$$

$$\bar{u}_+^r(\mathbf{p}) (\not{\mathbf{p}} + mc) = 0. \quad (1.155)$$

Jetzt multiplizieren wir die Gleichung

$$(\not{\mathbf{p}} - mc) u_+(\mathbf{p}) = 0 \quad (1.156)$$

mit $\bar{u}_+^r(-\mathbf{p})$ von links. Dies ergibt

$$\bar{u}_+^r(-\mathbf{p}) \not{\mathbf{p}} u_+(\mathbf{p}) = mc \bar{u}_+^r(-\mathbf{p}) u_+(\mathbf{p}). \quad (1.157)$$

Weiter multiplizieren wir (1.155) von rechts mit $u_+(\mathbf{p})$, wir erhalten

$$\bar{u}_+^r(-\mathbf{p}) \not{\mathbf{p}} u_+(\mathbf{p}) = -mc \bar{u}_+^r(-\mathbf{p}) u_+(\mathbf{p}). \quad (1.158)$$

Somit folgt die Orthogonalität

$$\bar{u}_+^r(-\mathbf{p}) u_+(\mathbf{p}) = 0. \quad (1.159)$$

Als weitere neue Nomenklatur schreiben wir für die Zustände negativer Energie

$$u_-^s(-\mathbf{p}) \equiv v^s(\mathbf{p}). \quad (1.160)$$

Die Orthogonalität lautet nun

$$\bar{v}^r(\mathbf{p}) v^s(\mathbf{p}) = -\delta_{rs}. \quad (1.161)$$

Zusammengefaßt gilt

$$\bar{u}_+^r(\mathbf{p}) u_+^s(\mathbf{p}) = -\bar{v}^r(\mathbf{p}) v^s(\mathbf{p}) = \delta_{rs}, \quad (1.162)$$

$$\bar{v}^r(\mathbf{p}) u_+^s(\mathbf{p}) = \bar{u}_+^r(\mathbf{p}) v^s(\mathbf{p}) = 0. \quad (1.163)$$

Aufgrund der Orthogonalitäts- und Normierungsrelationen befriedigen die Lösungen die Gleichung

$$\sum_{r=1}^2 \left\{ u_{+\alpha}^r(\mathbf{p}) \bar{u}_{+\beta}^r(\mathbf{p}) - v_{\alpha}^r(\mathbf{p}) \bar{v}_{\beta}^r(\mathbf{p}) \right\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.164)$$

mit $\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$. Diese Gleichung entspricht dem äußeren Produkt von u und \bar{u} (man beachte die Stellung von u und \bar{u}), welches eine 4×4 -Matrix ergibt. Die Normierungsbedingungen (1.162) und (1.163) implizieren ferner

$$\sum_{r=1}^2 \left\{ \bar{u}_{+\alpha}^r(\mathbf{p}) u_{+\beta}^r(\mathbf{p}) - \bar{v}_{\alpha}^r(\mathbf{p}) v_{\beta}^r(\mathbf{p}) \right\} = 4. \quad (1.165)$$

Schließlich führen wir eine weitere Notation ein durch

$$w^r(\mathbf{p}) = u_{+}^r(\mathbf{p}), \quad r = 1, 2 \quad (1.166)$$

$$w^{r+2}(\mathbf{p}) = v_{+}^r(\mathbf{p}) = u_{-}^r(-\mathbf{p}), \quad r = 1, 2. \quad (1.167)$$

Hier lautet die Orthogonalitätsrelation

$$\bar{w}^m(\mathbf{p}) w^n(\mathbf{p}) = \epsilon^m \delta_{mn} \quad (1.168)$$

mit $m, n = 1, 2, 3, 4$ (keine Summation). Es ist $\epsilon^m = +1$ für $m = 1, 2$ und $\epsilon^m = -1$ für $m = 3, 4$. Die Dirac-Gleichung ausgedrückt durch die w^r lautet

$$(\not{p} - m_0 c) w^r(\mathbf{p}) = 0 \quad \text{für} \quad r = 1, 2, \quad (1.169)$$

$$(\not{p} + m_0 c) w^r(\mathbf{p}) = 0 \quad \text{für} \quad r = 3, 4. \quad (1.170)$$

1.4 Dirac-Teilchen im Zentralkraftfeld

Wir studieren nun die Lösung der Dirac-Gleichung für ein Zentralkraftfeld

$$eA_0(\mathbf{r}) = V(r) \quad , \quad (1.171)$$

das nur von der radialen Koordinate $V(r)$ abhängt. Damit lautet die Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.172)$$

mit dem Hamilton-Operator

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2 + V(r) \quad . \quad (1.173)$$

Mit dem Separationsansatz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (1.174)$$

gelangen wir zur stationären Dirac-Gleichung

$$H \Phi(\mathbf{r}) = E \Phi(\mathbf{r}) \quad . \quad (1.175)$$

Ziel ist es nun, die Eigenfunktion $\Phi(\mathbf{r})$ des Hamilton-Operators zu ermitteln sowie die Eigenwerte E zu berechnen. Aufgrund des radialsymmetrischen Potentials werden wir Kugelkoordinaten mit $\mathbf{r} = (r, \vartheta, \varphi)$ wählen. Vordringliche Aufgabe wird es daher sein, den radialabhängigen Teil der Dirac-Gleichung zu separieren von den Winkelabhängigkeiten. Zu diesem Zweck formen wir zunächst den Hamilton-Operator um. Mit der Relation für das doppelte Kreuzprodukt

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad (1.176)$$

erhalten wir

$$-\mathbf{e}_r \times (\mathbf{e}_r \times \nabla) = -\mathbf{e}_r(\mathbf{e}_r \cdot \nabla) + \nabla(\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{e}_r) \quad , \quad (1.177)$$

wobei \mathbf{e}_r der Einheitsvektor in \mathbf{r} -Richtung ist. Dabei läßt sich der Nabla-Operator schreiben als

$$\begin{aligned} \nabla &= \mathbf{e}_r(\mathbf{e}_r \cdot \nabla) - \mathbf{e}_r \times (\mathbf{e}_r \times \nabla) \\ &= \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{\hbar} \frac{\mathbf{e}_r}{r} \times \mathbf{L} \end{aligned} \quad (1.178)$$

mit dem Drehimpulsoperator

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla \quad . \quad (1.179)$$

Somit ergibt sich für den Operator die kinetische Energie

$$c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} = -i\hbar c \alpha_r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} c\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{e}_r \times \mathbf{L}) \quad (1.180)$$

mit

$$\alpha_r = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{e}_r \quad . \quad (1.181)$$

Wir definieren jetzt eine (4×4) -Matrix

$$\gamma'_5 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad (1.182)$$

für die gilt

$$(\gamma'_5)^2 = \mathbf{1} \quad . \quad (1.183)$$

Mit dieser Matrix folgt

$$\boldsymbol{\Sigma} = -\gamma'_5 \boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\alpha} \gamma'_5 \quad , \quad (1.184)$$

$$\boldsymbol{\alpha} = -\gamma'_5 \boldsymbol{\Sigma} = -\boldsymbol{\Sigma} \gamma'_5 \quad . \quad (1.185)$$

Damit erhalten wir auch die Relation

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{B} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{B} \quad . \quad (1.186)$$

Wir setzen hier $\mathbf{A} = \mathbf{e}_r$ und $\mathbf{B} = \mathbf{L}$ ein und bekommen

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{e}_r \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{L} + i \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{e}_r \times \mathbf{L} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{e}_r \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} = \Sigma_r (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) \quad , \quad (1.187)$$

da gilt $\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{L} = 0$ mit $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Wir haben also

$$i \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{e}_r \times \mathbf{L} = \Sigma_r (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) \quad . \quad (1.188)$$

Multiplikation mit $-\gamma'_5$ bewirkt

$$i \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{e}_r \times \mathbf{L} = \alpha_r (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) \quad . \quad (1.189)$$

Der Operator (1.180) für die kinetische Energie transformiert sich damit in

$$c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} = -i \hbar c \alpha_r \frac{\partial}{\partial r} + i c \frac{\alpha_r}{r} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}) \quad . \quad (1.190)$$

Wir definieren nun den Operator K , der den Spin- $\boldsymbol{\Sigma}$ und den Bahndrehimpulsoperator \mathbf{L} miteinander verknüpft

$$K = \beta (\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{L} + \hbar) \quad . \quad (1.191)$$

Damit können wir die stationäre Dirac-Gleichung schreiben als

$$H \Phi = \left[i c \gamma'_5 \Sigma_r \left(\hbar \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\beta}{r} K + \frac{\hbar}{r} \right) + V(r) + \beta m c^2 \right] \Phi = E \Phi \quad . \quad (1.192)$$

Bevor wir nun mit diesem Hamilton-Operator weiterrechnen und einen entsprechenden Ansatz für die Wellenfunktion Φ machen, um das Eigenwertproblem (1.192) zu lösen, wollen wir aufzeigen, mit welchen anderen Operatoren der Hamilton-Operator vertauscht. Die Eigenwerte dieser Operatoren bestimmen die Quantenzahlen, nach denen die Eigenzustände klassifiziert werden.

1.5 Spin und Konstanten der Bewegung

Wir wollen nun zeigen, daß der Operator \mathbf{J} des Gesamtdrehimpulses mit dem Hamilton-Operator H für ein Dirac-Teilchen in einem kugelsymmetrischen Potential kommutiert. In Analogie zur Pauli-Theorie für Elektronen mit Spin definieren wir den Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} als die Summe des Bahndrehimpulses \mathbf{L} und des Spindrehimpulses $\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\Sigma}$,

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} = \mathbf{L} + \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\Sigma} \quad . \quad (1.193)$$

Wir untersuchen zunächst den Kommutator $[\mathbf{L}, H]$. Anschließend zeigen wir, daß der verbleibende Kommutatorrest gerade das Negative des Kommutators $[\mathbf{S}, H]$ ist. Da \mathbf{L} mit β und mit dem sphärisch-symmetrischen Potential $V(r)$ kommutiert, verbleibt nur die Berechnung von $[\mathbf{L}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}]$. Wir beschränken uns zunächst auf die Berechnung des Kommutators für die Komponente L_x . Es ist

$$[L_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = L_x(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) - (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})L_x \quad (1.194)$$

mit

$$L_x = yp_z - zp_y \quad (1.195)$$

Da L_x mit p_x vertauscht wird aus (1.194)

$$[L_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = \alpha_y[L_x, p_y] + \alpha_z[L_x, p_z] \quad (1.196)$$

Explizites Einsetzen führt auf

$$[L_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = \alpha_y(-p_y y)p_z + \alpha_z(p_z z)p_y \quad (1.197)$$

Mit $p_i = -i\hbar \partial/\partial x^i$ folgt

$$[L_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = i\hbar(\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) \quad (1.198)$$

Durch zyklisches Vertauschen der Indizes erhalten wir schließlich insgesamt

$$[\mathbf{L}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = i\hbar(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \neq 0 \quad (1.199)$$

Diese Gleichung besagt, daß der Bahndrehimpuls nicht mit dem Hamilton-Operator vertauscht und somit keine Konstante der Bewegung ist. Nach Eigenwerten des Bahndrehimpulsoperators lassen sich die Zustände nicht klassifizieren. Jetzt untersuchen wir den Kommutator des Spindrehimpulses \mathbf{S} mit dem Hamilton-Operator H . Auch in diesem Fall beschränken wir uns zunächst nur auf die Komponente $S_x = \frac{1}{2}\hbar\Sigma_x$. Wir verwenden, daß gilt

$$[\beta, \boldsymbol{\Sigma}] = 0 \quad (1.200)$$

$$[\gamma'_5, \boldsymbol{\alpha}] = 0 \quad (1.201)$$

$$[\gamma'_5, \boldsymbol{\Sigma}] = 0 \quad (1.202)$$

Es bleibt dann noch der folgende Kommutator zu ermitteln

$$\hbar[\Sigma_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = -\hbar\gamma'_5[\alpha_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = -\hbar\gamma'_5\{(\alpha_x\alpha_y - \alpha_y\alpha_x)p_y + (\alpha_x\alpha_z - \alpha_z\alpha_x)p_z\} \quad (1.203)$$

Wir verwenden jetzt die Antikommutatorrelationen der α -Matrizen

$$\alpha_i\alpha_j = -\alpha_j\alpha_i + 2\delta_{ij} \quad (1.204)$$

Damit folgt

$$\frac{1}{2}\hbar[\Sigma_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = \hbar\gamma'_5(\alpha_y\alpha_x p_y + \alpha_z\alpha_x p_z) = \hbar\gamma'_5(\Sigma_y\Sigma_x p_y + \Sigma_z\Sigma_x p_z) \quad . \quad (1.205)$$

Jetzt nutzen wir die Antikommutatorrelation der Pauli-Matrizen aus

$$\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i = i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \quad \text{für } i \neq j \quad . \quad (1.206)$$

Damit bekommen wir

$$\frac{1}{2}\hbar[\Sigma_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] = \hbar\gamma'_5(-i\Sigma_z p_y + i\Sigma_y p_z) = i\hbar(\alpha_z p_y - \alpha_y p_z) \quad . \quad (1.207)$$

Dies ist genau das Negative des Kommutators $[L_x, H]$. Wir sehen schließlich, daß die J_x -Komponente des Gesamtdrehimpulses mit dem Hamilton-Operator vertauscht.

Jetzt wollen wir nachweisen, daß auch der Operator K mit dem Hamilton-Operator und mit dem Gesamtdrehimpulsoperator \mathbf{J} vertauscht und somit ein gemeinsames Eigenfunktionssystem besitzt. Mit $K = \beta(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar)$ haben wir

$$[K, \beta] = \beta\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}\beta - \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} = 0 \quad . \quad (1.208)$$

Weiterhin gilt

$$\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \beta = 2\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \quad . \quad (1.209)$$

Ebenso folgt

$$\begin{aligned} [\beta\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] &= \beta\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \beta\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} = \beta\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} \\ &= \beta\{\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}\} \end{aligned} \quad (1.210)$$

mit dem Antikommutator

$$\{A, B\} = AB + BA \quad . \quad (1.211)$$

Nun ist

$$\{\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}\} = -\gamma'_5(\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{L} + i\boldsymbol{\Sigma} \cdot (\mathbf{L} \times \mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{L})) \quad . \quad (1.212)$$

Offensichtlich gilt

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{L} = 0 \quad . \quad (1.213)$$

Mit der Vertauschungsrelation

$$[r_i, p_k] = i\hbar\delta_{ik} \quad (1.214)$$

können wir durch explizites Ausrechnen nachweisen, daß gilt

$$\mathbf{L} \times \mathbf{p} = -r\mathbf{p}^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} \quad (1.215)$$

und

$$\mathbf{p} \times \mathbf{L} = r\mathbf{p}^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} + 2i\hbar\mathbf{p} \quad (1.216)$$

Dies ergibt zusammengefaßt

$$\mathbf{L} \times \mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{L} = 2i\hbar\mathbf{p} \quad (1.217)$$

Abschließend erhalten wir für den Kommutator von K mit der kinetischen Energie

$$\begin{aligned} [K, c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] &= 2\hbar c\beta\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta(-\gamma'_5) i\boldsymbol{\Sigma} \cdot (2i\hbar c\mathbf{p}) \\ &= \hbar c(2\beta\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + 2\beta\gamma'_5\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}) \\ &= \hbar c(2\beta\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - 2\beta\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) = 0 \quad (1.218) \end{aligned}$$

Der Operator K vertauscht also mit dem Hamilton-Operator für freie Teilchen.

Schließlich weisen wir noch nach, daß er auch mit \mathbf{J} vertauscht. Es ist

$$\left[\beta\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L} + \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\Sigma} \right] = \beta[\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}] + \frac{1}{2}\hbar\beta[\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \boldsymbol{\Sigma}] \quad (1.219)$$

Mit der Vertauschungsrelation

$$\Sigma_i \Sigma_j = -i\varepsilon_{ijk} \Sigma_k \quad (1.220)$$

erhalten wir durch explizites komponentenweises Ausrechnen

$$[\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \boldsymbol{\Sigma}] = 2i\boldsymbol{\Sigma} \times \mathbf{L} \quad (1.221)$$

Ebenso bekommen wir mit

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} L_k \quad (1.222)$$

den Kommutator

$$[\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}] = -i\hbar\boldsymbol{\Sigma} \times \mathbf{L} \quad (1.223)$$

Dies führt zusammengefaßt auf die Behauptung

$$[K, \mathbf{J}] = 0 \quad (1.224)$$

Für K^2 resultiert

$$\begin{aligned} K^2 &= (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar)^2 = \mathbf{L}^2 + i\boldsymbol{\Sigma} \cdot (\mathbf{L} \times \mathbf{L}) + 2\hbar\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar^2 \\ &= \mathbf{L}^2 + \hbar\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar^2 \quad (1.225) \end{aligned}$$

Die Eigenwerte des Quadrats \mathbf{J}^2 des Gesamtdrehimpulsoperators sind $\hbar^2 j(j+1)$. Gleichzeitig diagonalisiert werden kann eine Komponente J_z des Gesamtdrehimpulsoperators. Den Eigenwert von J_z bezeichnen wir mit $\hbar\mu$.

1.6 Spin-Winkelfunktion

Zunächst bestimmen wir generell die simultanen Eigenvektoren $|u_{j\mu}\rangle$ von \mathbf{J}^2 und J_z des Gesamtdrehimpulses eines Elektrons

$$\mathbf{J}^2 |u_{j\mu}\rangle = \hbar^2 j(j+1) |u_{j\mu}\rangle \quad , \quad (1.226)$$

$$J_z |u_{j\mu}\rangle = \hbar \mu |u_{j\mu}\rangle \quad . \quad (1.227)$$

Diese Eigenvektoren liegen im Produktraum $u_\ell \times u_{\frac{1}{2}}$, der von den Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators \mathbf{L} , den Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$, und den Spineigenfunktionen aufgespannt werden. Als Basisvektoren des Produktraums verwenden wir die Produkte aus Bahndrehimpuls- und Spinvektoren

$$|u_{\ell m_\ell} u_{m_s}\rangle = |u_{\ell m_\ell}\rangle |u_{\frac{1}{2} m_s}\rangle \quad . \quad (1.228)$$

Die Entwicklung der Gesamtdrehimpuls-Eigenvektoren lautet daher

$$|u_{j\mu}\rangle = \sum_{m_\ell, m_s} |u_{\ell m_\ell} u_{m_s}\rangle C^{m_\ell m_s} \quad , \quad (1.229)$$

wobei die $C^{m_\ell m_s}$ noch zu bestimmende Entwicklungskoeffizienten sind. Auf diese Entwicklung wenden wir den Operator $J_z = L_z + S_z$ an und erhalten

$$\mu |u_{j\mu}\rangle = \sum_{m_\ell, m_s} (m_\ell + m_s) |u_{\ell m_\ell} u_{m_s}\rangle C^{m_\ell m_s} \quad (1.230)$$

oder

$$\sum_{m_\ell, m_s} (\mu - m_\ell - m_s) |u_{\ell m_\ell} u_{m_s}\rangle C^{m_\ell m_s} = 0 \quad . \quad (1.231)$$

Multiplizieren wir diese Gleichung mit $\langle u_{\ell m'_\ell} u_{m'_s} |$, so folgt aus der Orthogonalität

$$(\mu - m_\ell - m_s) C^{m_\ell m_s} = 0 \quad . \quad (1.232)$$

Damit müssen die Koeffizienten $C^{m_\ell m_s}$ verschwinden für $\mu \neq m_\ell + m_s$. Wir können daher m_ℓ durch $\mu - m_s$ ersetzen. Somit brauchen wir auch nur noch über die Spineinstellungen $+$ oder $-$ zu summieren.

$$|u_{j\mu}\rangle = |u_{\ell, \mu - \frac{1}{2}} u_+\rangle C^+ + |u_{\ell, \mu + \frac{1}{2}} u_-\rangle C^- \quad . \quad (1.233)$$

Um die Koeffizienten C^+ und C^- zu ermitteln, wenden wir den Operator

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \\ &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2(L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z) \\ &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + L_+ S_- + L_- S_+ + 2L_z S_z \end{aligned} \quad (1.234)$$

an. Hierbei ist allgemein für einen Drehimpulsoperator

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad . \quad (1.235)$$

Bezüglich der Wirkung auf die Eigenfunktionen gilt

$$\begin{aligned} J_{\pm} |u_{JM}\rangle &= \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \hbar |u_{J, M \pm 1}\rangle \\ &= \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \hbar |u_{J, M \pm 1}\rangle \quad . \end{aligned} \quad (1.236)$$

Abkürzend setzen wir

$$|v^+\rangle = |u_{\ell, \mu - \frac{1}{2}} u_+\rangle \quad , \quad (1.237)$$

$$|v^-\rangle = |u_{\ell, \mu + \frac{1}{2}} u_-\rangle \quad . \quad (1.238)$$

Dies führt schließlich auf

$$\begin{aligned} j(j+1) (|v^+\rangle C^+ + |v^-\rangle C^-) &= \left[\ell(\ell+1) + \frac{3}{4} \right] (|v^+\rangle C^+ + |v^-\rangle C^-) \\ &\quad + \sqrt{\ell(\ell+1) - \left(\mu - \frac{1}{2}\right) \left(\mu + \frac{1}{2}\right)} |v^-\rangle C^+ \\ &\quad + \sqrt{\ell(\ell+1) - \left(\mu + \frac{1}{2}\right) \left(\mu - \frac{1}{2}\right)} |v^+\rangle C^- \\ &\quad + \left(\mu - \frac{1}{2}\right) |v^+\rangle C^+ - \left(\mu + \frac{1}{2}\right) |v^-\rangle C^- \quad . \end{aligned} \quad (1.239)$$

Die Koeffizienten C^+ und C^- erfüllen also das lineare Gleichungssystem

$$\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} - \mu + \frac{1}{2} \right] C^+ - \sqrt{\ell(\ell+1) - \mu^2 + \frac{1}{4}} C^- = 0 \quad , \quad (1.240)$$

$$-\sqrt{\ell(\ell+1) - \mu^2 + \frac{1}{4}} C^+ + \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} + \mu + \frac{1}{2} \right] C^- = 0 \quad . \quad (1.241)$$

Dieses Gleichungssystem hat nur dann nichttriviale Lösungen, falls die Koeffizientendeterminante verschwindet. Diese Bedingung führt auf

$$j(j+1) = \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 \pm \left(\ell + \frac{1}{2} \right) \quad . \quad (1.242)$$

Dies bedingt schließlich für den Gesamtdrehimpuls die beiden Möglichkeiten

$$j = \ell + \frac{1}{2} \quad , \quad (1.243)$$

$$j = \ell - \frac{1}{2} \quad . \quad (1.244)$$

Für den Fall (1.243) resultiert für die Koeffizienten C^\pm die Gleichung

$$\sqrt{\ell + \frac{1}{2} - \mu} C^+ - \sqrt{\ell + \frac{1}{2} + \mu} C^- = 0 \quad (1.245)$$

mit der offensichtlichen Lösung

$$C^+ = N \sqrt{\ell + \frac{1}{2} + \mu} \quad , \quad (1.246)$$

$$C^- = N \sqrt{\ell + \frac{1}{2} - \mu} \quad . \quad (1.247)$$

Der Faktor N folgt aus der Normierungsbedingung der Gesamtwellenfunktion

$$|C^+|^2 + |C^-|^2 = |N|^2 (2\ell + 1) = 1 \quad . \quad (1.248)$$

Somit haben wir schließlich

$$C_{j=\ell+\frac{1}{2}}^+ = \sqrt{\frac{\ell + \mu + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} \quad , \quad (1.249)$$

$$C_{j=\ell+\frac{1}{2}}^- = \sqrt{\frac{\ell - \mu + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} \quad . \quad (1.250)$$

In analoger Weise bekommen wir für $j = \ell - \frac{1}{2}$ die Koeffizienten

$$C_{j=\ell-\frac{1}{2}}^+ = -\sqrt{\frac{\ell - \mu + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} \quad , \quad (1.251)$$

$$C_{j=\ell-\frac{1}{2}}^- = \sqrt{\frac{\ell + \mu + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} \quad . \quad (1.252)$$

Wir spezifizieren jetzt die Eigenfunktionen. Die Eigenfunktionen $|u_{\ell m_\ell}\rangle$ des Bahndrehimpulsoperators \mathbf{L} sind die Kugelfunktionen $Y_{\ell m_\ell}(\vartheta, \varphi)$. Die Eigenfunktionen $|u_{\frac{1}{2} m_s}\rangle$ des Spinoperators \mathbf{S} sind nach geeigneter Wahl der Phasen die Spinoren

$$\chi^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad (1.253)$$

$$\chi^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (1.254)$$

Damit können wir jetzt die Spin-Winkelfunktionen geschlossen angeben, die letztlich auch eine Separation der Winkelanteile in der Dirac-Gleichung für Zentralkraftfelder erlauben.

Es ist

$$\chi_\kappa^\mu = \sum_{m=\pm\frac{1}{2}} C\left(\ell \frac{1}{2} j; \mu - m, m\right) Y_{\ell, \mu - m} \chi^m \quad . \quad (1.255)$$

Bezüglich der Entwicklungskoeffizienten C entspricht hierbei

$$C\left(\ell, \frac{1}{2}, j = \ell + \frac{1}{2}; \mu - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = C_{j=\ell+\frac{1}{2}}^+ \quad , \quad (1.256)$$

$$C\left(\ell, \frac{1}{2}, j = \ell + \frac{1}{2}; \mu + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) = C_{j=\ell+\frac{1}{2}}^- \quad , \quad (1.257)$$

$$C\left(\ell, \frac{1}{2}, j = \ell - \frac{1}{2}; \mu - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = C_{j=\ell-\frac{1}{2}}^+ \quad , \quad (1.258)$$

$$C\left(\ell, \frac{1}{2}, j = \ell - \frac{1}{2}; \mu + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) = C_{j=\ell-\frac{1}{2}}^- \quad . \quad (1.259)$$

Die Koeffizienten $C\left(\ell \frac{1}{2} j; \mu - m, m\right)$ werden als Clebsch-Gordon-Koeffizienten oder auch als Wigner-Koeffizienten bezeichnet. Die Schreibweisen für diese Koeffizienten sind nicht einheitlich in der Literatur. Auch die Phasenwahl kann differieren. Zuweilen gibt man statt der 5 Argumente auch alle 6 Argumente an

$$C\left(\ell \frac{1}{2} j; \mu - m, m, \mu\right) \equiv C\left(\ell \frac{1}{2} j; \mu - m, m\right) \quad . \quad (1.260)$$

Aufgrund der Bedingung $m_\ell + m_s = \mu$ ist das 6. Argument aber redundant. Die ersten 3 Argumente geben an, wie Bahndrehimpuls und Spin $\frac{1}{2}$ zum Gesamtdrehimpuls j koppeln. Die letzten 3 Argumente in (1.260) beschreiben wie die korrespondierenden magnetischen Quantenzahlen oder die Projektionen der Drehimpulse auf die z -Achse zum Eigenwert μ von J_z koppeln. Die Koeffizienten C wurden in (1.255) eingeführt, da nur diese Linearkombinationen gleichzeitig auch Eigenfunktionen des Quadrats des Gesamtdrehimpulsoperators sind. Die Koeffizienten C nennt man auch Vektoradditionskoeffizienten.

Wir werden jetzt im folgenden noch einige Eigenschaften der Spin-Winkelfunktionen klären müssen. Auch müssen wir noch auf die in der Bezeichnungsweise χ_κ^μ angegebene Quantenzahl κ eingehen.

Für die Spinoren gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 \chi^m &= \hbar^2 s(s+1) \chi^m = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi^m \quad , \\ S_z \chi^m &= \hbar m \chi^m \end{aligned} \quad (1.261)$$

mit $m = \pm \frac{1}{2}$. Nun ist

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 \quad , \quad (1.262)$$

also

$$2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2 = \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \quad . \quad (1.263)$$

Jetzt betrachten wir den Operator

$$K' = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar \quad . \quad (1.264)$$

Wir haben insgesamt

$$J_z \chi_\kappa^\mu = \hbar \mu \chi_\kappa^\mu \quad , \quad (1.265)$$

$$\mathbf{J}^2 \chi_\kappa^\mu = \hbar^2 j(j+1) \chi_\kappa^\mu \quad , \quad (1.266)$$

$$\mathbf{S}^2 \chi_\kappa^\mu = \hbar^2 s(s+1) \chi_\kappa^\mu = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_\kappa^\mu \quad , \quad (1.267)$$

$$\mathbf{L}^2 \chi_\kappa^\mu = \hbar^2 \ell(\ell+1) \chi_\kappa^\mu \quad , \quad (1.268)$$

$$2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \chi_\kappa^\mu = (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \chi_\kappa^\mu = \hbar^2 [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] \chi_\kappa^\mu \quad . (1.269)$$

Damit können wir bezüglich des Operators K' ableiten

$$K' \chi_\kappa^\mu = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar) \chi_\kappa^\mu = \hbar [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1) + 1] \chi_\kappa^\mu \quad (1.270)$$

$$= \hbar \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) + \frac{1}{4} \right] \chi_\kappa^\mu \quad . \quad (1.271)$$

Wir bezeichnen jetzt den Eigenwert von K' mit $-\kappa$, d.h.

$$K' \chi_\kappa^\mu = -\hbar \kappa \chi_\kappa^\mu \quad . \quad (1.272)$$

Wir müssen jetzt eine Fallunterscheidung machen für $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. Es resultiert

$$\kappa = \begin{array}{ll} \ell & \text{für } j = \ell - \frac{1}{2} \\ -\ell - 1 & \text{für } j = \ell + \frac{1}{2} \end{array} \quad . \quad (1.273)$$

Damit nimmt κ die Werte an

$$\kappa = \pm 1, \quad \pm 2, \quad \dots \quad (1.274)$$

Mit den Bezeichnungen

$$k = |\kappa| \quad , \quad (1.275)$$

$$S_\kappa = \frac{\kappa}{k} \quad (1.276)$$

haben wir auch

$$j = k - \frac{1}{2} \quad , \quad (1.277)$$

$$j = \ell - \frac{1}{2} S_\kappa \quad (1.278)$$

vorliegen. Die Inversion von (1.273) liefert

$$\ell = \begin{array}{ll} \kappa & \text{für } \kappa > 0 \\ -\kappa - 1 & \text{für } \kappa < 0 \end{array} \quad . \quad (1.279)$$

Wir beweisen noch die sehr nützliche Relation

$$\sigma_r \chi_\kappa^\mu = -\chi_{-\kappa}^\mu \quad (1.280)$$

mit

$$r\sigma_r = \sum_{i=1}^3 x_i \sigma_i \quad . \quad (1.281)$$

σ_r ist ein skalarer Operator, so daß $\sigma_r \chi_\kappa^\mu$ zum selben j und μ gehören muß wie χ_κ^μ .

Zunächst müssen wir einige Betrachtungen zur Parität eines Zustandes machen. Die Parität wird festgelegt durch die Transformationseigenschaften der Kugelfunktionen. Beim Übergang $(\vartheta, \varphi) \rightarrow (\pi - \vartheta, \varphi + \pi)$ folgt

$$Y_{\ell,m}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^\ell Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) \quad . \quad (1.282)$$

Die Parität eines Zustandes wird demnach durch den Bahndrehimpuls ℓ durch $(-1)^\ell$ festgelegt. Wir können auch schreiben

$$\Pi_\ell = (-1)^\ell = (-1)^{j+\frac{1}{2}S_\kappa} \quad . \quad (1.283)$$

Wir können somit ansetzen

$$\sigma_r \chi_\kappa^\mu = a \chi_{-\kappa}^\mu + b \chi_\kappa^\mu \quad . \quad (1.284)$$

b muß aber Null sein, da σ_r bei einer Paritätstransformation sein Vorzeichen wechselt. Aufgrund von

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \quad (1.285)$$

finden wir

$$\sigma_r^2 = 1 \quad (1.286)$$

und daher

$$|a|^2 = 1 \quad . \quad (1.287)$$

Somit verbleibt nur noch die Bestimmung der Phase von a . Dies erfolgt durch explizites Ausrechnen. Wir wählen \mathbf{e}_r entlang der z -Achse. Setzen wir $\vartheta = 0$ ein, so folgt

$$Y_{\ell,m}(\vartheta = 0) = \left[\frac{2\ell + 1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \delta_{m0} \quad . \quad (1.288)$$

Es ist dann $\sigma_r = \sigma_z$. Mit

$$\sigma_z \chi^{\pm\frac{1}{2}} = \pm \chi^{\pm\frac{1}{2}} = 2\mu \chi^{\pm\frac{1}{2}} \quad (1.289)$$

erhalten wir bei festgehaltenem μ

$$\chi_\kappa^\mu = \left(\frac{2\ell + 1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} C \left(\ell \frac{1}{2} j; 0 \mu \right) \chi^\mu \quad (1.290)$$

Wir hatten den Zusammenhang zwischen ℓ und κ erstellt. Jetzt führen wir ein $\bar{\ell}$ ein, das die zugehörige Bahndrehimpulsquantenzahl zum entsprechenden negativen κ -Wert ist, d.h.

$$\bar{\ell} = \ell_{-\kappa} \quad . \quad (1.291)$$

Es ist

$$\bar{\ell} = \begin{array}{ll} \kappa - 1 & \text{für } \kappa > 0 \\ -\kappa & \text{für } \kappa < 0 \end{array} , \quad (1.292)$$

und es gilt

$$\ell - \bar{\ell} = S_\kappa . \quad (1.293)$$

Somit ist nach Einsetzen

$$a (2\bar{\ell} + 1)^{\frac{1}{2}} C \left(\bar{\ell} \frac{1}{2} j; 0 \mu \right) = 2\mu (2\ell + 1)^{\frac{1}{2}} C \left(\ell \frac{1}{2} j; 0 \mu \right) . \quad (1.294)$$

Für alle vier möglichen Fälle $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, $\mu = \pm \frac{1}{2}$ finden wir $a = -1$.

Zusammenfassend können wir konstatieren, daß sich die Spin-Winkelfunktionen χ_κ^μ ausdrücken lassen durch Linearkombinationen von Produkten von sphärischen Kugelfunktionen $Y_{\ell, \mu-m}(\vartheta, \varphi)$ und Zweierspinoren χ^m . Die Entwicklungskoeffizienten sind die Clebsch-Gordon-Koeffizienten. Die Wahl dieser Koeffizienten stellt sicher, daß die Spin-Winkelfunktionen χ_κ^μ auch Eigenfunktionen zum Quadrat des Gesamtdrehimpulsoperators \mathbf{J}^2 und zu einer Komponente des Gesamtdrehimpulsoperators J_z sind.

1.7 Abseparation der Winkel

Für die stationäre Dirac-Gleichung in einem sphärisch symmetrischen Potential galt

$$H \Phi(\mathbf{r}) = \left[ic\gamma_5' \Sigma_r \left(\hbar \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{r} - \frac{\beta}{r} K \right) + V(r) + \beta mc^2 \right] \Phi(\mathbf{r}) = E \Phi(\mathbf{r}) . \quad (1.295)$$

Hierbei ist

$$K = \beta(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar) . \quad (1.296)$$

Wir haben bereits gezeigt, daß \mathbf{J}^2 , J_z und K mit dem Hamilton-Operator vertauschen. Wir wollen eine Darstellung ableiten, die diese drei Operatoren zusätzlich zu H diagonalisiert. Die Eigenwerte von \mathbf{J}^2 , J_z und K sind $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar \mu$ und $-\hbar \kappa$. Auch der Operator der Raum inversion, multipliziert mit β , also der Paritätsoperator, ist in dieser Darstellung diagonal. Jetzt setzen wir an

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Phi^u(\mathbf{r}) \\ \Phi^l(\mathbf{r}) \end{pmatrix} , \quad (1.297)$$

wobei u und l für „upper“ und „lower“ steht. Sind die beiden zweikomponentigen Spinoren $\Phi^u(\mathbf{r})$ und $\Phi^l(\mathbf{r})$ proportional zu χ_κ^μ und $\chi_{-\kappa}^\mu$, so gelten die Relationen

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar) \Phi^u = -\hbar \kappa \Phi^u , \quad (1.298)$$

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar)\Phi^l = \hbar\kappa\Phi^l \quad , \quad (1.299)$$

$$\mathbf{J}^2 \Phi^u = \hbar^2 j(j+1)\phi^u \quad , \quad (1.300)$$

$$\mathbf{J}^2 \Phi^l = \hbar^2 j(j+1)\phi^l \quad , \quad (1.301)$$

$$J_z \phi^u = \hbar\mu \phi^u \quad , \quad (1.302)$$

$$J_z \phi^l = \hbar\mu \phi^l \quad . \quad (1.303)$$

Für $\Phi(\mathbf{r})$ machen wir jetzt den spezifischen Ansatz

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g(r) \chi_\kappa^\mu \\ if(r) \chi_{-\kappa}^\mu \end{pmatrix} \quad . \quad (1.304)$$

Hierbei sind $g(r)$ und $f(r)$ Radialfunktionen, die im allgemeinen von der Drehimpulsquantenzahl κ abhängen. Eine Phase i wurde eingeführt, da hierdurch die Radialgleichungen für f und g explizit reell werden. Wir setzen den Ansatz (1.304) in (1.295) ein

$$\begin{aligned} & \left[ic \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_r & 0 \\ 0 & \sigma_r \end{pmatrix} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{r} + \frac{\kappa \hbar}{r} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \right. \\ & \left. + V(r) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} mc^2 \right] \begin{pmatrix} g(r) \chi_\kappa^\mu \\ if(r) \chi_{-\kappa}^\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E g \chi_\kappa^\mu \\ i E f \chi_{-\kappa}^\mu \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.305)$$

Das Auswerten ergibt

$$-ic\sigma_r \left(\hbar \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{r} - \frac{\kappa \hbar}{r} \right) if(r) \chi_{-\kappa}^\mu + (V(r) + mc^2 - E) g(r) \chi_\kappa^\mu = 0 \quad , \quad (1.306)$$

$$-ic\sigma_r \left(\hbar \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{r} + \frac{\kappa \hbar}{r} \right) g(r) \chi_\kappa^\mu + (V(r) - mc^2 - E) if(r) \chi_{-\kappa}^\mu = 0 \quad . \quad (1.307)$$

Jetzt nutzen wir aus, daß gilt $\sigma_r \chi_\kappa^\mu = -\chi_{-\kappa}^\mu$. Dies führt sofort auf

$$\hbar c \left(-\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} + \frac{\kappa}{r} \right) f(r) \chi_\kappa^\mu + (V(r) + mc^2 - E) g(r) \chi_\kappa^\mu = 0 \quad , \quad (1.308)$$

$$\hbar c i \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} + \frac{\kappa}{r} \right) g(r) \chi_{-\kappa}^\mu + (V(r) - mc^2 - E) if(r) \chi_{-\kappa}^\mu = 0 \quad . \quad (1.309)$$

Als Radialgleichungssystem resultiert somit, wenn wir die erste Gleichung mit -1 und die zweite mit $-i$ multiplizieren

$$\hbar c \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} - \frac{\kappa}{r} \right) f(r) - (V(r) + mc^2 - E) g(r) = 0 \quad , \quad (1.310)$$

$$\hbar c \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\kappa}{r} \right) g(r) + (V(r) - mc^2 - E) f(r) = 0 \quad (1.311)$$

und weiter

$$\frac{d}{dr} f(r) = \frac{\kappa - 1}{r} f(r) - \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 - V(r)) g(r) \quad , \quad (1.312)$$

$$\frac{d}{dr} g(r) = -\frac{\kappa + 1}{r} g(r) + \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 - V(r)) f(r) \quad . \quad (1.313)$$

Jetzt definieren wir noch

$$G(r) = r g(r) \quad , \quad (1.314)$$

$$F(r) = r f(r) \quad (1.315)$$

mit

$$\frac{dG(r)}{dr} = r \frac{dg(r)}{dr} + g(r) \quad , \quad (1.316)$$

$$\frac{dF(r)}{dr} = r \frac{df(r)}{dr} + f(r) \quad . \quad (1.317)$$

Damit bekommen wir aus (1.313)

$$\frac{dF(r)}{dr} = \frac{\kappa}{r} F(r) - \frac{1}{\hbar c} (E - mc^2 - V(r)) G(r) \quad , \quad (1.318)$$

$$\frac{dG(r)}{dr} = -\frac{\kappa}{r} G(r) + \frac{1}{\hbar c} (E + mc^2 - V(r)) F(r) \quad . \quad (1.319)$$

In der nichtrelativistischen Schrödinger-Theorie hatten wir für spärlich symmetrische Potentiale eine Differentialgleichung zweiter Ordnung in der radialen Koordinaten r zu lösen. In der relativistischen Dirac-Theorie sind die entsprechenden radialen Differentialgleichungen von erster Ordnung. Der Preis, den wir für diese Vereinfachung zahlen, ist dadurch gegeben, daß wir es nun statt mit einer Differentialgleichung mit zwei gekoppelten Differentialgleichungen zu tun haben. Diese beiden gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung sind jedoch äquivalent zu einer Differentialgleichung zweiter Ordnung. Aus (1.319) folgt

$$F(r) = \hbar c \frac{\frac{dG}{dr} + \frac{\kappa}{r} G}{E + mc^2 - V(r)} \quad . \quad (1.320)$$

Dies setzen wir in (1.318) für dF/dr ein. Das ergibt

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 G}{dr^2} + \frac{\frac{dV}{dr}}{E + mc^2 - V(r)} \frac{dG}{dr} \\ & + \left[\frac{\kappa}{r} \frac{\frac{dV}{dr}}{E + mc^2 - V(r)} - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^2} + \left(\frac{E - V(r)}{\hbar c} \right)^2 - \left(\frac{mc^2}{\hbar c} \right)^2 \right] G = 0 \end{aligned} \quad (1.321)$$

Abschließend betrachten wir noch die Normierungsbedingung

$$\int \Phi^+(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) d^3 r = 1 \quad . \quad (1.322)$$

Die Clebsch-Gordon Koeffizienten bei den Spin-Winkelfunktionen waren gerade so konstruiert, daß gilt

$$\int \chi_{\kappa}^{\mu+} \chi_{\kappa}^{\mu} d\Omega = 1 \quad . \quad (1.323)$$

Dies bedingt die separate Normierung der Radialfunktionen

$$\int_0^{\infty} (g^2(r) + f^2(r)) r^2 dr = 1 \quad (1.324)$$

oder

$$\int_0^{\infty} (G^2(r) + F^2(r)) dr = 1 \quad . \quad (1.325)$$

1.8 Lösung der Dirac-Gleichung für das Coulomb-Potential

Wir wollen nun die Diracschen Radialgleichungen (1.318) und (1.319) für das Potential eines punktförmigen Kernes mit der Ladung Ze lösen. Hierbei bezeichnet Z die Ordnungszahl des Kernes. Wir betrachten ein Elektron mit der Ladung $-e$, das im Coulomb-Feld des Atomkerns gebunden ist. Damit lautet das Potential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad . \quad (1.326)$$

Wir führen die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante ein. Es ist als dimensionslose Konstante

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad (1.327)$$

mit $1/\alpha = 137.035\,999\,76$ (52). α ist ein Maß für die elektromagnetische Kopplungsstärke. Damit lassen sich die Radialgleichungen (1.318) und (1.319) schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dr} &= -\frac{\kappa}{r} G + \left[\frac{1}{\hbar c} (E + mc^2) + \frac{Z\alpha}{r} \right] F \quad , \\ \frac{dF}{dr} &= \frac{\kappa}{r} F - \left[\frac{1}{\hbar c} (E - mc^2) + \frac{Z\alpha}{r} \right] G \quad . \end{aligned} \quad (1.328)$$

Wir studieren nun die Lösung des Differentialgleichungssystems (1.328) für kleine r , d.h. im Bereich des Ursprungs bei $r \sim 0$. In diesem Fall kann man die Glieder mit $E \pm mc^2$ vernachlässigen, und man erhält

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dr} + \frac{\kappa}{r} G - \frac{Z\alpha}{r} F &= 0 \quad , \\ \frac{dF}{dr} - \frac{\kappa}{r} F + \frac{Z\alpha}{r} G &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (1.329)$$

Setzt man die Lösung von (1.329) in Form einer Potenzreihe an, so dominiert der Term mit der niedrigsten Ordnung im Bereich des Ursprungs. Wir machen daher den Ansatz

$$\begin{aligned} G &= a r^\gamma , \\ F &= b r^\gamma . \end{aligned} \quad (1.330)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} a\gamma r^{\gamma-1} + \kappa a r^{\gamma-1} - Z\alpha b r^{\gamma-1} &= 0 , \\ b\gamma r^{\gamma-1} - \kappa b r^{\gamma-1} - Z\alpha a r^{\gamma-1} &= 0 \end{aligned} \quad (1.331)$$

oder

$$\begin{aligned} a(\gamma + \kappa) - b Z\alpha &= 0 , \\ a Z\alpha + b(\gamma - \kappa) &= 0 . \end{aligned} \quad (1.332)$$

Um nichttriviale Lösungen dieses Gleichungssystems zu finden, muß die Koeffizientendeterminante verschwinden. Dies führt auf

$$\gamma^2 = \kappa^2 - (Z\alpha)^2 \quad (1.333)$$

oder

$$\gamma = \pm \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} = \pm \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2} \quad (1.334)$$

Aufgrund der Forderung der Normierbarkeit der Wellenfunktion wählen wir das positive Vorzeichen für γ . Für den Fall der negativen Wurzel $\gamma = -|\gamma|$ folgt

$$F^2 + G^2 \sim r^{-2|\gamma|} \quad (1.335)$$

nahe $r = 0$, was für $|\gamma| \geq \frac{1}{2}$ ein divergentes Normierungsintegral liefern würde. Jedoch sei erwähnt, daß für $\kappa^2 = 1$ und $Z\alpha \geq \frac{\sqrt{3}}{2}$ oder $Z \geq 118$ reguläre Lösungen konstruiert werden können.

Weiterhin läßt sich der Beziehung (1.334) entnehmen, daß für Zustände mit $j + \frac{1}{2} = 1$ nur Lösungen bis zu $Z = \alpha^{-1} \sim 137$ konstruiert werden können. Für größere Z -Werte wird die Wurzel imaginär, und die Wellenfunktionen sind nicht mehr normierbar.

Um das Gleichungssystem (1.328) zu lösen, führen wir zunächst einige Substitutionen durch. Wir setzen

$$\varrho = 2\lambda r \quad (1.336)$$

mit

$$\lambda = \frac{1}{\hbar c} [m^2 c^4 - E^2]^{1/2} . \quad (1.337)$$

Mit

$$\frac{d\rho}{dr} = 2\lambda \quad (1.338)$$

und

$$\frac{d}{dr} = 2\lambda \frac{d}{d\rho} \quad (1.339)$$

sowie nach Division durch 2λ folgt für das Gleichungssystem (1.328)

$$\begin{aligned} \frac{dG(\rho)}{d\rho} &= -\frac{\kappa}{\rho} G(\rho) + \left[\frac{E + mc^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] F(\rho) , \\ \frac{dF(\rho)}{d\rho} &= -\left[\frac{E - mc^2}{2\lambda\hbar c} + \frac{Z\alpha}{\rho} \right] G(\rho) + \frac{\kappa}{\rho} F(\rho) . \end{aligned} \quad (1.340)$$

In dieser Form läßt sich das Verhalten von $F(\rho)$ und $G(\rho)$ für $\rho \rightarrow \infty$ leicht bestimmen. Die Differentialgleichungen (1.340) lauten nämlich unter Vernachlässigung der Terme proportional zu $1/\rho$

$$\begin{aligned} \frac{dG(\rho)}{d\rho} &= \frac{E + mc^2}{2\lambda\hbar c} F(\rho) , \\ \frac{dF(\rho)}{d\rho} &= -\frac{E - mc^2}{2\lambda\hbar c} G(\rho) . \end{aligned} \quad (1.341)$$

Mit (1.337) wird hieraus sofort

$$\frac{d^2 G(\rho)}{d\rho^2} = -\frac{(E^2 - m^2 c^4)}{(2\lambda\hbar c)^2} G(\rho) = \frac{1}{4} G(\rho) . \quad (1.342)$$

Von den beiden mögliche Lösungen

$$G(\rho) \sim e^{\pm\rho/2} \quad (1.343)$$

ist nur die exponentiell abfallende Lösung normierbar. Ähnlich ist das Resultat für $F(\rho)$. Wir machen jetzt den Ansatz

$$\begin{aligned} G(\rho) &= (mc^2 + E)^{1/2} e^{-\rho/2} (\phi_1(\rho) + \phi_2(\rho)) , \\ F(\rho) &= (mc^2 - E)^{1/2} e^{-\rho/2} (\phi_1(\rho) - \phi_2(\rho)) . \end{aligned} \quad (1.344)$$

Dieser Ansatz wird in das Gleichungssystem (1.340) eingesetzt. Dies ergibt

$$\begin{aligned}
& (mc^2 + E)^{1/2} e^{-\varrho/2} \left[-\frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\varrho} + \frac{d\phi_2}{d\varrho} \right] = \\
& -\frac{\kappa}{\varrho} (mc^2 + E)^{1/2} e^{-\varrho/2} (\phi_1 + \phi_2) + \left[\frac{E + mc^2}{2\hbar c \lambda} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] (mc^2 - E)^{1/2} e^{-\varrho/2} (\phi_1 - \phi_2) \quad , \\
& (mc^2 - E)^{1/2} e^{-\varrho/2} \left[-\frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\varrho} - \frac{d\phi_2}{d\varrho} \right] = \\
& - \left[\frac{E - mc^2}{2\hbar c \lambda} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] (mc^2 + E)^{1/2} e^{-\varrho/2} (\phi_1 + \phi_2) + \frac{\kappa}{\varrho} (mc^2 - E)^{1/2} e^{-\varrho/2} (\phi_1 - \phi_2) \quad .
\end{aligned} \tag{1.345}$$

Wir dividieren durch $e^{-\varrho/2}$ sowie die erste Gleichung durch $(mc^2 + E)^{1/2}$ und die zweite Gleichung durch $(mc^2 - E)^{1/2}$ mit dem Ergebnis

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\varrho} + \frac{d\phi_2}{d\varrho} &= -\frac{\kappa}{\varrho} (\phi_1 + \phi_2) + \left[\frac{E + mc^2}{2\hbar c \lambda} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] \frac{(mc^2 - E)^{1/2}}{(mc^2 + E)^{1/2}} (\phi_1 - \phi_2) \quad , \\
-\frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\varrho} - \frac{d\phi_2}{d\varrho} &= - \left[\frac{E - mc^2}{2\hbar c \lambda} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] \frac{(mc^2 + E)^{1/2}}{(mc^2 - E)^{1/2}} (\phi_1 + \phi_2) \\
&\quad + \frac{\kappa}{\varrho} (\phi_1 - \phi_2) \quad .
\end{aligned} \tag{1.346}$$

Nun ist

$$\begin{aligned}
\frac{(mc^2 - E)^{1/2}}{(mc^2 + E)^{1/2}} &= \frac{mc^2 - E}{\hbar c \lambda} \quad , \\
\frac{(mc^2 + E)^{1/2}}{(mc^2 - E)^{1/2}} &= \frac{mc^2 + E}{\hbar c \lambda} \quad .
\end{aligned} \tag{1.347}$$

Daher folgt

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\varrho} + \frac{d\phi_2}{d\varrho} &= -\frac{\kappa}{\varrho} (\phi_1 + \phi_2) + \left[\frac{E + mc^2}{2\hbar c \lambda} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] \frac{mc^2 - E}{\hbar c \lambda} (\phi_1 - \phi_2) \quad , \\
-\frac{1}{2}(\phi_1 - \phi_2) + \frac{d\phi_1}{d\varrho} - \frac{d\phi_2}{d\varrho} &= - \left[\frac{E - mc^2}{2\lambda \hbar c} + \frac{Z\alpha}{\varrho} \right] \frac{(mc^2 + E)^{1/2}}{\hbar c \lambda} (\phi_1 + \phi_2) \\
&\quad + \frac{\kappa}{\varrho} (\phi_1 - \phi_2) \quad .
\end{aligned} \tag{1.348}$$

Die Addition der beiden Gleichungen (1.348) liefert

$$-\phi_1 + 2\frac{d\phi_1}{d\varrho} = -\frac{2\kappa}{\varrho} \phi_2 + \phi_1 + \frac{Z\alpha}{\varrho} \frac{mc^2 - E}{\hbar c \lambda} (\phi_1 - \phi_2) - \frac{Z\alpha}{\varrho} \frac{mc^2 + E}{\hbar c \lambda} (\phi_1 + \phi_2) \tag{1.349}$$

Aus der Differenz ergibt sich

$$-\phi_2 + 2\frac{d\phi_2}{d\varrho} = -\frac{2\kappa}{\varrho} \phi_1 - \phi_2 + \frac{Z\alpha}{\varrho} \frac{mc^2 - E}{\hbar c \lambda} (\phi_1 - \phi_2) + \frac{Z\alpha}{\varrho} \frac{mc^2 + E}{\hbar c \lambda} (\phi_1 + \phi_2) \tag{1.350}$$

Wir fassen zusammen und erhalten schließlich

$$\begin{aligned}\frac{d\phi_1}{d\rho} &= \left(1 - \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda\rho}\right) \phi_1 - \left(\frac{\kappa}{\rho} + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda\rho}\right) \phi_2 \quad , \\ \frac{d\phi_2}{d\rho} &= \left(-\frac{\kappa}{\rho} + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda\rho}\right) \phi_1 - \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda\rho} \phi_2 \quad .\end{aligned}\tag{1.351}$$

Die Lösung für ϕ_1 und ϕ_2 setzen wir in Form einer Potenzreihe an, wobei wir mit dem Faktor ρ^γ das Verhalten der Lösung für $\rho \rightarrow 0$ abspalten

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \rho^\gamma \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \rho^k \quad , \\ \phi_2 &= \rho^\gamma \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k \rho^k\end{aligned}\tag{1.352}$$

Diesen Ansatz setzen wir in das Gleichungssystem (1.351) ein. Dies ergibt

$$\begin{aligned}\sum_k (k + \gamma) \alpha_k \rho^{k+\gamma-1} &= \sum_k \alpha_k \rho^{k+\gamma} - \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda} \sum_k \alpha_k \rho^{k+\gamma-1} - \left(\kappa + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}\right) \sum_k \beta_k \rho^{k+\gamma-1} \quad , \\ \sum_k \beta_k (k + \gamma) \rho^{k+\gamma-1} &= \left(-\kappa + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}\right) \sum_k \alpha_k \rho^{k+\gamma-1} + \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda} \sum_k \beta_k \rho^{k+\gamma-1} \quad .\end{aligned}\tag{1.353}$$

Wir führen einen Koeffizientenvergleich durch

$$\begin{aligned}\alpha_k (k + \gamma) &= \alpha_{k-1} - \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda} \alpha_k - \left(\kappa + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}\right) \beta_k \quad , \\ \beta_k (k + \gamma) &= \left(-\kappa + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}\right) \alpha_k + \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda} \beta_k \quad .\end{aligned}\tag{1.354}$$

Aus der zweiten Gleichung folgt

$$\frac{\beta_k}{\alpha_k} = \frac{-\kappa + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}}{k + \gamma - \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda}} = \frac{\kappa - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}}{n' - k}\tag{1.355}$$

mit

$$n' = \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda} - \gamma \quad .\tag{1.356}$$

Speziell folgt für $k = 0$

$$\frac{\beta_0}{\alpha_0} = \frac{\kappa - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}}{n'} \quad .\tag{1.357}$$

Setzt man das Verhältnis (1.355) in die erste Gleichung von (1.354) ein, so ergibt sich

$$\alpha_k \left[k + \gamma + \frac{Z\alpha E}{\hbar c\lambda} + \left(\kappa + \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}\right) \frac{\kappa - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c\lambda}}{n' - k} \right] = \alpha_{k-1}\tag{1.358}$$

oder

$$\alpha_k \left[\left(k + \gamma + \frac{Z\alpha E}{\hbar c \lambda} \right) (n' - k) + \kappa^2 - \frac{Z^2 \alpha^2 m^2 c^4}{\hbar^2 c^2 \lambda^2} \right] = \alpha_{k-1} (n' - k) . \quad (1.359)$$

Wir rechnen die linke Seite explizit aus

$$\left(k + \gamma + \frac{Z\alpha E}{\hbar c \lambda} \right) \left(\frac{Z\alpha E}{\hbar c \lambda} - \gamma - k \right) = -2k\gamma - k^2 - \gamma^2 + \left(\frac{Z\alpha E}{\hbar c \lambda} \right)^2 . \quad (1.360)$$

Mit $\gamma^2 = \kappa^2 - (Z\alpha)^2$ folgt

$$\alpha_k \left[-k(2\gamma + k) + (Z\alpha)^2 + \left(\frac{Z\alpha E}{\hbar c \lambda} \right)^2 - \left(\frac{Z\alpha m c^2}{\hbar c \lambda} \right)^2 \right] = \alpha_{k-1} (n' - k) . \quad (1.361)$$

Weiter zusammengefaßt resultiert

$$\begin{aligned} \alpha_k &= -\frac{(n' - k)}{k(2\gamma + k)} \alpha_{k-1} = \frac{(-1)^k (n' - 1) \dots (n' - k)}{k!(2\gamma + 1) \dots (2\gamma + k)} \alpha_0 \\ &= \frac{(1 - n')(2 - n') \dots (k - n')}{k!(2\gamma + 1) \dots (2\gamma + k)} \alpha_0 . \end{aligned} \quad (1.362)$$

Für β_k erhalten wir nach (1.355)

$$\beta_k = \frac{\kappa - \frac{Z\alpha m c^2}{\hbar c \lambda}}{n' - k} \frac{(-1)^k (n' - 1) \dots (n' - k)}{k!(2\gamma + 1) \dots (2\gamma + k)} \alpha_0 . \quad (1.363)$$

Unter Verwendung von (1.357) führt dies auf

$$\beta_k = (-1)^k \frac{n'(n' - 1) \dots (n' - k + 1)}{k!(2\gamma + 1) \dots (2\gamma + k)} \beta_0 . \quad (1.364)$$

Damit lassen sich die Potenzreihen (1.352) als konfluente hypergeometrische Funktionen schreiben

$${}_1F_1(a, b; z) = 1 + \frac{a}{b} z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (1.365)$$

Wir schreiben auch

$${}_1F_1(a, b; z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m}{(b)_m} \frac{z^m}{m!} \quad (1.366)$$

mit dem Pochhammer-Symbol

$$(a)_m = a(a+1)(a+2) \dots (a+m-1) \quad (1.367)$$

und

$$(a)_0 = 1 . \quad (1.368)$$

Da für die Γ -Funktion mit

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad (1.369)$$

gilt

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (1.370)$$

können wir auch das Pochhammer-Symbol schreiben als

$$(a)_m = \frac{\Gamma(a+m)}{\Gamma(a)} \quad (1.371)$$

Für ϕ_1 und ϕ_2 aus (1.352) finden wir somit

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \alpha_0 \varrho^\gamma {}_1F_1(1-n', 2\gamma+1; \varrho) \quad , \\ \Phi_2 &= \beta_0 \varrho^\gamma {}_1F_1(-n', 2\gamma+1; \varrho) = \frac{\kappa - \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda}}{n'} \alpha_0 \varrho^\gamma {}_1F_1(-n', 2\gamma+1; \varrho) \quad . \end{aligned} \quad (1.372)$$

α_0 bestimmt sich aus der Normierungsbedingung der Radialfunktionen. Die konfluente hypergeometrische Funktion ${}_1F_1(a, b; z)$ divergiert asymptisch für $z \rightarrow \infty$ exponentiell, sofern a und b beliebig vorgebar sind. Damit aber die Wellenfunktionen normierbar bleiben, müssen wir fordern, daß die Reihen für ϕ_1 und ϕ_2 abbrechen. Damit reduzieren sich die hypergeometrischen Funktionen zu Polynomen. Dies wird nur erreicht, wenn n' eine nichtnegative ganze Zahl ist, d.h. $n' = 0, 1, 2, \dots$. Wir definieren nun eine Hauptquantenzahl

$$n = n' + |\kappa| = n' + j + \frac{1}{2} \quad (1.373)$$

mit $n = 1, 2, 3, \dots$. Damit können wir aus (1.356) den Energieeigenwert ermitteln. Es ist

$$\frac{Z\alpha E}{[m^2 c^4 - E^2]^{1/2}} = n' + \gamma = n - j - \frac{1}{2} + \gamma \quad (1.374)$$

Infolgedessen haben wir

$$\left[(Z\alpha)^2 + \left(n - j - \frac{1}{2} + \gamma \right)^2 \right] E^2 = m^2 c^4 \left(n - j - \frac{1}{2} + \gamma \right)^2 \quad (1.375)$$

und weiter

$$E = mc^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - j - \frac{1}{2} + \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - (Z\alpha)^2 \right]^{1/2} \right)^2} \right]^{-1/2} \quad (1.376)$$

Aus (1.375) resultiert eventuell auch ein negatives Vorzeichen der Energie, das aber ausgeschlossen werden muß, da es nicht die Ursprungsgleichung (1.374) befriedigt. In (1.374) ist die rechte Seite positiv. (1.376) ist die Sommerfeldsche Feinstrukturformel für die Energieeigenwerte von Elektronen im Coulomb-Potential von punktförmigen Kernen. Die Normierungsbedingung

$$\int_0^{\infty} (f^2 + g^2) r^2 dr = 1 \quad (1.377)$$

führt schließlich zu den normierten radialen Wellenfunktionen

$$\left. \begin{array}{l} g(r) \\ f(r) \end{array} \right\} = \pm \frac{(2\lambda)^{3/2}}{\Gamma(2\gamma + 1)} \left[\frac{(mc^2 \pm E) \Gamma(2\gamma + n' + 1)}{4mc^2 \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda} \left(\frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda} - \kappa \right) n'!} \right]^{1/2} \cdot (2\lambda r)^{\gamma-1} e^{-\lambda r} \\ \cdot \left\{ \left(\frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c \lambda} - \kappa \right) {}_1F_1(-n', 2\gamma + 1; 2\lambda r) \right. \\ \left. \pm n' {}_1F_1(1 - n', 2\gamma + 1; 2\lambda r) \right\} \quad . \quad (1.378)$$

Wir wollen jetzt die Sommerfeldsche Feinstrukturformel (1.376) etwas genauer betrachten. Die Energieeigenwerte hängen nur von der Hauptquantenzahl n , von $|\kappa| = j + \frac{1}{2}$ und von Z ab. Für verschwindendes Potential ($Z = 0$) ist der Energieeigenwert mc^2 . Die gebundenen Elektronenzustände schließen also an das bei mc^2 beginnende Kontinuum zu positiven Energien an. Durch das Anwachsen der Kopplungsstärke $Z\alpha$ treten Elektronenzustände in die Energielücke zwischen $+mc^2$ und $-mc^2$ als gebundene Zustände ein. Die Ionisationsgrenze eines Elektrons liegt offensichtlich bei mc^2 .

Die Bindungsenergie E_b eines Elektrons ist eine negative Größe. Sie ist gerade die Differenz zwischen dem Energieeigenwert E aus (1.376) und der Ruheenergie mc^2 ,

$$E_b = E - mc^2 \quad . \quad (1.379)$$

Für Zustände mit $j = \frac{1}{2}$ können Energieeigenwerte nur für $Z\alpha \leq 1$ berechnet werden, d.h. bis $Z \simeq 137$. Für $j = \frac{1}{2}$ und $n = 1$ folgt

$$E = mc^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{1 - (Z\alpha)^2} \right]^{-1/2} \quad , \quad (1.380)$$

also

$$E = mc^2 \sqrt{1 - (Z\alpha)^2} \quad . \quad (1.381)$$

Für $Z\alpha = 1$ ergibt sich $E = 0$ oder $E_b = -mc^2$. Mit wachsendem Z nimmt auch der Betrag der Bindungsenergie zu. Die Steigung dE/dZ wird bei $Z\alpha = 1$ für den $1s_{1/2}$ -Zustand mit $n =$

1, $l = 0$, $j = \frac{1}{2}$ minus unendlich. Formal wird für $Z\alpha > j + \frac{1}{2}$ die Energie imaginär. Demnach scheint es für punktförmige Kerne mit Ladungen größer als $Z = 1/\alpha \simeq 137$ keine gebundenen $ns_{1/2}$ - oder $np_{1/2}$ -Zustände mehr zu geben. Für $Z\alpha \ll 1$ können wir eine Entwicklung der Energieformel (1.376) durchführen.

$$E - mc^2 = -mc^2(Z\alpha)^2 \left\{ \frac{1}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^2}{2n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right\} . \quad (1.382)$$

Das erste Glied in (1.382) entspricht der Bohrschen Formel für die Bindungsenergie in wasserstoffartigen Atomen, wie sie aus der Schrödinger-Gleichung resultiert. Die Entartung der Niveaus zu gleichen $|\kappa|$ aber verschiedenem l bleibt bestehen. Beispielsweise haben der $2s_{1/2}$ - und der $2p_{1/2}$ -Zustand auch nach der Dirac-Theorie die gleiche Energie. Hingegen wird die Entartung zu gleichem n aber verschiedenem $|\kappa|$ aufgehoben. Beispielsweise haben der $2p_{1/2}$ - und der $2p_{3/2}$ -Zustand nach der Schrödinger-Theorie die gleiche Bindungsenergie, jedoch nicht nach der Dirac-Theorie. Die auftretende Energiedifferenz nennt man Feinstrukturaufspaltung. Zustände mit Spin \uparrow und Spin \downarrow sind auch nach der Dirac-Theorie für das Coulomb-Potential entartet. Beispielsweise gilt

$$E_{1s_{1/2}\uparrow} = E_{1s_{1/2}\downarrow} . \quad (1.383)$$

Die im Experiment zuweilen beobachtbare kleine Energiedifferenz zwischen diesen beiden Zuständen, die durch das magnetische Moment des Kerns bewirkt wird, nennt man Hyperfeinaufspaltung.

Ebenfalls wird im Experiment eine kleine Energiedifferenz zwischen dem $2s_{1/2}$ - und der $2p_{1/2}$ -Zustand empirisch festgestellt. Diese Energieaufspaltung, die dominanterweise durch quantenelektrodynamische Korrekturen bewirkt wird, nennt man Lamb-shift.

Aus (1.382) erkennt man, daß die relativistischen Korrekturen für die Energieniveaus im Coulombfeld von der Größenordnung $(Z\alpha)^2$ sind. Diese Korrekturen sind nur für kleine Hauptquantenzahlen und für schwere Kerne mit hohem Z bedeutsam. Weiterhin sei bemerkt, daß die relativistischen Wellenfunktionen $f(r)$ bzw. $g(r)$ für $|\kappa| = 1$ im Gegensatz zum nichtrelativistischen Fall eine schwache, aber quadratisch integrale Divergenz für $r = 0$ aufweisen.

Die relativistischen Korrekturen zur Grundzustandsenergie im Wasserstoff-artigen Uran betragen mehr als 10%. Die gegenwärtige relative Meßgenauigkeit im Experiment liegt bei etwa 10^{-4} . Eine Genauigkeit von 10^{-6} wird angestrebt. Ein genaues Verständnis der Atomstruktur ist ohne Einbeziehung relativistischer Effekte nicht möglich.

1.9 Lagrange-Formalismus für Felder

1.9.1 Die Euler-Lagrange-Gleichungen

In der klassischen Mechanik haben wir den Lagrange-Formalismus kennengelernt, der es erlaubt aus einer vorgegebenen Lagrange-Funktion und dem Hamiltonschen Prinzip der extremalen Wirkung die zugehörige Bewegungsgleichung herzuleiten. Das entsprechende Bindeglied zwischen der Lagrange-Funktion und den Bewegungsgleichungen sind dabei die allgemein hergeleiteten Euler-Lagrange-Gleichungen. Im folgenden werden wir den entsprechenden Formalismus für klassische Felder kennenlernen. Dazu werden wir uns eng an dem Vorbild der klassischen Mechanik orientieren und dadurch die entscheidenden Unterschiede und Erweiterungen beim Übergang zur klassischen Feldtheorie herausarbeiten. Das Ziel ist die Herleitung der Euler-Lagrange-Gleichungen für Felder und der zugehörigen Kontinuitätsgleichung sowie der damit verbundenen Erhaltungssätze. Die in diesem Formalismus gefundene Kontinuitätsgleichung ist ein Spezialfall des allgemeineren Noetherschen Theorems. Dieses besagt, daß jeder Transformation, die die Wirkung invariant läßt, eine Erhaltungsgröße zugeordnet werden kann. Die Ergebnisse, die wir hier für die klassische Feldtheorie erhalten werden, bleiben auch in den quantisierten Feldtheorien, wie der Dirac-Theorie, gültig.

In der klassischen Mechanik wird ein Teilchen durch die Angabe der generalisierten Koordinaten $q_i(t)$ und der kanonisch konjugierten Impulse $p_i(t)$ zu allen Zeiten beschrieben. Die Zeit t spielt dabei die Rolle einer unabhängigen Variable und die Zahl der generalisierten Koordinaten, man denke an die Ortskoordinaten, entspricht der Zahl der Freiheitsgrade des Teilchens. In der Feldtheorie hingegen beschreibt man ein Teilchen durch die Angabe von Feldern $\psi_i(x_\mu)$ zu allen Zeiten x_0 und an allen Orten \vec{x} . Man hat jetzt vier unabhängige Variablen, nämlich die Raumkoordinaten und die Zeit. Die Zahl der Freiheitsgrade spiegelt sich nun in der Zahl der für die Beschreibung des Teilchens notwendigen Felder ψ_i . Diese Entsprechung ist in der folgenden Tabelle gegenübergestellt.

Mechanik	Feldtheorie
1 unabhängige Variable, die Zeit	4 unabhängige Variablen, Raum und Zeit
generalisierte Koordinaten $q_i(t)$	Felder $\psi_i(x_\mu)$
Lagrange-Funktion $L = L(q_i(t), \partial_t q_i(t), t)$	Lagrange-Dichte $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\psi_i(x_\mu), \partial_\mu \psi_i(x_\mu), x_\mu)$
Hamilton-Prinzip: $\delta S = \int_1^2 dt \delta L = 0$	$\delta S = \int_1^2 d^4x \delta \mathcal{L} = 0$
Variation: $\delta L = \sum_i \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial(\partial_t q_i)} \delta(\partial_t q_i) \right\} + \partial_t L \delta t$	$\delta \mathcal{L} = \sum_i \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} \delta \psi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi_i)} \delta(\partial_\mu \psi_i) \right\} + \partial_\mu \mathcal{L} \delta x^\mu$
Euler-Lagrange-Gl.: $\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial(\partial_t q_i)} = 0$	$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi_i)} = 0$
Erhaltungssatz: $\frac{dE}{dt} = 0$	Kontinuitätsgl.: $\partial^\mu \Theta_{\mu\nu} = 0$
mit $E = L - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i$	mit $\Theta_{\mu\nu} = \mathcal{L} g_{\mu\nu} - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial^\mu \psi_i)} \partial_\nu \psi_i$

Die Grundannahme, die man in dieser Korrespondenz der Formalismen für die Mechanik und die Feldtheorie verwendet, ist die Allgemeingültigkeit des Hamiltonschen Wirkungs-Prinzips. Dieses muß in der klassischen Feldtheorie auf vier Dimensionen umgeschrieben werden, da die Wirkung sich durch Integration der Lagrange-Funktion bzw. Lagrange-Dichte über alle un-

abhängigen Variablen ergibt. Daraus ergibt sich zwingend aus dimensionalen Überlegungen, daß in der Feldtheorie die Lagrange-Funktion durch eine Lagrange-Dichte zu ersetzen ist. Die Wirkung sollte in beiden Theorien dieselbe Dimension besitzen, dann muß der Integrand im Fall der Feldtheorie zusätzlich die Dimension $[1/x^3]$ besitzen, also eine Dichte bezüglich der Raumkoordinaten sein. Die Variation ist in beiden Theorien die Summe der Variationen aller Größen, von denen die Lagrange-Funktion/Dichte abhängt, gewichtet mit den jeweils zugehörigen partiellen Ableitungen.

Bemerkung: $\delta S(x_i)$ bezeichnet die Variation des Funktionals S . Für die Funktionalvariation gelten die gleichen Regeln wie für die übliche Differentiation. Der Unterschied zur Ableitung einer Funktion liegt darin, daß die Funktionalvariation nicht punktweise erfolgt. Es wird ausgedrückt, wie das Funktional selbst durch die Verschiebung der Variablen x_i variiert wird.

Bis hierhin wurde lediglich das Hamiltonsche Prinzip von der klassischen Mechanik auf die klassische Feldtheorie übertragen und die Notation entsprechend der Typen der Theorien angepaßt. Im folgenden werden die Euler-Lagrange-Gleichungen für Felder hergeleitet, die den bekannten Bewegungsgleichungen aus der klassischen Mechanik entsprechen. Der Ausgangspunkt ist das Hamiltonsche Prinzip:

$$\delta S = \int_1^2 d^4x \delta \mathcal{L} = 0 \quad (1.384)$$

Es gilt daher, die Variation der Lagrange-Dichte näher zu bestimmen. Dies tun wir für eine Lagrange-Dichte, die nicht explizit von den unabhängigen Raum- und Zeit-Variablen x_μ abhängt:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L} &= \sum_i \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} \delta \psi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi_i)} \delta (\partial_\mu \psi_i) \right\} \\ &= \sum_i \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi_i)} \right) \right\} \delta \psi_i + \sum_i \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi_i)} \delta \psi_i \right) \end{aligned} \quad (1.385)$$

Unter dem Wirkungsintegral in Gl. (1.384) verschwindet der letzte Term, denn das Integral über die Divergenz kann mit dem Gaußschen Satz in ein geschlossenes Oberflächenintegral auf dem Rand übergeführt werden, das verschwindet, da auf dem Rand die Variation der Felder verschwindet.

Bemerkung: Alternativ kann man auch die erste Zeile in Gl. (1.385) als Integrand verwenden und partiell integrieren. Auch hier verschwindet der Randterm mit dem gleichen Argument.

Es verbleibt für das Wirkungsintegral:

$$\delta S = \sum_i \int_1^2 d^4x \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi_i)} \right) \right\} \delta \psi_i = 0 \quad (1.386)$$

Diese Beziehung ist aber für alle Felder i unabhängig und für jede Variation $\delta \psi_i$ zu erfüllen, so daß bereits der Integrand verschwinden muß. Man erhält die Euler-Lagrange-Gleichungen für

Felder:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi_i)} \right) = 0 \quad . \quad (1.387)$$

Dieser Satz von Feldgleichungen steht in totaler Analogie zu den Euler-Lagrange-Gleichungen aus der klassischen Mechanik. Deshalb konnten wir in der obigen Tabelle diese Gleichungen bereits aufschreiben, indem wir lediglich die Notation an die Erfordernisse der Feldtheorie angepaßt haben.

Bemerkung: Die verwendete Vertauschung $\delta(\partial_\mu \psi_i) = \partial_\mu(\delta \psi_i)$ ist nicht exakt. Grundsätzlich ist es nicht unwichtig, ob man die Variation des Funktionals ψ_i ableitet, oder das Funktional $\partial_\mu \psi_i$ variiert, denn die Differentiation wird jeweils an verschiedenen Koordinaten durchgeführt. Es handelt sich also in der obigen Herleitung um eine Näherung, die allerdings für *vernünftige* Felder, die am Rand schnell genug gegen Null gehen richtig ist. Das Ergebnis ändert sich jedoch nicht, wenn man die volle Beziehung verwendet, lediglich die Herleitung wird deutlich komplizierter. Die Berücksichtigung des Zusatzterms aus der Vertauschung und der expliziten Abhängigkeit der Lagrange-Dichte von den Raum- und Zeit-Koordinaten führt auf einen Term der identischen Struktur. Das zu Gl. (1.386) entsprechende Integral lautet dann ohne die verschwindenden Divergenzterme:

$$\delta S = \sum_i \int_1^2 d^4x \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi_i)} \right) \right\} (\delta \psi_i - \partial^\nu \psi_i \delta x_\nu) = 0 \quad . \quad (1.388)$$

Es ist einsichtig, daß der Zusatzterm die Variation der Koordinaten enthalten muß, da die jetzt berücksichtigte Vertauschung von Differentiation und Variation einer Verschiebung der Koordinaten vor oder nach der Differentiation entspricht. Auch in diesem Fall erhält man also wegen der Unabhängigkeit der Felder und der freien Variation derselben sowie der Koordinaten die Euler-Lagrange-Gleichungen (1.387).

1.9.2 Kontinuitätsgleichung

Wenn eine Lagrange-Dichte vorgegeben ist, kann man dazu eine entsprechende Kontinuitätsgleichung finden. Letztlich ist die Kontinuitätsgleichung eine Folge der Translationsinvarianz des Wirkungsintegrals. Dies wird im Zusammenhang mit dem Noetherschen Theorem deutlich werden. Zunächst betrachten wir die Größe

$$\Theta_{\mu\nu} = g_{\mu\nu} \mathcal{L} - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial^\mu \psi_i)} \partial_\nu \psi_i \quad . \quad (1.389)$$

Für den so definierten Energie-Impuls-Tensor gilt die Bilanzgleichung

$$\partial^\mu \Theta_{\mu\nu} = \partial_\nu \mathcal{L} - \sum_i \partial^\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial^\mu \psi_i)} \partial_\nu \psi_i \right)$$

$$\begin{aligned}
&= (\partial_\nu \mathcal{L})_{\text{ex}} + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} \partial_\nu \psi_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi_i)} \partial_\nu \partial_\mu \psi_i - \sum_i \partial^\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial^\mu \psi_i)} \partial_\nu \psi_i \right) \\
&= (\partial_\nu \mathcal{L})_{\text{ex}} + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_i} \partial_\nu \psi_i - \sum_i \partial^\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial^\mu \psi_i)} \right) \partial_\nu \psi_i \\
&= (\partial_\nu \mathcal{L})_{\text{ex}} \quad , \tag{1.390}
\end{aligned}$$

wobei der Index *ex* andeuten soll, daß hier ausschließlich nach der expliziten Abhängigkeit der Lagrange-Dichte von den Raum- und Zeit-Koordinaten differenziert wird. Erst wurde der Energie-Impuls-Tensor eingesetzt, dann das Differential auf die Lagrange-Dichte ausgeschrieben, die Produktregel verwendet, so daß sich der Divergenz-Term weghebt, und schließlich die Euler-Lagrange-Gleichung (1.387) ausgenutzt.

Man erkennt an diesem Ergebnis, daß unter der Voraussetzung, die Lagrange-Dichte hänge nicht explizit von den Raum- und Zeit-Koordinaten ab, die Bilanzgleichung (1.390) zu einer Kontinuitätsgleichung wird:

$$\partial^\mu \Theta_{\mu\nu} = 0 \quad . \tag{1.391}$$

Die explizite Abhängigkeit der Lagrange-Dichte von x_μ spielt daher die Rolle eines Quellterms. Der Kontinuitätsgleichung (1.391) entspricht die Erhaltungsgröße $P_\nu = \int_V d^3x \Theta_{0\nu}$, denn es gilt:

$$\begin{aligned}
\frac{dP_\nu}{dt} &= \int_V d^3x \frac{d\Theta_{0\nu}}{dt} = - \int_V d^3x \vec{\nabla} \cdot \vec{\Theta}_\nu \\
&= - \int_{\mathcal{O}} d\vec{\mathcal{O}} \cdot \vec{\Theta}_\nu \\
&= 0 \quad , \tag{1.392}
\end{aligned}$$

wobei die Kontinuitätsgleichung und der Gaußsche Satz genutzt wurden. Diese Erhaltungsgröße wird als Viererimpuls interpretiert.

1.9.3 Das Noether-Theorem

Wir haben im vorigen Abschnitt gesehen, daß man für eine vorgegebene Lagrange-Dichte eine Kontinuitätsgleichung und eine Erhaltungsgröße finden konnte. Es ist möglich, den Energie-Impuls-Tensor sowie andere Erhaltungssätze mit den Symmetrien des Wirkungsintegrals (1.386) gegenüber Variablentransformationen in Zusammenhang zu bringen. Dies ist der Inhalt des Noetherschen Theorems, das besagt:

Zu jeder Symmetrie des Wirkungsintegrals gegenüber kontinuierlichen Transformationen existiert ein Erhaltungssatz, der sich aus der Lagrange-Dichte bestimmen läßt.

Diesen Satz wollen wir im folgenden beweisen und daraus den bereits geratenen Energie-Impuls-Tensor (1.389) herleiten.

Dazu betrachten wir infinitesimale Transformationen der Koordinaten

$$x'_\mu = x_\mu + \delta x_\mu \equiv x_\mu + X_{\mu\nu} \delta\omega^\nu \quad . \quad (1.393)$$

Durch das so parametrisierte δx_μ ist eine beliebige Translation oder Drehung der Koordinaten möglich, so daß die tatsächliche Form der kontinuierlichen Transformation hier unspezifisch bleibt. Die Variation der Felder ist dann entsprechend

$$\delta\psi_i(x) = \psi'_i(x') - \psi_i(x) \equiv \Psi_{i\nu} \delta\omega^\nu \quad (1.394)$$

mit einer Transformationsmatrix $\Psi_{i\nu}$. Das Argument x steht für alle Koordinaten. Im folgenden wird außerdem die punktweise Variation verwendet:

$$\bar{\delta}\psi_i(x) = \psi'_i(x) - \psi_i(x) \quad , \quad (1.395)$$

bei der lediglich das Feld am gleichen Punkt variiert wird. Deshalb vertauscht diese punktweise Variation mit der Koordinatendifferentiation, d.h. es gilt:

$$\bar{\delta}(\partial_\mu \psi_i(x)) = \partial_\mu(\bar{\delta}\psi_i(x)) \quad , \quad (1.396)$$

was für die normale Variation in Gl. (1.394) nicht der Fall ist. Der Zusammenhang zwischen den beiden Typen von Variationen ist durch

$$\begin{aligned} \delta\psi_i(x) &= \psi'_i(x') - \psi_i(x) \\ &= \psi'_i(x) + \partial^\nu \psi'_i(x) \delta x_\nu - \psi_i(x) \\ &= \bar{\delta}\psi_i(x) + \partial^\nu \psi_i(x) \delta x_\nu \end{aligned} \quad (1.397)$$

gegeben. Diese Beziehung entsteht durch Taylor-Entwicklung unter Berücksichtigung der ersten Korrektur, was ausreichend ist, da wir lediglich infinitesimale Transformationen betrachten.

Bemerkung: Man erkennt hier die Struktur des Terms wieder, der in Gl. (1.388) hinzugefügt wurde, um die Vertauschung von Differentiation und Variation richtig zu berücksichtigen. Damit wird der hinzugefügte Term plausibel.

Nach diesen Vorbereitungen können wir mit dem eigentlichen Beweis beginnen. Die Voraussetzung des Noetherschen Theorems ist die Invarianz des Wirkungsintegrals unter den zuvor definierten Transformationen für ein beliebiges Integrationsvolumen, also

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{V'} d^4 x' \mathcal{L}'(x') - \int_V d^4 x \mathcal{L}(x) \\ &= \int_{V'} d^4 x' \delta\mathcal{L}(x) + \int_{V'} d^4 x' \mathcal{L}(x) - \int_V d^4 x \mathcal{L}(x) \\ &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (1.398)$$

Um zu sehen, wann dieser Ausdruck verschwindet, sind das Volumenelement mit der Jacobi-Determinanten in erster Ordnung der Taylorreihe zu transformieren

$$d^4x' = |\partial_\nu x'^\mu| d^4x = (1 + \partial_\mu(\delta x^\mu)) d^4x \quad (1.399)$$

und die Variation der Lagrange-Dichte wie in Gl. (1.397) durch die punktweise Variation auszudrücken:

$$\delta \mathcal{L}(x) = \bar{\delta} \mathcal{L}(x) + \partial^\nu \mathcal{L}(x) \delta x_\nu \quad . \quad (1.400)$$

Schließlich müssen wir die hier erscheinende punktweise Variation auf die punktweise Variation der Felder zurückführen. Dabei können wir uns die Kenntnis der Euler-Lagrange-Gleichungen (1.387) zunutze machen:

$$\bar{\delta} \mathcal{L}(x) = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial \psi_i(x)} \bar{\delta} \psi_i(x) + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\nu \psi_i(x))} \bar{\delta} (\partial_\nu \psi_i(x)) \quad .$$

Unter Verwendung der Vertauschungsrelation (1.396) und der Produktregel ergibt sich:

$$\begin{aligned} \bar{\delta} \mathcal{L}(x) &= \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial \psi_i(x)} \bar{\delta} \psi_i(x) + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\nu \psi_i(x))} \partial_\nu (\bar{\delta} \psi_i(x)) \\ &= \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial \psi_i(x)} \bar{\delta} \psi_i(x) \\ &\quad + \sum_i \partial_\nu \left(\frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\nu \psi_i(x))} \bar{\delta} \psi_i(x) \right) - \sum_i \partial_\nu \left(\frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\nu \psi_i(x))} \right) \bar{\delta} \psi_i(x) \\ &= \sum_i \partial_\nu \left(\frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\nu \psi_i(x))} \bar{\delta} \psi_i(x) \right) \quad , \end{aligned} \quad (1.401)$$

wobei im letzten Schritt die Euler-Lagrange-Gleichungen (1.387) verwendet wurden.

Wir setzen die Gln. (1.399), (1.400) und (1.401) in den Ausdruck für die Variation des Wirkungsintegrals (1.398) unter der Koordinatentransformation ein und erhalten in erster Ordnung der Taylor-Entwicklung:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_V d^4x \delta \mathcal{L}(x) + \int_V d^4x (1 + \partial_\nu(\delta x^\nu)) \mathcal{L}(x) - \int_V d^4x \mathcal{L}(x) \\ &= \int_V d^4x \left\{ \bar{\delta} \mathcal{L}(x) + \partial^\nu \mathcal{L}(x) \delta x_\nu + \mathcal{L}(x) \partial_\nu(\delta x^\nu) \right\} \\ &= \int_V d^4x \left\{ \sum_i \partial_\nu \left(\frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\nu \psi_i(x))} \bar{\delta} \psi_i(x) \right) + \partial^\nu (\mathcal{L}(x) \delta x_\nu) \right\} \\ &= \int_V d^4x \left\{ \partial_\nu \left(\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\nu \psi_i(x))} \bar{\delta} \psi_i(x) + \mathcal{L}(x) \delta x^\nu \right) \right\} \end{aligned} \quad (1.402)$$

Wir sehen, daß bis auf den Term, der die explizite Abhängigkeit der Lagrange-Dichte von den Koordinaten enthält, der Integrand die Divergenz eines Ausdrucks ist. Da das Integrationsvolumen beliebig vorausgesetzt wurde, muß bereits der Integrand selbst verschwinden, so daß eine

Bilanzgleichung folgt

$$\partial_\mu \left(\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial_\mu \psi_i(x))} (\delta \psi_i(x) - \partial_\beta \psi_i(x) \delta x^\beta) + \mathcal{L}(x) \delta x^\mu \right) = 0 \quad , \quad (1.403)$$

wobei wir Gl. (1.397) verwendet haben, um wieder die ursprüngliche Variation einzuführen. Aus der geforderten Invarianz des Wirkungsintegrals folgt daher eine Kontinuitätsgleichung:

$$\partial^\mu J_\mu(x) \equiv 0 \quad (1.404)$$

mit

$$J_\mu = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \delta \psi_i(x) - \left(\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \partial_\beta \psi_i(x) - g_{\mu\beta} \mathcal{L}(x) \right) \delta x^\beta \quad , \quad (1.405)$$

der ein Erhaltungssatz entspricht. $J_\mu(x)$ ist ein Strom, der einer Kontinuitätsgleichung genügt und $\int_V d^3x J_0(x)$ die zugehörige Erhaltungsgröße. Damit ist die Aussage des Noetherschen Theorems bewiesen. Gl. (1.404) erlaubt es uns, durch die Spezifizierung einer Transformation — d.h. durch die Bestimmung von δx_μ und $\delta \psi_i(x)$ — einen korrespondierenden Erhaltungssatz zu formulieren.

Möchte man konkrete Transformationen untersuchen und die entsprechenden Erhaltungsgrößen ermitteln ist es praktischer, die Parametrisierung der Variationen der Koordinaten (1.393) und der Felder (1.394) einzusetzen:

$$\begin{aligned} J_\mu &= \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \Psi_{i\nu} \delta \omega^\nu - \left(\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \partial_\beta \psi_i(x) - g_{\mu\beta} \mathcal{L}(x) \right) X_\nu^\beta \delta \omega^\nu \\ &= \left\{ \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \Psi_{i\nu} - \left(\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \partial_\beta \psi_i(x) - g_{\mu\beta} \mathcal{L}(x) \right) X_\nu^\beta \right\} \delta \omega^\nu \quad . \end{aligned} \quad (1.406)$$

Da die Forderung der Invarianz des Wirkungsintegrals unabhängig von der Transformation $\delta \omega^\nu$ sein muß, kann man einen Tensor definieren

$$\theta_{\mu\nu} := \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \Psi_{i\nu} - \left(\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^\mu \psi_i(x))} \partial_\beta \psi_i(x) - g_{\mu\beta} \mathcal{L}(x) \right) X_\nu^\beta \quad , \quad (1.407)$$

für den die Kontinuitätsgleichung

$$\partial^\mu \theta_{\mu\nu} = 0 \quad (1.408)$$

gilt.

1.9.4 Symmetrien

Wir wollen nun nachprüfen, ob der zuvor behauptete Zusammenhang des Energie-Impuls-Tensors (1.389) mit der Translationsinvarianz der Theorie tatsächlich durch das Noethersche Theorem hergeleitet wird. Im Fall einer Translation von Raum- und Zeit-Koordinaten gilt für die Parametrisierung der Variation (1.393) und (1.394)

$$X_{\nu}^{\beta} = g_{\nu}^{\beta} \quad (1.409)$$

und die Felder bleiben unverändert, so daß

$$\Psi_{i\nu} = 0 \quad (1.410)$$

gilt. Dann vereinfacht sich der Noethersche Tensor (1.407) zu

$$\Theta_{\mu\nu} = g_{\mu\nu} \mathcal{L}(x) - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}(x)}{\partial (\partial^{\mu} \psi_i(x))} \partial_{\nu} \psi_i(x) \quad , \quad (1.411)$$

was mit dem zuvor behaupteten Energie-Impuls-Tensor (1.389) übereinstimmt. Wir haben gezeigt, daß der Tensor $\Theta_{\mu\nu}$ in jeder translationsinvarianten Theorie der Kontinuitätsgleichung $\partial^{\mu} \Theta_{\mu\nu} = 0$ genügt und eine zugehörige Erhaltungsgröße $\int_V d^3x \Theta_{0\nu}$ enthält.

1.9.5 Lagrange-Dichten

Nachdem die Euler-Lagrange-Gleichungen für Felder bekannt sind können wir die Bewegungsgleichungen für einige Lagrange-Dichten herleiten.

Elektrodynamik

Beginnen wir mit den Feldern der Elektrodynamik

$$A_{\mu} = (\phi, \vec{A}) \quad . \quad (1.412)$$

Die zugehörige Lagrange-Dichte ist

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - j_{\mu} A^{\mu} \quad (1.413)$$

mit dem Feldtensor

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu} \quad . \quad (1.414)$$

Damit lautet die Lagrange-Dichte ausgeschrieben

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \{ \partial_{\nu} A_{\mu} \partial^{\mu} A^{\nu} - \partial_{\mu} A_{\nu} \partial^{\mu} A^{\nu} \} - j_{\mu} A^{\mu} \quad . \quad (1.415)$$

Die Euler-Lagrange-Gleichungen sind nach Gl. (1.387)

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_\eta)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\eta} \quad (1.416)$$

mit $\eta = 0, 1, 2, 3$, es handelt sich also um 4 Gleichungen. In der Lagrange-Dichte kommen bis auf den Stromterm nur Ableitungen der Felder vor, so daß die rechte Seite zu

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\eta} = -j^\eta \quad (1.417)$$

wird. Die linke Seite ist:

$$\begin{aligned} \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_\eta)} &= \frac{1}{2} \partial_\beta \frac{\partial}{\partial(\partial_\beta A_\eta)} (\partial_\nu A_\mu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu) \\ &= \frac{1}{2} \partial_\beta (\partial^\mu A^\nu \delta_\nu^\beta \delta_\mu^\eta + \partial^\nu A^\mu \delta_\mu^\beta \delta_\nu^\eta - \partial^\mu A^\nu \delta_\mu^\beta \delta_\nu^\eta - \partial^\mu A^\nu \delta_\mu^\beta \delta_\nu^\eta) \\ &= \frac{1}{2} \partial_\beta (\partial^\eta A^\beta + \partial^\eta A^\beta - \partial^\beta A^\eta - \partial^\beta A^\eta) \\ &= \partial_\beta (\partial^\eta A^\beta - \partial^\beta A^\eta) \\ &= \partial_\beta F^{\eta\beta} \quad , \end{aligned} \quad (1.418)$$

so daß die Bewegungsgleichungen

$$\partial_\beta F^{\beta\eta} = j^\eta \quad (1.419)$$

sind, was mit der kovarianten Schreibweise der Maxwell-Gleichungen identisch ist.

Dirac-Theorie

Im Fall der Dirac-Theorie für ein geladenes Fermion mit Masse m hat man zwei unabhängige Felder: ψ und $\bar{\psi}$. Hierbei ist $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$. Ausgehend von der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = i\hbar \bar{\psi} \gamma_\mu \partial^\mu \psi - mc \bar{\psi} \psi \quad (1.420)$$

Es ist nun möglich die Dirac-Gleichung mit Hilfe der Euler-Lagrange-Gleichungen für ψ oder $\bar{\psi}$ herzuleiten. Die für $\bar{\psi}$ lautet:

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{\psi})} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} \quad . \quad (1.421)$$

Da die Lagrange-Dichte von den Ableitungen von $\bar{\psi}$ nicht abhängt, ist die linke Seite identisch Null. Für die rechte Seite folgt:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} = i\hbar \gamma_\mu \partial^\mu \psi - mc \psi \quad . \quad (1.422)$$

Damit lautet die Bewegungsgleichung zu der obigen Lagrange-Dichte

$$(i\hbar\gamma_\mu\partial^\mu - mc)\psi = 0 \quad , \quad (1.423)$$

was mit der bekannten Dirac-Gleichung übereinstimmt.

Um einen zugehörigen Erhaltungssatz zu finden, benötigen wir nach Noether eine Symmetrie des Wirkungsintegrals oder der Lagrange-Dichte selbst. Wir versuchen die globale Transformation

$$\psi' = e^{-iQ\Theta}\psi \quad , \quad (1.424)$$

wobei Θ ein ortsunabhängiger Parameter ist. Dann folgt für die Lagrange-Dichte (1.420)

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\bar{\psi}', \psi') &= i\hbar\bar{\psi}'e^{iQ\Theta}\gamma_\mu\partial^\mu e^{-iQ\Theta}\psi - mc\bar{\psi}'e^{iQ\Theta}e^{-iQ\Theta}\psi \\ &= i\hbar\bar{\psi}\gamma_\mu\partial^\mu\psi - mc\bar{\psi}\psi \\ &= \mathcal{L}(\bar{\psi}, \psi) \quad . \end{aligned} \quad (1.425)$$

Das bedeutet, die Dirac-Lagrange-Dichte ist tatsächlich unter diesen Transformationen (man nennt sie globale U(1)-Transformation) invariant. Dann ist es auch das Wirkungsintegral und es muß einen zugehörigen Erhaltungssstrom geben, der einer Kontinuitätsgleichung genügt. Im Fall dieser globalen Transformation bleiben die Koordinaten unverändert, so daß in Gl. (1.393) $X_{\mu\nu} = 0$ gilt. Für die Transformation der Felder (1.394) gilt

$$\begin{aligned} \delta\psi &= \psi' - \psi = -iQ\Theta\psi \quad \text{also} \quad \Psi_\psi = -iQ\psi \quad \text{und} \\ \delta\bar{\psi} &= \bar{\psi}' - \bar{\psi} = iQ\Theta\bar{\psi} \quad \text{also} \quad \Psi_{\bar{\psi}} = iQ\bar{\psi} \quad , \end{aligned} \quad (1.426)$$

wobei $\delta\omega = \Theta$ gesetzt wurde. Dies ist ein freier Parameter, von dem der Strom nicht abhängt, so daß er im folgenden nicht mehr notiert wird. Der Erhaltungssstrom ergibt sich aus Gl. (1.406) zu

$$\begin{aligned} j_\mu &= \frac{\partial\mathcal{L}(x)}{\partial(\partial^\mu\psi(x))}\Psi_\psi + \frac{\partial\mathcal{L}(x)}{\partial(\partial^\mu\bar{\psi}(x))}\Psi_{\bar{\psi}} \\ &= i\bar{\psi}\gamma_\mu(-i)Q\psi \\ &= Q\bar{\psi}\gamma_\mu\psi \quad . \end{aligned} \quad (1.427)$$

Dieser Strom ist natürlich mit dem Dirac-Strom identisch. Wir prüfen nach, ob dieser durch das Noether-Theorem hergeleitete Strom tatsächlich einer Kontinuitätsgleichung genügt:

$$\begin{aligned} i\partial^\mu j_\mu &= i(\partial^\mu\bar{\psi})\gamma_\mu\psi + i\bar{\psi}\gamma_\mu\partial^\mu\psi \\ &= m\bar{\psi}\psi - m\bar{\psi}\psi \\ &= 0 \quad , \end{aligned} \quad (1.428)$$

was zu zeigen war. Man sieht, daß der Exponent Q in der globalen Transformation (1.424) als Ladung des Erhaltungssstroms interpretiert werden kann.

2 Zeitabhängige Störungstheorie

2.1 Gekoppelte Kanalgleichungen

Wir werden nun Situationen betrachten, bei denen der Hamilton-Operator explizit von der Zeit abhängt. Dies impliziert, daß es keine stationäre Lösungen der Schrödinger-Gleichung gibt. Zunächst werden wir uns auf zeitabhängige Ein-Elektron-Probleme in unseren Studien beschränken.

Der Grundgedanke der zeitabhängigen Störungstheorie und Diracschen Störungstheorie ist es, den Hamilton-Operator aufzuspalten in zwei Anteile,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t) \quad , \quad (2.1)$$

wobei der zeitabhängige Anteil $\mathcal{H}_1(t)$ klein ist. Für den zeitunabhängigen Anteil \mathcal{H}_0 gelte die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\mathcal{H}_0 u_k = E_k u_k \quad . \quad (2.2)$$

Aufgrund der Zeitabhängigkeit in $\mathcal{H}_1(t)$ werden Übergänge zwischen den Eigenzuständen u_k von \mathcal{H}_0 bewirkt.

Wir wollen die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lösen

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = \mathcal{H} \psi_i \quad . \quad (2.3)$$

$\psi_i(\mathbf{r}, t)$ beschreibt die Wellenfunktion des Elektrons i . Wir können $\psi_i(\mathbf{r}, t)$ entwickeln in den Eigenfunktionen $u_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$ der ungestörten zeitabhängigen Wellenfunktion. Die Entwicklungskoeffizienten $a_n(t)$ werden dabei von der Zeit abhängen. Haben wir es beispielsweise mit atomaren Streuprozessen zu tun, so beinhalten die u_n die diskreten gebundenen Zustände wie auch die Kontinuumszustände. Demzufolge lautet die Entwicklung

$$\psi_i(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_{in}(t) u_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad . \quad (2.4)$$

Wir setzen diesen Ansatz in (2.3) ein. Es resultiert

$$\begin{aligned} \sum_n i\hbar \dot{a}_{in}(t) u_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} + \sum_n a_{in}(t) E_n u_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} &= \sum_n a_{in}(t) (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t)) u_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \\ &= \sum_n a_{in}(t) (E_n + \mathcal{H}_1(t)) u_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad . \end{aligned} \quad (2.5)$$

Wir multiplizieren mit u_k^* und integrieren über den Raum. Dabei nutzen wir die Orthonormalität der u_n aus. Es folgt

$$i\hbar\dot{a}_{ik}e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} + a_{ik}(t)E_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} = a_{ik}(t)E_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} + \sum_n a_{in}(t)\langle k|\mathcal{H}_1(t)|n\rangle e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (2.6)$$

Dies ergibt schließlich für die Besetzungsamplituden $a_{ik}(t)$ des Zustandes k durch das Elektron i die Bewegungsgleichung

$$\dot{a}_{ik}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_{in}(t)\langle k|\mathcal{H}_1(t)|n\rangle e^{\frac{i(E_k - E_n)t}{\hbar}} \quad (2.7)$$

Dies ist ein unendlicher Satz linearer gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung für die Besetzungsamplituden. Der Satz (2.7) ist vollkommen äquivalent zur partiellen Differentialgleichung (2.3). Die entsprechenden Besetzungswahrscheinlichkeiten sind dann determiniert durch

$$P_{ik}(t) = |a_{ik}(t)|^2 \quad (2.8)$$

Insbesondere bei Streuprozessen ist die zeitabhängige Störung zumeist nur von kurzer Dauer. Für den Meßprozeß ist dann die asymptotische Besetzungswahrscheinlichkeit für $t \rightarrow \infty$ von Relevanz

$$P_{ik} = |a_{ik}(t = \infty)|^2 \quad (2.9)$$

Wir können eine Übergangsfrequenz ω_{kn} definieren durch

$$\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} \quad (2.10)$$

Die Anfangsbedingung zur Lösung des Differentialgleichungssystems (2.7) lautet

$$a_{ik}(t = -\infty) = \delta_{ik} \quad (2.11)$$

Dies heißt, in dem betrachteten Ein-Elektronen-Problem besetzt das Elektron anfangs den Zustand i mit der Wahrscheinlichkeit 1. Alle anderen Zustände sind unbesetzt.

In zeitabhängiger Störungstheorie nehmen wir nun an, daß in (2.7) auf der rechten Seite für die Amplituden a_{ik} stets die Bedingung (2.11) gilt. Somit haben wir also approximativ

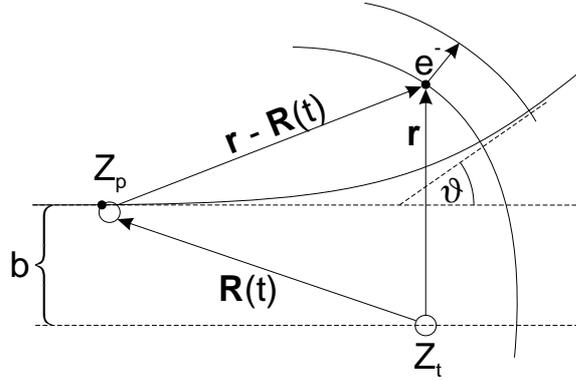
$$\dot{a}_{ik} = \frac{1}{i\hbar} \langle k|\mathcal{H}_1(t)|i\rangle e^{\frac{i(E_k - E_i)t}{\hbar}} \quad (2.12)$$

Diese entkoppelte gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung läßt sich formal lösen durch

$$a_{ik}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \langle k|\mathcal{H}_1(t')|i\rangle e^{\frac{i(E_k - E_i)t'}{\hbar}} dt' \quad (2.13)$$

Wieder gilt für die asymptotische Übergangswahrscheinlichkeit (2.9). In zeitabhängiger Störungstheorie wird die Wahrscheinlichkeitserhaltung und damit die Unitarität verletzt, da (2.11) gilt zusätzlich zur Übergangsamplitude (2.13).

Als einen konkreten physikalischen Prozeß, bei dem der Formalismus der gekoppelten Kanäle Anwendung findet, betrachten wir die Ion-Atom-Streuung.



In diesem Fall ist

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

mit

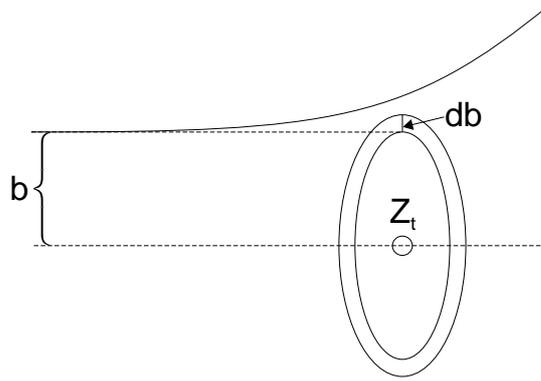
$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Z_t e^2}{r} \quad (2.15)$$

sowie

$$\mathcal{H}_1(t) = -\frac{Z_p e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|} \quad (2.16)$$

Die zeitabhängige Störung $\mathcal{H}_1(t)$, gegeben durch das Potential des Projektils mit der nuklearen Ladung $Z_p e$, bewirkt Anregungen des im Atom mit der nuklearen Ladung $Z_t e$ gebundenen Elektrons in höher liegende gebundene Zustände bzw. direkt in das Kontinuum. Im letzteren Fall sprechen wir von Ionisation. Der Stoßprozeß wird semiklassisch betrachtet, d.h. die Kernbewegung wird aufgrund der hohen Kernmasse klassisch behandelt, während die Elektronendynamik quantenmechanischer Natur ist. Die klassische Kernbahn ist durch $\mathbf{R}(t)$ bestimmt. Für $t \rightarrow -\infty$ bezeichnet der transversale Abstand den Stoßparameter b . Im Rahmen der klassischen Bewegung ist bei festgehaltenem Target mit der Ladung $Z_t e$ der Stoßparameter b eindeutig mit dem Streuwinkel θ des Ions verbunden. Die Übergangswahrscheinlichkeit P_{if} des Elektrons von einem Anfangszustand $|i\rangle$ zu einem Endzustand $|f\rangle$ hängt von dem Stoßparameter ab

$$P_{if}(b) = |a_{if}(b, t = \infty)|^2 \quad (2.17)$$



Studieren wir aber beispielsweise die Ionisationswahrscheinlichkeit, so müssen wir über alle Kontinuumszustände integrieren. Die Ionisationswahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$P(b) = \int_{E_1}^{E_2} |a_{if}(b, t = \infty)|^2 dE \quad . \quad (2.18)$$

Hierbei ist $E_2 = \infty$. Betrachten wir den Ionisationsprozeß im Rahmen der nichtrelativistischen Schrödinger-Theorie, so ist $E_1 = 0$. Im Fall der Dirac-Theorie haben wir die Ruheenergie hinzuzuaddieren, und es ist folglich $E_1 = mc^2$.

Ein Maß für die Stärke der Reaktion, d.h. zum Beispiel für die Ionisationsrate, ist der Wirkungsquerschnitt. Hierzu multiplizieren wir die Übergangswahrscheinlichkeit $P(b)$ mit der Kreisringfläche $dF = 2\pi b db$. Schließlich integrieren wir über alle Stoßparameter. Wir haben damit

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\infty} P(b) b db \quad . \quad (2.19)$$

Der Wirkungsquerschnitt hat die Dimension einer Fläche. Die Meßgröße des Wirkungsquerschnittes ist barn. Es ist

$$\dim \sigma = \text{b} \quad (2.20)$$

mit

$$1\text{b} = 10^{-28} \text{m}^2 = 100 \text{fm}^2 \quad . \quad (2.21)$$

Hierbei ist

$$1\text{fm} = 10^{-15} \text{m} \quad . \quad (2.22)$$

Der differentielle Ionisationswirkungsquerschnitt in bezug auf die Endzustandsenergie ist gegeben durch

$$\frac{d\sigma}{dE} = 2\pi \int_0^{\infty} b P_{if}(b) db \quad . \quad (2.23)$$

Hierbei fixiert f die Endzustandsenergie E . Wir können den differentiellen Wirkungsquerschnitt (2.23) auch in bezug auf den Stoßparameter b differentiell betrachten. Es ist

$$\frac{d\sigma}{dE db} = 2\pi b P_{if}(b) \quad . \quad (2.24)$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist eine Invariante. Differentielle Wirkungsquerschnitte hingegen hängen von der Wahl des Bezugssystems ab.

Bewegt sich das Projektil-Ion mit relativ langsamer Geschwindigkeit im Vergleich zur klassischen Umlaufgeschwindigkeit des Elektrons im Target-Atom, so behandelt man den Streuprozeß vorteilhaft in der adiabatischen Basis. Das Elektron kann sich hierbei relativ gut dem sich zeitlich veränderlichen Potential des Projektils anpassen. Es bilden sich quasimolekulare Zustände aus. Das Beiwort „quasi“ wird deswegen eingeführt, da sich eine geringe zeitliche Variation der Zustände ergibt. Wir gehen jetzt von einer neuen Basis aus. Diese ist gegeben durch die Eigenzustände des instantanen Hamilton-Operators. Wir haben

$$\mathcal{H}(t) u_n(t) = E_n(t) u_n(t) \quad . \quad (2.25)$$

Die exakte Wellenfunktion des Elektrons i befriedigt wieder die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = \mathcal{H}(t) \psi_i \quad . \quad (2.26)$$

Jetzt entwickeln wir die Wellenfunktion ψ_i in den adiabatischen Zuständen $u_n(t)$, dies sind die sogenannten Born-Oppenheimer-Zustände,

$$\psi_i = \sum_n a_{in}(t) u_n(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t E_n(t') dt' \right\} \quad . \quad (2.27)$$

t_1 kann willkürlich gewählt werden. Wir setzen zumeist $t_1 = -\infty$. Im Fall der zuvor diskutierten Ion-Atom-Streuung bestimmt sich $u_n(t)$ durch Lösung der Zwei-Zentren-Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Z_t e^2}{r} - \frac{Z_p e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|} \right) u_n(t, \mathbf{r}) = E_n(t) u_n(t, \mathbf{r}) \quad , \quad (2.28)$$

wobei die Zeit t die Rolle eines Parameters spielt. Die u_n bilden erneut einen vollständigen und orthonormalen Basissatz.

Wir setzen (2.27) in (2.26) ein. Es folgt

$$i\hbar \sum_n \dot{a}_{in}(t) u_n(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t E_n(t') dt' \right\}$$

$$\begin{aligned}
& +i\hbar \sum_n a_{in}(t) \frac{\partial u_n(t)}{\partial t} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t E_n(t') dt' \right\} \\
& +i\hbar \sum_n a_{in}(t) u_n(t) \left(-\frac{i}{\hbar} \right) E_n(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t E_n(t') dt' \right\} \\
& = \sum_n a_{in}(t) \mathcal{H}(t) u_n(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t E_n(t') dt' \right\} \\
& = \sum_n a_{in}(t) E_n(t) u_n(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t E_n(t') dt' \right\} .
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Damit haben wir

$$\sum_n \left[\dot{a}_{in}(t) u_n(t) + a_{in}(t) \frac{\partial u_n}{\partial t} \right] \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t E_n(t') dt' \right\} = 0 . \tag{2.30}$$

Wir multiplizieren von links mit u_k^* und integrieren über den gesamten Raum. Es resultiert

$$\dot{a}_{ik}(t) = - \sum_n a_{in}(t) \langle k | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t (E_n - E_k) dt' \right\} . \tag{2.31}$$

In diesem System gekoppelter Differentialgleichungen geht die Summe über alle Zustände, also auch über $n = k$. Hier können wir jedoch spezielle Betrachtungen anführen. Wir gehen aus von

$$\langle n | n \rangle = 1 . \tag{2.32}$$

Die Ableitung in bezug auf die Zeit liefert

$$\langle \dot{n} | n \rangle + \langle n | \dot{n} \rangle = 0 . \tag{2.33}$$

Die beiden Ausdrücke sind gerade komplex konjugiert zueinander. Dies bedingt, daß $\langle n | \dot{n} \rangle$ rein imaginär ist, d.h.

$$\langle n | \dot{n} \rangle = i\alpha(t) , \tag{2.34}$$

wobei $\alpha(t)$ reell ist. Wir führen nun eine Phasentransformation der $u_n(t)$ durch mittels

$$u'_n = u_n e^{i\gamma(t)} . \tag{2.35}$$

Mit dieser Phasentransformation können wir die Phase $\alpha(t)$ kompensieren, denn es ist

$$\langle n' | \dot{n}' \rangle = \langle n | \dot{n} \rangle + i\dot{\gamma} = i(\alpha + \dot{\gamma}) . \tag{2.36}$$

Die Phase der Eigenfunktionen ist zu jedem Zeitpunkt frei wählbar. Wir wählen

$$\gamma(t) = - \int_{t_1}^t \alpha(t') dt' \quad . \quad (2.37)$$

Dies bewirkt für das Diagonalmatrixelement

$$\langle n' | \dot{n}' \rangle = 0 \quad . \quad (2.38)$$

Damit können wir in (2.31) den Term mit $k = n$ eliminieren, und wir haben

$$\dot{a}_{ik}(t) = - \sum_{n \neq k} a_{in}(t) \langle k | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t (E_n - E_k) dt' \right\} \quad . \quad (2.39)$$

Mit Hilfe des Hellmann-Feynmann-Theorems läßt sich das Matrixelement $\langle k | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle$ noch etwas umformen, so daß es leichter berechenbar ist. Wir differenzieren die Eigenwertgleichung $\mathcal{H}(t) u_n(t) = E_n(t) u_n(t)$ in bezug auf die Zeit t . Es folgt

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} u_n + \mathcal{H} \frac{\partial u_n}{\partial t} = \frac{\partial E_n}{\partial t} u_n + E_n \frac{\partial u_n}{\partial t} \quad . \quad (2.40)$$

Wir multiplizieren von links mit u_k^* mit $k \neq n$ und integrieren über die Raumkoordinaten. Es folgt

$$\langle k | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} | n \rangle + E_k \langle k | \dot{n} \rangle = \frac{\partial E_n}{\partial t} \underbrace{\langle k | n \rangle}_{=0} + E_n \langle k | \dot{n} \rangle \quad . \quad (2.41)$$

Dies führt schließlich auf

$$\langle k | \dot{n} \rangle = \frac{\langle k | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} | n \rangle}{E_n - E_k} \quad . \quad (2.42)$$

Mit diesen Hellmann-Feynman-Theorem haben wir die Zeitableitung von der Wellenfunktion auf den Hamilton-Operator transferiert. Gilt wieder

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t) \quad , \quad (2.43)$$

so haben wir

$$\langle k | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle = \frac{1}{E_n - E_k} \langle k | \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial t} | n \rangle \quad . \quad (2.44)$$

Der Anfangswert für das gekoppelte Kanalsystem (2.39) lautet wieder

$$a_{in}(t = -\infty) = \delta_{in} \quad , \quad (2.45)$$

d.h. vor Beginn des Streuprozesses ist nur der Zustand $n = i$ besetzt.

In zeitabhängiger Störungstheorie nehmen wir erneut an, daß (2.45) stets gilt. Alle Kopplungen innerhalb der Kanäle werden abgeschaltet. Damit reduziert sich (2.39) auf

$$\dot{a}_{ik} = - \left\langle k \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| i \right\rangle \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^t (E_i - E_k) dt' \right\} . \quad (2.46)$$

Zur Lösung dieser Differentialgleichung integrieren wir. Es folgt mit $k = f$

$$a_{if}(t) = - \int_{t_1}^t \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| i \right\rangle \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \int_{t_2}^{t'} (E_i - E_f) dt'' \right\} dt' . \quad (2.47)$$

Hierbei setzen wir $t_1 = t_2 = -\infty$. Erneut gilt für die asymptotische Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{if} = |a_{if}(t = \infty)|^2 . \quad (2.48)$$

2.2 Unitaritätsrelationen der Besetzungsamplituden

Wir betrachten in der Born-Oppenheimer-Basis die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_i = \mathcal{H} \phi_i . \quad (2.49)$$

Es gilt die Entwicklung

$$\phi_i(t) = \sum_j a_{ij}(t) \varphi_j e^{-i\chi_j(t)} \quad (2.50)$$

mit der Phase

$$\chi_j(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' E_j(t') . \quad (2.51)$$

Die untere Grenze des Integrals kann frei gewählt werden, dies entspricht einer frei wählbaren Phasentransformation. Als Anfangsbedingung gilt

$$\phi_i(t \rightarrow -\infty) = \varphi_i . \quad (2.52)$$

Die adiabatischen Basisfunktionen φ_i bilden zu jedem Zeitpunkt einen vollständigen und orthonormalen Satz. Ebenso bilden aber auch die Lösungen $\phi_i(t)$ der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung zu jedem Zeitpunkt einen vollständigen und orthonormalen Basissatz. Dies ist eine Folgerung der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators. Es ist

$$\langle \phi_j(t) | \phi_i(t) \rangle = \langle \varphi_j(-\infty) | U^+(t, -\infty) U(t, -\infty) | \varphi_i(-\infty) \rangle = \delta_{ij} . \quad (2.53)$$

Aus dieser Relation lassen sich Eigenschaften der Einteilchenamplituden a_{ij} ableiten. Wir setzen die Entwicklung (2.50) in das Matrixelement (2.53) ein. Dies ergibt

$$\begin{aligned}
\langle \phi_j | \phi_i \rangle &= \left\langle \sum_k a_{jk} \varphi_k e^{-i\chi_k} \middle| \sum_{k'} a_{ik'} \varphi_{k'} e^{-i\chi_{k'}} \right\rangle \\
&= \sum_{k,k'} \langle \varphi_k | \varphi_{k'} \rangle e^{i\chi_k} e^{-i\chi_{k'}} a_{jk}^* a_{ik'} \\
&= \sum_{k,k'} \delta_{kk'} e^{i\chi_k} e^{-i\chi_{k'}} a_{jk}^* a_{ik'} \quad .
\end{aligned} \tag{2.54}$$

Hieraus erhalten wir

$$\sum_k a_{jk}^* a_{ik} = \delta_{ij} \quad . \tag{2.55}$$

Unter Verwendung anderer Buchstaben können wir auch schreiben

$$\sum_i a_{ki}^* a_{li} = \delta_{kl} \quad . \tag{2.56}$$

Wir betrachten die Unitaritätsrelation der Besetzungsamplituden nochmals von anderer Warte.

Wir schreiben

$$a_{ij}(t) = \sum_k U_{jk} a_{ik}(t_0) \tag{2.57}$$

mit der Anfangsbedingung

$$a_{ik}(t_0) = \delta_{ik} \quad . \tag{2.58}$$

Unitarität des Zeitentwicklungsoperators bedingt

$$U_{ij} = U_{ji}^{-1*} \quad . \tag{2.59}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
\sum_i a_{ki}^* a_{li} &= \sum_{i,r,s} U_{ir}^* a_{kr}^*(t_0) U_{is} a_{ls}(t_0) = \sum_{i,r,s} U_{ir}^* \delta_{kr} U_{is} \delta_{ls} \\
&= \sum_i U_{ik}^* U_{il} = \sum_i U_{ki}^{-1} U_{il} = (U^{-1}U)_{kl} = \delta_{kl} \quad .
\end{aligned} \tag{2.60}$$

Ebenso folgt aber auch

$$\begin{aligned}
\sum_i a_{ik}^* a_{il} &= \sum_{i,r,s} U_{kr}^* a_{ir}^*(t_0) U_{ls} a_{is}(t_0) \\
&= \sum_i U_{ki}^* U_{li} = \sum_i U_{li} U_{ki}^* = (UU^{-1})_{lk} = \delta_{lk} \quad .
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Also haben wir bezüglich der Spalten und der Zeilen eine Unitaritätsrelation

$$\sum_i a_{ki}^* a_{li} = \delta_{kl} \quad , \tag{2.62}$$

$$\sum_i a_{ik}^* a_{il} = \delta_{kl} \quad . \tag{2.63}$$

2.3 Fermi's Goldene Regel

Wir wollen jetzt einen Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ableiten, der zur Anwendung kommt, wenn wir Übergangsraten in Quantensystemen ermitteln wollen. Ein typisches Anwendungsbeispiel ist die Berechnung atomarer Übergangszeiten. In erster Ordnung Störungstheorie gilt bei Verwendung der stationären Basis für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t dt' \langle f | \mathcal{H}_1(t') | i \rangle \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t' \right\} \right|^2 . \quad (2.64)$$

Findet der Meßprozeß nach Ablauf der Störung statt, so wird für die Zeiten nach der Störung die Übergangswahrscheinlichkeit unabhängig von t . Wir kürzen jetzt ab

$$H_{fi}(t') = \langle f | \mathcal{H}_1(t') | i \rangle . \quad (2.65)$$

Damit haben wir für $t \rightarrow \infty$

$$P_{if} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt' H_{fi}(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} E_{fi} t' \right\} \right|^2 \quad (2.66)$$

mit

$$E_{fi} = E_f - E_i . \quad (2.67)$$

In (2.66) steht im wesentlichen das Fourier-Integral der Störung. Es ist

$$H_{fi}(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE H_{fi}(E) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Et \right\} \quad (2.68)$$

und

$$H_{fi}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt H_{fi}(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Et \right\} . \quad (2.69)$$

Damit können wir die Übergangswahrscheinlichkeit (2.66) in erster Ordnung Störungstheorie auch schreiben als

$$P_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} |H_{fi}(E)|^2 . \quad (2.70)$$

P_{fi} ist nur dann von Null verschieden, wenn die Energie $E_f - E_i = E_{fi}$ im Fourier-Spektrum der Störung enthalten ist. Die Anwendung erster Ordnung Störungstheorie ist aber nur dann sinnvoll, wenn gilt

$$P_{fi} \ll 1 . \quad (2.71)$$

Wir wollen nun eine zeitlich konstante Störung untersuchen, die zum Zeitpunkt $t = 0$ eingeschaltet wird und am Zeitpunkt $t = t_s$ wieder abgeschaltet wird. Damit haben wir

$$\mathcal{H}_1(t) = \mathcal{H}_1 \Theta(t) \Theta(t_s - t) \quad . \quad (2.72)$$

Spezielle Ein- und Ausschaltvorgänge vernachlässigen wir. Die Übergangswahrscheinlichkeit wird bestimmt durch das Übergangsmatrixelement $\langle f | \mathcal{H}_1 | i \rangle$ und von dem zeitabhängigen Gewichtsfaktor $F_t(E_{fi})$. Mit diesen vereinfachten Annahmen können wir den Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit schreiben als

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | \mathcal{H}_1 | i \rangle|^2 F_t(E_{fi}) \quad (2.73)$$

mit

$$F_t(E) = \Theta(t) [\Theta(t_s - t) G_t(E) + \Theta(t - t_s) G_{t_s}(E)] \quad . \quad (2.74)$$

Hierbei ist

$$G_t(E) = \left| \int_0^t dt' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Et' \right\} \right|^2 = \left| \frac{e^{\frac{i}{\hbar} Et} - 1}{\frac{i}{\hbar} E} \right|^2 = 2\hbar^2 \frac{1 - \cos(Et/\hbar)}{E^2} \quad . \quad (2.75)$$

Die Funktion $G_t(E)$ hat Nullstellen bei

$$E = n \frac{2\pi\hbar}{t} \quad (2.76)$$

mit $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ sowie ein ausgeprägtes Maximum bei $E = 0$. Mit der Regel von l'Hospital findet man den Funktionswert bei $E = 0$ durch

$$G_t(E = 0) = \lim_{E \rightarrow 0} 2\hbar^2 \frac{\frac{d^2}{dE^2} (1 - \cos(Et/\hbar))}{\frac{d^2}{dE^2} E^2} = t^2 \quad . \quad (2.77)$$

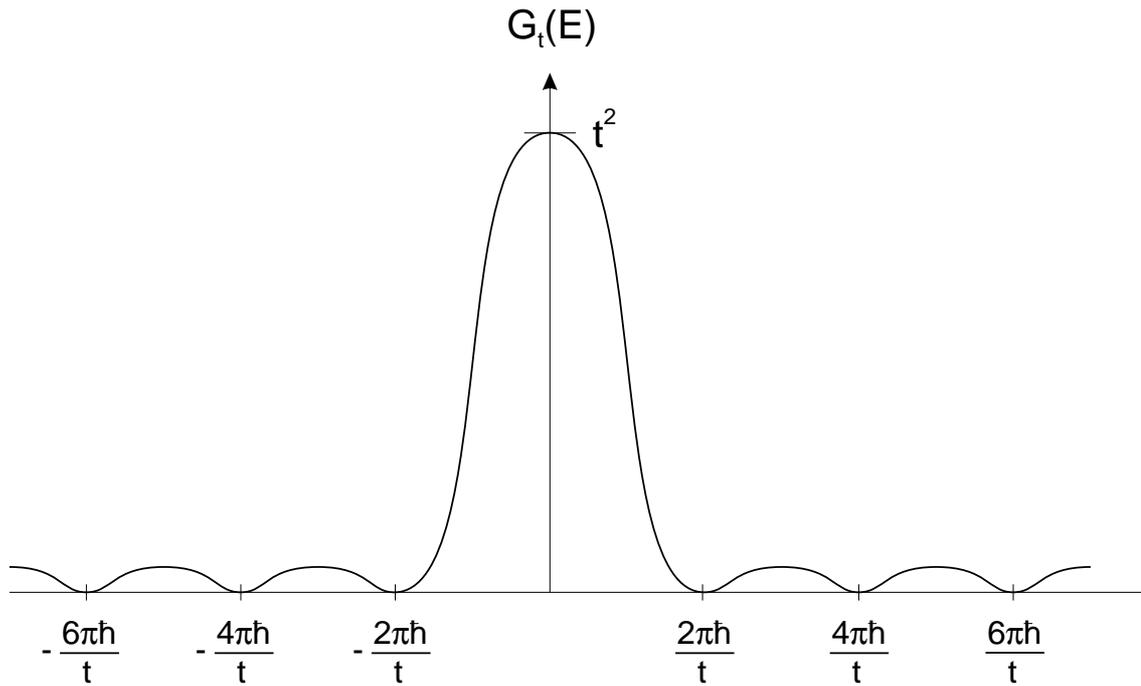
Die Abschätzung für die Halbwertsbreite liefert $\frac{2\pi\hbar}{t}$. Wir berechnen jetzt das folgende Integral

$$\frac{1}{2\pi\hbar t} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_t(E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{1 - \cos y}{y^2} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{\sin y}{y} \quad (2.78)$$

mit

$$y = \frac{Et}{\hbar} \quad . \quad (2.79)$$

Im letzten Schritt von (2.78) wurde partiell integriert.



Der Wert des Integrals in (2.78) ist π . Damit folgt

$$\frac{1}{2\pi\hbar t} \int_{-\infty}^{+\infty} dE G_t(E) = 1 \quad . \quad (2.80)$$

Ferner gilt für $E \neq 0$

$$\frac{G_t(E)}{2\pi\hbar t} \leq \frac{2\hbar}{\pi E^2 t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0 \quad . \quad (2.81)$$

Damit haben wir eine Darstellung der δ -Funktion gewonnen. Es ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar t} G_t(E) = \delta(E) \quad . \quad (2.82)$$

Hieraus lassen sich einige Schlußfolgerungen ziehen. Aus der Halbwertsbreite der Funktion $G_t(E)$ schließen wir, daß die Übergänge vorzugsweise zwischen Zuständen mit Energiedifferenzen aus dem Bereich

$$\Delta E_t \approx \frac{2\pi\hbar}{t} \quad (2.83)$$

stattfinden. Für $E_{fi} \neq 0$ oszilliert die Übergangswahrscheinlichkeit als Funktion von t mit der Periode

$$\tau = \frac{2\pi\hbar}{E_{fi}} \quad . \quad (2.84)$$

Wir führen noch die Übergangsrates als Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit ein.

Wir lassen jetzt nicht nur Übergänge in einen diskreten Zustand sondern Übergänge in ein kontinuierliches Spektrum zu. Wenn die Endzustände quasidicht liegen, dann wird sinnvollerweise

nicht nach dem Übergang in ein spezielles Niveau, sondern nach dem in ein bestimmtes Energieintervall zwischen E_f und $E_f + \Delta E_f$ gefragt. Wir führen hierzu die Zustandsdichte ϱ_0 des ungestörten Systems ein. Dabei ist $\varrho_0(E) dE$ gleich der Zahl der ungestörten Eigenzustände mit Energiewerten im Intervall zwischen E und $E + dE$. Bilden die Endzustände ein Kontinuum, so betrachten wir die Größe

$$P_{i,\Delta f}(t) = \int_{\Delta E_f} dE_f \varrho_0(E_f) P_{if}(t) \quad . \quad (2.85)$$

Wir wissen, daß für große Zeiten t und t_s die Funktion $P_{if}(t)$ scharf um $E_{fi} = 0$ konzentriert ist. Die Halbwertsbreite des zentralen Peaks wurde zu $\frac{2\pi\hbar}{t}$ abgeschätzt. Ist das Energieintervall ΔE_f deutlich breiter als der Peak, $\Delta E_f \gg \frac{2\pi\hbar}{t}$, dann können wir das Integral (2.85) von $-\infty$ bis $+\infty$ laufen lassen. Ferner ziehen wir zuvor als Näherung die Zustandsdichte sowie das Matrixelement vor das Integral. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} P_{i,\Delta f}(t) &= \varrho_0 \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | \mathcal{H}_1 | i \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE G_t(E) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \varrho_0 |\langle f | \mathcal{H}_1 | i \rangle|^2 t \quad . \end{aligned} \quad (2.86)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit bestimmt sich demnach als

$$\Gamma_{i,\Delta f} = \frac{2\pi}{\hbar} \varrho_0 |\langle f | \mathcal{H}_1 | i \rangle|^2 \quad . \quad (2.87)$$

Dies ist eine andere, häufig verwendete Version der Goldenen Regel.

Wir wollen nun den Spezialfall einer periodischen Störung behandeln. Dies ist insbesondere für Strahlungsübergänge in Atomen von besonderer Relevanz. Wir nehmen nun an, daß $\mathcal{H}_1(t)$ eine periodische Funktion der Zeit ist. Dies kann beispielsweise durch ein monochromatisches elektrisches Feld realisiert werden. Wir haben

$$\mathcal{H}_1(t) = \mathcal{H}_1 \Theta(t) \cos \omega t \quad . \quad (2.88)$$

Die Störung wird also bei $t_i = 0$ eingeschaltet, die Störzeit t_s ist aber unendlich. Damit erhalten wir für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P_{if}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \mathcal{H}_{fi}(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} E_{fi} t' \right\} \right|^2 \\ &= \frac{|\mathcal{H}_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \int_0^t dt' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (E_{fi} + \hbar\omega) t' \right\} + \int_0^t dt' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (E_{fi} - \hbar\omega) t' \right\} \right|^2 \\ &= \frac{1}{4} |\mathcal{H}_{fi}|^2 \left| \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (E_{fi} + \hbar\omega) t \right\} - 1}{E_{fi} + \hbar\omega} + \frac{\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (E_{fi} - \hbar\omega) t \right\} - 1}{E_{fi} - \hbar\omega} \right|^2 \quad . \end{aligned} \quad (2.89)$$

Jeder der beiden Summanden hat eine Struktur, die der Funktion $G_t(E)$ ähnelt. Für sehr große Zeiten t liefert der erste Summand einen Beitrag, der um $E_{fi} = -\hbar\omega$ konzentriert ist, während der des zweiten Summanden ein scharfes Maximum bei $E_{fi} = +\hbar\omega$ bewirkt. Die Übergangswahrscheinlichkeit setzt sich im wesentlichen aus zwei separierten Anteilen zusammen. Im ersten Fall mit $E_f > E_i$ und $\omega > 0$ dominiert der zweite Summand, und es gilt dominanterweise

$$E_f \simeq E_i + \hbar\omega \quad . \quad (2.90)$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit resultiert

$$P_{if}(t) = \frac{|\mathcal{H}_{fi}|^2}{4\hbar^2} G_t(E_{fi} - \hbar\omega) \quad . \quad (2.91)$$

Für die Übergangsrate folgt analog

$$\Gamma_{i,\Delta f} = \frac{\pi}{2\hbar} \varrho_0 |\langle f | \mathcal{H}_1 | i \rangle|^2 \quad . \quad (2.92)$$

Wenn die Frequenz ω der Störung gerade auf eine exakte Anregungsenergie $E_{fi} = E_f - E_i$ des ungestörten Systems trifft, werden Übergänge besonders wahrscheinlich. Es handelt sich um ein typisches Resonanzphänomen. Dies ist beispielsweise die Situation, wenn ein Photon auf ein Atom trifft.

In dem Fall $E_f < E_i$ und $\omega > 0$ dominiert der erste Summand in (2.89). Es gibt einen scharfen Peak für $E_{fi} = -\hbar\omega$. Wir haben also

$$E_f = E_i - \hbar\omega \quad (2.93)$$

Hierbei wird vom System die Energie $\hbar\omega$ emittiert. Im Fall der Resonanz mit $E_{fi} = \pm\hbar\omega$ kann die monochromatische Störwelle sowohl Absorption als auch Emission erzwingen.

2.4 Eine atomare Uhr für nukleare Reaktionszeiten

Als explizites Anwendungsbeispiel für die zeitabhängige Störungstheorie betrachten wir die Emissionswahrscheinlichkeit für hochenergetische Elektronen im Stoß sehr schwerer Ionen. Es wird angenommen, daß die beiden streuenden Atomkerne in Kontakt kommen und für eine gewisse Haftzeit T zusammenhängen, bevor es wieder zu einer Trennung der beiden Kerne kommt. Es soll aufgezeigt werden, wie auch relativ kurze Haftzeiten im Zeitbereich von $T \simeq 10^{-21}$ s durch die Messung der Energieverteilung der in das Kontinuum emittierten hochenergetischen Elektronen nachgewiesen werden können.

Um die prinzipielle Methodik zu erläutern, ist es hinreichend, sich auf zentrale nukleare Kollisionen mit dem Stoßparameter $b = 0$ zu beschränken. Für zentrale Stöße verschwinden auch Effekte, die mit der zeitlichen Winkeländerung der internuklearen Achse verbunden sind.

Ferner wollen wir idealisierend annehmen, daß der Energieverlust der Kerne aufgrund der Reaktionen vernachlässigbar ist, so daß der Eingangskanal von der Kernreaktion und der Ausgangskanal nach der Kernreaktion zeitgespiegelt zueinander sind. In zeitabhängiger Störungstheorie gilt für die komplexwertige Übergangsamplitude von einem anfänglichen gebundenen Zustand i in einen Endzustand f im Kontinuum

$$a_{if}(t) = - \int_{t_1}^t \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| i \right\rangle \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_2}^t (E_i - E_f) dt'' \right\} dt' . \quad (2.94)$$

Wir setzen jetzt

$$t_1 = -\infty , \quad (2.95)$$

$$t_2 = 0 . \quad (2.96)$$

Damit haben wir eine absolute Phase fixiert, die aber physikalisch irrelevant ist.

Ferner nutzen wir das Hellman-Feynman-Theorem aus

$$M = - \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| i \right\rangle = - \frac{1}{E_i - E_f} \left\langle f \left| \frac{\partial H}{\partial t'} \right| i \right\rangle . \quad (2.97)$$

Da es in Zentralstößen keine Rotationskopplungen gibt, können wir ferner mit dem internuklearen Abstand $R = R(t')$ schreiben

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} \quad (2.98)$$

mit

$$\dot{R} = \frac{dR}{dt'} . \quad (2.99)$$

Somit gilt für das Übergangsmatrixelement

$$M = -\dot{R} \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| i \right\rangle = -\frac{1}{E_i - E_f} \dot{R} \left\langle f \left| \frac{\partial H}{\partial R} \right| i \right\rangle . \quad (2.100)$$

Für die Phase schreiben wir abkürzend

$$\Phi(t') = \frac{1}{\hbar} \int_{t_2}^{t'} dt'' (E_i(t'') - E_f(t'')) . \quad (2.101)$$

Damit erhalten wir in zeitabhängiger Störungstheorie für die Übergangsamplitude nach dem Stoß mit $t \rightarrow \infty$

$$a_{if}(\infty) = \int_{-\infty}^0 dt M e^{-i\Phi(t)} + \int_0^T dt M e^{-i\Phi(t)} + \int_T^{\infty} dt M e^{-i\Phi(t)} . \quad (2.102)$$

Wir haben hierbei t' in t umbenannt. Der zweite Term auf der rechten Seite kennzeichnet den Anteil der Übergangsamplitude, der aus der nuklearen Haftzeit resultiert. Der erste Term beschreibt den einlaufenden Ast der Trajektorie, der letzte den auslaufenden Ast der Trajektorie. Das zweite Integral ergibt aber Null, da während der Kontaktphase der beiden Kerne der internukleare Abstand konstant ist und daher gilt $\dot{R} = 0$. Dabei haben von leichten Deformations- und Kompressionsmöglichkeiten beider Kerne abgesehen. Ferner gilt aufgrund der Konstanz von R

$$\left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| i \right\rangle = 0 \quad \text{für } 0 \leq t \leq T \quad . \quad (2.103)$$

Während der nuklearen Haftzeit gilt ebenfalls

$$E_{if} \equiv E_i(t) - E_f(t) = \text{const} \quad \text{für } 0 \leq t \leq T \quad . \quad (2.104)$$

Bezüglich des dritten Integrals in (2.102) führen wir eine Variablentransformation durch. Es ist

$$\tau = t - T \quad (2.105)$$

und daher

$$\frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial t} \quad . \quad (2.106)$$

Somit bekommen wir für die Phase

$$\begin{aligned} \Phi(t) &= \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_{if}(t'') dt'' \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_0^T E_{if}(t'') dt'' + \frac{1}{\hbar} \int_T^t E_{if}(t'') dt'' \\ &= E_{if} \frac{T}{\hbar} + \Phi(\tau) \quad . \end{aligned} \quad (2.107)$$

Die Variablentransformation (2.105) bedeutet ein Neustellen der Uhr für den auslaufenden Ast der Trajektorie. Für das dritte Integral in (2.102) folgt somit

$$\int_T^\infty dt M e^{-i\Phi(t)} = \int_0^\infty d\tau M e^{i(\Phi(\tau) + E_{if} \frac{T}{\hbar})} \quad . \quad (2.108)$$

Wir benennen jetzt wieder τ in t um und erhalten

$$a_{if}(\infty) = \int_{-\infty}^0 dt M e^{-i\Phi(t)} + \int_0^\infty dt M e^{-i\Phi(t)} e^{-iE_{if} \frac{T}{\hbar}} \quad . \quad (2.109)$$

Mit der Ersetzung

$$t' = -t \quad (2.110)$$

gilt

$$\Phi(t') = -\Phi(t) \quad (2.111)$$

und die Antisymmetrie

$$M(t') = -M(t) \quad . \quad (2.112)$$

Damit ist aber auch

$$\int_0^{\infty} dt M(t) e^{-i\Phi(t)} = - \int_{-\infty}^0 dt' M(t') e^{i\Phi(t')} \quad . \quad (2.113)$$

Zur Verifikation schreiben wir die rechte Seite um

$$\begin{aligned} & - \int_{-\infty}^0 dt' M(t') e^{i\Phi(t')} = - \int_{\infty}^0 (-dt) (-M(t)) e^{-i\Phi(t)} \\ & = - \int_0^{\infty} dt M(t) e^{-i\Phi(t)} = \int_0^{\infty} dt M(t) e^{-i\Phi(t)} \quad . \end{aligned} \quad (2.114)$$

Mit der Definition für die Übergangsamplitude auf dem einlaufenden Ast der Trajektorie

$$a'_{if} = \int_{-\infty}^0 dt M(t) e^{-i\Phi(t)} \quad (2.115)$$

bekommen wir

$$\int_0^{\infty} dt M(t) e^{-i\Phi(t)} = -a'^*_{if} \quad . \quad (2.116)$$

$M(t)$ ist reel. Da der ein- und auslaufende Ast der Trajektorie der zeitgespiegelten Situation entsprechen, impliziert die Zeitspiegelung bei der Übergangsamplitude ein Minusvorzeichen sowie eine komplexe Konjugation. Mit der Phasenverschiebung

$$\Delta\Omega = (E_i - E_f) \frac{T}{\hbar} \quad (2.117)$$

läßt sich die asymptotische Übergangsamplitude ausdrücken durch

$$a_{if}(\infty) = a'_{if} - \exp\{-i\Delta\Omega\} a'^*_{if} \quad . \quad (2.118)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$P_{if} = |a_{if}(\infty)|^2 \quad . \quad (2.119)$$

Wir setzen

$$a'_{if} = |a'_{if}| e^{i\alpha} \quad . \quad (2.120)$$

Dann ist

$$a_{if}(\infty) = |a'_{if}| \left(e^{i\alpha} - e^{-i\Delta\Omega} e^{-i\alpha} \right) \quad (2.121)$$

und

$$\begin{aligned}
P_{if} = |a_{if}(\infty)|^2 &= |a'_{if}|^2 |e^{i\alpha} - e^{-i\Delta\Omega - i\alpha}|^2 \\
&= |a'_{if}|^2 \left| e^{-i\frac{\Delta\Omega}{2}} \left(e^{i(\alpha + \frac{\Delta\Omega}{2})} - e^{-i(\alpha + \frac{\Delta\Omega}{2})} \right) \right|^2 \\
&= |a'_{if}|^2 \underbrace{\left| e^{-i\frac{\Delta\Omega}{2}} \right|^2}_1 \left| \underbrace{e^{i(\alpha + \frac{\Delta\Omega}{2})}}_X - \underbrace{e^{-i(\alpha + \frac{\Delta\Omega}{2})}}_{X^*} \right|^2 . \quad (2.122)
\end{aligned}$$

Es ist

$$X - X^* = 2i\Im X \quad (2.123)$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
|a_{if}(\infty)|^2 &= |a'_{if}|^2 \left(2\Im e^{i(\alpha + \frac{\Delta\Omega}{2})} \right)^2 \\
&= |a'_{if}|^2 4 \sin^2 \left(\alpha + \frac{\Delta\Omega}{2} \right) \quad (2.124)
\end{aligned}$$

Der Betrag des Sinus hat die Periode π . ΔE sei der Abstand zwischen zwei Maxima. Wir vernachlässigen für die qualitative Diskussion die Energieabhängigkeit von α . Dann erhalten wir aus dem Argument des Sinus

$$\frac{\Delta\Omega}{2} = \frac{\Delta E T}{\hbar} \frac{2}{2} = \pi \quad (2.125)$$

Dies führt auf

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar}{T} = \frac{h}{T} \quad (2.126)$$

Das Energiespektrum der in das Kontinuum emittierten Elektronen wird durch den Faktor $|a'_{if}|^2$ bestimmt. Dies führt global zu einem mit zunehmender Energie exponentiell abfallendem Spektrum. Überlagert wir dieses Spektrum von einem Faktor, der den Verlauf einer quadratischen Sinusfunktion hat. Dies führt zu Maxima im Elektronenspektrum sowie idealerweise auch zu Nulldurchgängen. Der Abstand zweier Maxima im Energiespektrum kann herangezogen, um die nukleare Kontaktzeit T zu determinieren. Auf diese Weise konnten nukleare Kontaktzeiten im Zeitbereich von $T = 10^{-21}$ s bestimmt werden.

3 Zweite Quantisierung

Dieses Kapitel befaßt sich mit der Quantisierung des Schrödinger-Feldes. Dieser Formalismus wird es uns erlauben, auch Vielteilchen-Probleme zu handhaben. Wesentlich bei der Diskussion der N -Teilchen-Systeme wird es sein zu differenzieren, ob die betrachteten Teilchen dem Pauli-Prinzip gehorchen oder nicht. Wir werden hierbei den Umgang mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sowie mit Anzahloperatoren von Teilchen kennenlernen. Die diskutierten

Methoden sind für alle quantisierten Mehrteilchensysteme von essentieller Bedeutung. Besonderes Augenmerk gilt als typisch quantenmechanisches Phänomen der Austauschwechselwirkung als direkte Konsequenz des Pauli-Prinzips und der Ununterscheidbarkeit der Teilchen. Elementare Vielteilchenmethoden werden behandelt.

3.1 Permutationen

Wir beginnen die Diskussion mit einer kurzen Studie von Zwei-Teilchen-Systemen. Der Hamilton-Operator des Gesamtsystems ist dann gegeben durch

$$H^{12} = h^1 + h^2 + h^{12} \quad . \quad (3.1)$$

Die Hamilton-Operatoren h^1 und h^2 der beiden Teilchensysteme haben die gleiche Form. Der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator h^{12} sei symmetrisch in den Teilchen 1 und 2. Dies kann beispielsweise die Coulomb-Wechselwirkung oder die Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen sein. Die Eigenwerte von h^1 und h^2 seien gleich

$$\begin{aligned} h^1 |u_a^1\rangle &= \varepsilon_a |u_a^1\rangle \quad , \\ h^2 |u_a^2\rangle &= \varepsilon_a |u_a^2\rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.2)$$

$|u_a^1\rangle$ sind Vektoren im unitären Raum \mathcal{U}^1 des Systems 1 und $|u_a^2\rangle$ solche im Raum \mathcal{U}^2 von 2. Die Energien des Gesamtsystems ohne Wechselwirkung sind determiniert durch

$$H_0^{12} = h^1 + h^2 \quad . \quad (3.3)$$

Es sind zwei Fälle zu unterscheiden

1. Die Systeme 1 und 2 befinden sich beide im gleichen Zustand $|u_a\rangle$. Dann ist

$$E_0 = 2\varepsilon_a \quad (3.4)$$

mit

$$|u_{E_0}\rangle = |u_a^1 u_a^2\rangle \quad . \quad (3.5)$$

2. Die Systeme 1 und 2 befinden sich in verschiedenen Zuständen $|u_a\rangle$ und $|u_b\rangle$. Die Gesamtenergie

$$E_0 = \varepsilon_a + \varepsilon_b \quad (3.6)$$

kann auf zwei verschiedenen Weisen realisiert werden. Entweder ist das System 1 im Zustand $|u_a\rangle$ und das System 2 im Zustand $|u_b\rangle$, oder es ist das System 1 im Zustand $|u_b\rangle$

und das System 2 im Zustand $|u_a\rangle$. Die Energie E_0 ist in diesem Fall entartet, es gehören zu ihr alle Linearkombinationen der Produktvektoren

$$\begin{aligned} |u_1\rangle &= |u_a^1 u_b^2\rangle \quad , \\ |u_2\rangle &= |u_b^1 u_a^2\rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.7)$$

Es ist somit

$$\begin{aligned} E_0 &= \varepsilon_a + \varepsilon_b \quad , \\ |u_{E_0}\rangle &= c_1 |u_a^1 u_b^2\rangle + c_2 |u_b^1 u_a^2\rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Diese Entartung der Gesamtenergie, die durch das Vertauschen der Systeme 1 und 2 bewirkt wird, nennt man Austauschentartung.

Betrachtet man nun den Gesamt-Hamilton-Operator H^{12} , so kann man den Einfluß der symmetrischen Störung $h^{12} = h^{21}$ näherungsweise in Schrödinger-Störungstheorie erfassen. Es tritt dabei das Matrixelement

$$h_{11} = \langle u_1 | h^{12} | u_1 \rangle = \langle u_a^1 u_b^2 | h^{12} | u_a^1 u_b^2 \rangle \quad (3.9)$$

auf, das man auch Wechselwirkungsintegral nennt. Ferner tritt das Matrixelement

$$h_{22} = \langle u_2 | h^{12} | u_2 \rangle = \langle u_b^1 u_a^2 | h^{12} | u_b^1 u_a^2 \rangle \quad (3.10)$$

auf. Durch Vertauschen der Nummerierung der Teilchensysteme $1 \longleftrightarrow 2$ folgt das Matrixelement $\langle u_b^2 u_a^1 | h^{21} | u_b^2 u_a^1 \rangle$. Aufgrund der auferlegten Symmetrien haben wir

$$h_{22} = h_{11} \quad . \quad (3.11)$$

Die Nichtdiagonalelemente in einer störungstheoretischen Betrachtung

$$h_{12} = \langle u_1 | h^{12} | u_2 \rangle = \langle u_a^1 u_b^2 | h^{12} | u_b^1 u_a^2 \rangle \quad (3.12)$$

nennt man Austauschenergie oder Austauschintegral. Es gilt

$$h_{21} = h_{12} \quad . \quad (3.13)$$

Diese Austauschenergie hebt die ursprüngliche Entartung der Zustände $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$ auf. Aufgrund der symmetrischen Störung h^{12} ergibt sich in niedrigster Ordnung Störungstheorie, daß sich die Gesamtwellenfunktion als Linearkombination

$$|u^\pm\rangle = A^\pm (|u_1\rangle \pm |u_2\rangle) \quad (3.14)$$

darstellen läßt. Der Faktor A^\pm bestimmt sich aus der Normierung

$$1 = \langle u^\pm | u^\pm \rangle = |A^\pm|^2 (\langle u_1 | u_1 \rangle + \langle u_2 | u_2 \rangle) = 2 |A^\pm|^2 \quad , \quad (3.15)$$

also

$$A^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad . \quad (3.16)$$

Damit lauten die Eigenvektoren von H in niedrigster Ordnung

$$|u^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_a^1 u_b^2\rangle \pm |u_b^1 u_a^2\rangle) \quad . \quad (3.17)$$

Es ist wichtig zu betonen, daß der Ansatz (3.14) aus der Störungstheorie niedrigster Ordnung \hbar^{12} resultiert und keineswegs exakt ist. Die allgemeine Gesamtwellenfunktion läßt sich nicht als eine derartig simple Linearkombination generieren. $|u^-\rangle$ läßt sich auch als Determinante

$$|u^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |u_a^1\rangle & |u_a^2\rangle \\ |u_b^1\rangle & |u_b^2\rangle \end{vmatrix} \quad (3.18)$$

schreiben. Diese Determinante nennt man Slater-Determinante. $|u^+\rangle$ ist symmetrisch, $|u^-\rangle$ antisymmetrisch gegenüber einer Teilchenvertauschung. Diese Symmetrie bzw. Antisymmetrie bleibt bei beliebig großer, symmetrischer Wechselwirkung bestehen.

Wir betrachten jetzt ein zusammengesetztes System, das aus N Teilchen besteht. Für jedes Teilsystem gilt derselbe Hamilton-Operator,

$$h^\nu |u_a^\nu\rangle = \varepsilon_a |u_a^\nu\rangle \quad (3.19)$$

mit $\nu = 1, 2, \dots, N$. ν numeriert die verschiedenen Teilsysteme durch, ε_a bezeichnet die verschiedenen Energiezustände. Wieder sehen wir von einer Entartung der ε_a ab. Für den Gesamt-Hamilton-Operator ohne Wechselwirkung gilt

$$H_0 = \sum_{\nu=1}^N h^\nu \quad . \quad (3.20)$$

Der Eigenvektor

$$|u_1\rangle = |u_a^1 u_b^2 \dots u_n^N\rangle \quad (3.21)$$

zum Eigenwert

$$E_0 = \varepsilon_a + \varepsilon_b + \dots + \varepsilon_n \quad (3.22)$$

liegt im Produktraum

$$U_N = U^1 \times U^2 \times \dots \times U^N \quad . \quad (3.23)$$

Dies heißt, das System 1 ist im Zustand $|u_a\rangle$, das System 2 ist im Zustand $|u_b\rangle$ und das System N ist im Zustand $|u_n\rangle$. Jede andere Verteilung der Systeme auf diese Zustände ist aber ebenfalls Eigenvektor von H_0 zum Eigenwert E_0 , z.B.

$$|u_2\rangle = |u_a^2 u_b^1 \dots u_n^N\rangle = |u_b^1 u_a^2 \dots u_n^N\rangle \quad . \quad (3.24)$$

Durch Permutationen der N Zahlen a, b, \dots, n erhält man insgesamt $N!$ Eigenvektoren zum Eigenwert E_0 , wenn die Zahlen a, b, \dots, n alle verschieden sind. Sind Sie nicht alle verschieden, sondern zerfallen sie in Gruppen von je N_1, N_2, \dots einander gleiche Zahlen ($N_1 + N_2 + \dots = N$), so erhält man durch Permutationen nur

$$t = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots} \quad (3.25)$$

verschiedenen Eigenvektoren $|u_1, u_2, \dots, u_t\rangle$ zu dem Eigenwert E_0 . Jede Linearkombination

$$|u_{E_0}\rangle = \sum_{\nu=1}^t c_\nu |u_\nu\rangle \quad (3.26)$$

ist ebenfalls Eigenvektor zu E_0 .

Wir wollen jetzt Permutationsoperatoren im unitären Raum einführen. Wir diskutieren zunächst zwei Teilsysteme und erweitern dann die Definition auf N Systeme. Der Permutationsoperator vertauscht die Teilsysteme 1 und 2. Die Observablen eines aus zwei Teilsystemen zusammengesetzten Systems sind durch Operatoren \mathcal{L}^{12} , z.B. $\mathcal{L}(\mathbf{x}^1, \mathbf{p}^1, \mathbf{s}^1; \mathbf{x}^2, \mathbf{p}^2, \mathbf{s}^2)$ gegeben. Wir definieren einen unitären Permutationsoperator $P_{(12)}$ durch

$$P_{(12)} \mathcal{L}^{12} P_{(12)}^+ = \mathcal{L}^{21} \quad . \quad (3.27)$$

Die zweimalige Anwendung der Permutation (12) erzeugt wieder die ursprüngliche Situation, daher ist

$$P_{(12)}^2 = 1 \quad . \quad (3.28)$$

Neben der Unitarität liegt gleichzeitig Hermitezität vor

$$P_{(12)}^+ = P_{(12)}^{-1} = P_{(12)} \quad . \quad (3.29)$$

Betrachtet man speziell den Projektionsoperator auf irgendeinen direkten Produktzustand $|v_k^1 v_l^2\rangle$,

$$\mathcal{L} = |v_k^1 v_l^2\rangle \langle v_k^1 v_l^2| \quad , \quad (3.30)$$

so ergibt sich aus (3.29)

$$|P_{(12)} v_k^1 v_l^2\rangle \langle P_{(12)} v_k^1 v_l^2| = |v_k^2 v_l^1\rangle \langle v_k^2 v_l^1| \quad . \quad (3.31)$$

Weil aber im direkten Produkt die Reihenfolge der Faktoren gleichgültig ist, $|v_k^2 v_l^1\rangle = |v_l^1 v_k^2\rangle$, erhalten wir bis auf einen Phasenfaktor, den wir eins setzen,

$$P_{(12)} |v_k^1 v_l^2\rangle = |v_l^1 v_k^2\rangle \quad . \quad (3.32)$$

Für die symmetrischen bzw. antisymmetrischen Zustände $|u^+\rangle$ bzw. $|u^-\rangle$ mit

$$|u^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|u_a^1 u_b^2\rangle \pm |u_b^1 u_a^2\rangle \right) \quad (3.33)$$

gilt demnach

$$P_{(12)} |u^\pm\rangle = \pm |u^\pm\rangle \quad . \quad (3.34)$$

Eine Observable \mathcal{L} ist symmetrisch gegenüber der Vertauschung $1 \leftrightarrow 2$, wenn

$$\mathcal{L}^{12} = \mathcal{L}^{21} \quad (3.35)$$

ist, d.h. wenn nach (3.27) und (3.29) \mathcal{L} mit $P_{(12)}$ vertauscht,

$$[\mathcal{L}, P_{(12)}] = 0 \quad . \quad (3.36)$$

Wir betrachten nunmehr N Teilsysteme. Für N Systeme gibt es auch $N!$ Permutationen und damit $N!$ unitäre Permutationsoperatoren. So resultiert für $N = 3$:

$$\begin{aligned} P_{(1)(2)(3)} &: 1 \rightarrow 1, 2 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 3 \\ P_{(123)} &: 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1 \\ P_{(132)} &: 1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \\ P_{(12)(3)} &: 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1, 3 \rightarrow 3 \\ P_{(13)(2)} &: 1 \rightarrow 3 \rightarrow 1, 2 \rightarrow 2 \\ P_{(23)(1)} &: 2 \rightarrow 3 \rightarrow 2, 1 \rightarrow 1 \quad . \end{aligned} \quad (3.37)$$

So gilt beispielsweise

$$P_{(132)} \mathcal{L}^{123} P_{(132)}^\dagger = \mathcal{L}^{312} \quad (3.38)$$

und genauso

$$P_{(132)} |v_k^1 v_l^2 v_m^3\rangle = |v_k^3 v_l^1 v_m^2\rangle = |v_l^1 v_m^2 v_k^3\rangle \quad . \quad (3.39)$$

Eine Observable $\mathcal{L}^{12\dots N}$ ist symmetrisch in allen N Systemen, wenn sie invariant gegen alle Permutationen ist. Dies bedingt die Vertauschbarkeit mit allen $N!$ Permutationsoperatoren,

$$[\mathcal{L}, P_\varrho] = 0 \quad (3.40)$$

mit $\varrho = 1, \dots, N!$.

Wir definieren einen Symmetrierungsoperator \mathcal{S} und einen Antisymmetrierungsoperator \mathcal{A} durch

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \frac{1}{N!} \sum_{\varrho=1}^{N!} P_{\varrho} \quad , \\ \mathcal{A} &= \frac{1}{N!} \sum_{\varrho=1}^{N!} (-1)^p P_{\varrho} \quad .\end{aligned}\tag{3.41}$$

Hierbei ist $(-1)^p = \pm 1$, je nachdem, ob P_{ϱ} eine gerade oder ungerade Permutation beschreibt. Für $N = 2$ folgt einfach

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \frac{1}{2}(1 + P_{(12)}) \quad , \\ \mathcal{A} &= \frac{1}{2}(1 - P_{(12)}) \quad .\end{aligned}\tag{3.42}$$

Multipliziert man \mathcal{S} oder \mathcal{A} mit irgendeinem Permutationsoperator P_{ϱ} , so läßt sich in den Summen

$$\begin{aligned}P_{\varrho} \mathcal{S} &= \frac{1}{N!} \sum_{\varrho'} P_{\varrho} P_{\varrho'} \quad , \\ P_{\varrho} \mathcal{A} &= \frac{1}{N!} \sum_{\varrho'} (-1)^P P_{\varrho} P_{\varrho'} \quad .\end{aligned}\tag{3.43}$$

jedes Produkt von Permutationen durch eine resultierende Permutation ersetzen, wobei dann die Summen wieder über alle $N!$ Permutationen laufen. Wir erhalten damit

$$\begin{aligned}P_{\varrho} \mathcal{S} &= \mathcal{S} P_{\varrho} = \mathcal{S} \quad , \\ P_{\varrho} \mathcal{A} &= \mathcal{A} P_{\varrho} = (-1)^P \mathcal{A} \quad .\end{aligned}\tag{3.44}$$

Die Operatoren \mathcal{S} und \mathcal{A} sind Projektionsoperatoren. Sie sind hermitesch

$$\begin{aligned}\mathcal{S}^+ &= \mathcal{S} \quad , \\ \mathcal{A}^+ &= \mathcal{A} \quad .\end{aligned}\tag{3.45}$$

In den Summen (3.41) bedeutet der Übergang von P_{ϱ} nach $P_{\varrho}^+ = P_{\varrho}^{-1}$ lediglich den Übergang zur inversen Permutation, bei dem gerade Permutationen gerade und ungerade Permutationen ungerade bleiben. Sie besitzen ferner die Einzeloperator-Eigenschaft

$$\begin{aligned}\mathcal{S}^2 &= \mathcal{S} \quad , \\ \mathcal{A}^2 &= \mathcal{A} \quad .\end{aligned}\tag{3.46}$$

Es gilt beispielsweise nach (3.44)

$$\mathcal{A}^2 = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho} (-1)^P \mathcal{A} P_{\varrho} = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho=1}^{N!} \mathcal{A} = \mathcal{A} \quad . \quad (3.47)$$

Für das Produkt $\mathcal{S}\mathcal{A}$ folgt nach (3.44)

$$\mathcal{S}\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho} P_{\varrho} \mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho} (-1)^P \mathcal{A} = 0 \quad , \quad (3.48)$$

weil es ebensoviel gerade wie ungerade Permutationen gibt. Damit haben wir

$$\mathcal{S}\mathcal{A} = \mathcal{A}\mathcal{S} = 0 \quad . \quad (3.49)$$

Die Projektionsoperatoren \mathcal{S} und \mathcal{A} projizieren vom gesamten unitären Raum U_N in die orthogonalen Teilräume U_N^+ und U_N^- . Es seien $|\varphi^+\rangle \in U_N^+$ und $|\varphi^-\rangle \in U_N^-$. Dann erhalten wir

$$\begin{aligned} |\varphi^+\rangle &= \mathcal{S}|\varphi\rangle \quad , \\ |\varphi^-\rangle &= \mathcal{A}|\varphi\rangle \end{aligned} \quad (3.50)$$

mit

$$\langle \varphi^+ | \varphi^- \rangle = 0 \quad . \quad (3.51)$$

Aus (3.44) folgt ferner

$$\begin{aligned} P_{\varrho} |\varphi^+\rangle &= |\varphi^+\rangle \quad , \\ P_{\varrho} |\varphi^-\rangle &= (-1)^P |\varphi^-\rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.52)$$

3.2 Identische Teilchen

In der Quantenmechanik müssen wir die Ununterscheidbarkeit der Teilchen in Rechnung stellen. Wir können keine Marken an den Teilchen anbringen, um sie einzeln zu identifizieren. Es gibt somit auch keine Observable, welche die Individualität der Teilchen fixiert. Dies impliziert, daß für ein System von N gleichen Teilchen alle Operatoren \mathcal{L} mit dem Permutationsoperator P_{ϱ} vertauschbar sein müssen,

$$[\mathcal{L}, P_{\varrho}] = 0 \quad (3.53)$$

für alle \mathcal{L} und $\varrho = 1, \dots, N!$. Bei unseren Betrachtungen gehen wir aus vom Ein-Teilchen-Raum U^i eines Elektrons i , der im nichtrelativistischen Rahmen selbst ein direktes Produkt der Räume U_B und U_s ist, die die Bahn- und Spingrößen des Elektrons beschreiben,

$$U^i = U_B \times U_s \quad . \quad (3.54)$$

Aus den Ein-Teilchen-Räumen konstruieren wir den direkten Produktraum

$$U_N = U^1 \times U^2 \times \dots \times U^N \quad . \quad (3.55)$$

Dieser Raum ist angemessen, wenn es sich um N verschiedene Teilchen handelt. Für ununterscheidbare Teilchen ist dieser Raum zu groß, denn die erlaubten Zustände können nur symmetrisch oder antisymmetrisch in den Teilchen sein.

Die Symmetrie sämtlicher Observabler \mathcal{L} gegenüber Permutation bedingt ferner, daß es keine Observable gibt, die von U_N^- nach U_N^+ oder umgekehrt führt.

Ist z.B. $|\varphi^-\rangle$ ein Vektor aus U_N^- , so ist $|\mathcal{L}\varphi^-\rangle$ ebenfalls ein Vektor aus U_N^- . Aus (3.53) folgt

$$\mathcal{A}\mathcal{L} = \mathcal{L}\mathcal{A} \quad , \quad (3.56)$$

und es ist daher

$$\mathcal{L}|\varphi^-\rangle = \mathcal{L}\mathcal{A}|\varphi\rangle = \mathcal{A}\mathcal{L}|\varphi\rangle \quad (3.57)$$

wieder ein Vektor aus U_N^- .

Da alle Vektoren von U_N^+ orthogonal auf jenen von U_N^- sind, verschwinden alle Matrixelemente

$$\langle \varphi^+ | \mathcal{L}\varphi^- \rangle = 0 \quad . \quad (3.58)$$

Aufgrund der Vertauschbarkeit des Hamilton-Operators H als Zeitentwicklungsoperator mit allen Permutationsoperatoren gilt auch: Befindet sich der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ eines Systems identischer Teilchen zur Zeit $t = t_0$ in U_N^- bzw. U_N^+ , so bleibt er zu allen späteren Zeiten in demselben Raum.

Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen dem symmetrischen und dem antisymmetrischen Raum ist stets Null. Ein bestimmtes System identischer Teilchen wird entweder im symmetrischen Raum U_N^+ oder im antisymmetrischen Raum U_N^- beschrieben.

Die Teilchen, die im symmetrischen Raum U_N^+ dargestellt werden, nennt man Bose-Teilchen oder Bosonen; jene, die im antisymmetrischen Raum U_N^- beschrieben werden, Fermi-Teilchen oder Fermionen. Die Empirie zeigt, daß Bosonen Teilchen mit ganzzahligem Spin ($s = 0, 1, 2, \dots$) und Fermionen Teilchen mit halbzahligem Spin ($s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$) sind. Dies ist auch Inhalt des fundamentalen Spin-Statistik Theorems von Pauli.

3.3 Der antisymmetrische Raum U_N^-

Für das Rechnen im antisymmetrischen Raum U_N^- der Fermionen sind Basisvektoren einzuführen. Sie werden aus Produkten der Einteilchenzustände konstruiert

$$|v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \cdots v_{k_N}^N\rangle = |v_{k_1}^1\rangle |v_{k_2}^2\rangle \cdots |v_{k_N}^N\rangle \quad . \quad (3.59)$$

Diese sind im unitären Raum U_N orthonormiert und vollständig

$$\langle v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | v_{k'_1}^1 \cdots v_{k'_N}^N \rangle = \delta(k_1, k'_1) \cdots \delta(k_N, k'_N) \quad , \quad (3.60)$$

$$\sum_{k_1, \dots, k_N} |v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N\rangle \langle v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N| dk_1 \dots dk_N = 1 \quad . \quad (3.61)$$

Wenden wir auf die Produktvektoren (3.59) den Antisymmetrisierungsoperator \mathcal{A} an, so erhalten wir antisymmetrische Zustände, die als Slater-Determinante geschrieben werden können

$$\mathcal{A} |v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \cdots v_{k_N}^N\rangle = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |v_{k_1}^1\rangle & |v_{k_2}^2\rangle & \cdots & |v_{k_1}^N\rangle \\ |v_{k_2}^1\rangle & |v_{k_2}^2\rangle & \cdots & |v_{k_2}^N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |v_{k_N}^1\rangle & |v_{k_N}^2\rangle & \cdots & |v_{k_N}^N\rangle \end{vmatrix} \quad . \quad (3.62)$$

Diese Vektoren sind noch nicht korrekt normiert. Zur Normierung ist es notwendig, den Faktor $\sqrt{N!}$ anzufügen,

$$\begin{aligned} |v_{k_1, k_2, \dots, k_N}^- \rangle &= \sqrt{N!} \mathcal{A} |v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \cdots v_{k_N}^N\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |v_{k_1}^1\rangle & |v_{k_1}^2\rangle & \cdots & |v_{k_1}^N\rangle \\ |v_{k_2}^1\rangle & |v_{k_2}^2\rangle & \cdots & |v_{k_2}^N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |v_{k_N}^1\rangle & |v_{k_N}^2\rangle & \cdots & |v_{k_N}^N\rangle \end{vmatrix} \quad . \end{aligned} \quad (3.63)$$

Man beachte, daß \mathcal{A} ein Projektionsoperator ist. Es gilt dann für das Skalarprodukt

$$\begin{aligned} \langle v_{k_1, \dots, k_N}^- | v_{k'_1, \dots, k'_N}^- \rangle &= N! \langle \mathcal{A} v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | \mathcal{A} v_{k'_1}^1 \cdots v_{k'_N}^N \rangle \\ &= N! \langle v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | \mathcal{A} v_{k'_1}^1 \cdots v_{k'_N}^N \rangle \\ &= \begin{vmatrix} \langle v_{k_1} | v_{k'_1} \rangle & \cdots & \langle v_{k_1} | v_{k'_N} \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle v_{k_N} | v_{k'_1} \rangle & \cdots & \langle v_{k_N} | v_{k'_N} \rangle \end{vmatrix} \quad . \end{aligned} \quad (3.64)$$

Das bedingt

$$\langle v_{k_1, \dots, k_N}^- | v_{k'_1, \dots, k'_N}^- \rangle = \begin{vmatrix} \delta(k_1, k'_1) & \cdots & \delta(k_1, k'_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta(k_N, k'_1) & \cdots & \delta(k_N, k'_N) \end{vmatrix} \quad . \quad (3.65)$$

Damit ist der Hilbert-Raum-Vektor $|v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle$ auf eins normiert,

$$\langle v_{k_1, \dots, k_N}^- | v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle = 1 \quad . \quad (3.66)$$

Die Vektoren $|v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle$ kann man als Basissystem in dem antisymmetrischen Raum U_N^- verwenden. Ein beliebiger Vektor $|\varphi^- \rangle$ ist in dieser Basis entwickelbar. Aus der Entwicklung eines beliebigen Vektors $|\varphi \rangle$ im Raum U_N

$$|\varphi \rangle = \int \prod_{k_1, \dots, k_N} |v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N \rangle \langle v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | \varphi \rangle dk_1 \dots dk_N \quad (3.67)$$

folgt für einen Vektor $|\varphi^- \rangle = |\mathcal{A}\varphi \rangle$ im antisymmetrischen Raum die Darstellung

$$\begin{aligned} |\mathcal{A}\varphi \rangle &= \int \prod_{k_1, \dots, k_N} |v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N \rangle \langle v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | \mathcal{A}\varphi \rangle dk_1 \dots dk_N \\ &= \int \prod_{k_1, \dots, k_N} |v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N \rangle \langle \mathcal{A}v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | \mathcal{A}\varphi \rangle dk_1 \dots dk_N \quad . \end{aligned} \quad (3.68)$$

Hierbei haben wir die Eigenschaft $\mathcal{A}^2 = \mathcal{A}$ eines Projektionsoperators ausgenutzt. Wir multiplizieren diese Gleichung nochmals mit \mathcal{A} und erhalten

$$|\mathcal{A}\varphi \rangle = \int \prod_{k_1, \dots, k_N} |\mathcal{A}v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N \rangle \langle \mathcal{A}v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | \mathcal{A}\varphi \rangle dk_1 \dots dk_N \quad . \quad (3.69)$$

Dies impliziert, daß wir einen beliebigen Vektor $|\varphi^- \rangle$ des antisymmetrischen Raums nach den $|\mathcal{A}v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N \rangle$ entwickeln können. Es ist

$$\begin{aligned} &\int \prod_{k_1, \dots, k_N} |\mathcal{A}v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N \rangle \langle \mathcal{A}v_{k_1}^1 \cdots v_{k_N}^N | dk_1 \dots dk_N \\ &= \frac{1}{N!} \int \prod_{k_1, \dots, k_N} |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle \langle v_{k_1, \dots, k_N}^- | dk_1 \dots dk_N = 1 \quad . \end{aligned} \quad (3.70)$$

Durch analoge Überlegungen lassen sich mittels des Symmetrieoperators \mathcal{S} Basisvektoren $|u_{k_1, \dots, k_N}^+ \rangle$ im symmetrischen Raum U^+ bestimmen.

Eine direkte Konsequenz des antisymmetrischen Charakters der Wellenfunktion ist das Paulische Ausschließungsprinzip. Befinden sich Fermionen, die z.B. unter dem Einfluß eines gemeinsamen Potentialfeldes stehen, in den Einteilchenzuständen k_1, \dots, k_N , so ist ihr Zustandsvektor

$$|\Phi^- \rangle = |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle \quad (3.71)$$

eine Slater-Determinante in den Einteilchenvektoren. Diese Determinante verschwindet, wenn wenigstens zwei Einteilchenzustände gleich sind. Das Paulische Ausschließungsprinzip lautet:

Es ist unmöglich, daß sich zwei identische Fermionen in den gleichen Einteilchenzuständen befinden. Es kann also z.B. nicht eintreten, daß zwei Elektronen sich am selben Ort befinden und dieselbe Komponente des Spins in einer bestimmten Richtung besitzen oder daß zwei Elektronen in einem Atom in Zuständen mit denselben Quantenzahlen n, ℓ, m_ℓ, m_s auftreten. Historisch wurde zuerst das Pauli-Prinzip aufgestellt, dann fand man heraus, daß für Fermionen der antisymmetrische Charakter der Wellenfunktion vorliegt.

3.4 Der unitäre Raum U^-

Wir führen nun den unitären Raum U^- zu variabler Fermionenzahl ein. Wir hatten den Raum U_N^- eingeführt, der zu N Fermionen gehört, wobei N eine eindeutige feste Zahl ist. Diese Einschränkung der festen Teilchenzahl geben wir nun auf. Wir konstruieren aus den verschiedenen unitären Räumen U_N^- , die zu verschiedenen N gehören, einen größeren Raum U^- . Auf diese Weise gelangen wir zu einer Mehrteilchenquantentheorie. Die physikalischen Prozesse werden hierbei durch Teilchenvernichtung und Teilchenerzeugung beschrieben. Wir beginnen mit einem Raum U_0 , der aus einem Einheitsvektor $|0\rangle$ besteht. Dies ist der Vakuumzustand, der kein Teilchen enthält. Orthogonal dazu fügen wir den unitären Raum U_1 dazu, in dem alle Zustände eines Teilchens liegen. Ein Zustandsvektor in diesem größeren Raum hat dann die Komponentenzerlegung

$$|\Phi\rangle = |0\rangle \langle 0|\Phi\rangle + \int_k |v_k\rangle \langle v_k|\Phi\rangle dk \quad . \quad (3.72)$$

Hierbei gibt $|\langle 0|\Phi\rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß kein Teilchen vorhanden ist. $|\langle v_k|\Phi\rangle|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen im Zustand $|v_k\rangle$ vorliegt. Bei mehreren Teilchen müssen wir zwischen Bosonen und Fermionen unterscheiden. Wir wollen es zunächst bei der Diskussion von Fermionen belassen. Im nächsten Schritt werden die antisymmetrischen Zweiteilchenzustände $|v_{k_1, k_2}^- \rangle$ aus U_2^- orthogonal angefügt. Bei mehreren Teilchen wird weiter so verfahren. So konstruieren wir den unitären Raum U^- ,

$$U^- = U_0 + U_1 + U_2^- + \dots + U_N^- + \dots \quad . \quad (3.73)$$

Ein beliebiger Vektor aus U^- hat also die Zerlegung

$$\begin{aligned} |\Phi^-\rangle &= |0\rangle \langle 0|\Phi^-\rangle + \int_k |v_k\rangle \langle v_k|\Phi^-\rangle dk \\ &+ \int_{k_1 < k_2} |v_{k_1, k_2}^- \rangle \langle v_{k_1, k_2}^-|\Phi^-\rangle dk_1 dk_2 + \dots \\ &+ \int_{k_1 < k_2 < \dots < k_N} |v_{k_1, k_2, \dots, k_N}^- \rangle \langle v_{k_1, k_2, \dots, k_N}^-|\Phi^-\rangle dk_1 dk_2 \dots dk_N \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (3.74)$$

Zum Beispiel ist $\left| \langle v_{k_1, k_2}^- | \Phi^- \rangle \right|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß zwei Teilchen vorliegen, und zwar im antisymmetrischen Zustand $|v_{k_1, k_2}^- \rangle$. U^- ist orthogonal aus den einzelnen U_N^- konstruiert. Dies impliziert, daß alle Skalarprodukte von Vektoren aus Räumen U_N^- und $U_{N'}^-$ zu verschiedenen Teilchenzahlen N und N' verschwinden,

$$\langle v_{k'_1, \dots, k'_{N'}}^- | v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle = 0 \quad \text{für } N \neq N' \quad . \quad (3.75)$$

So gilt beispielsweise

$$\langle 0 | v_k \rangle = 0 \quad , \quad (3.76)$$

$$\langle 0 | v_{k_1, k_2}^- \rangle = 0 \quad , \quad (3.77)$$

$$\langle v_{k'} | v_{k_1, k_2}^- \rangle = 0 \quad . \quad (3.78)$$

Wir werden jetzt Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Fermionen einführen. Wir definieren einen Operator a_k^+ , der vom unitären Raum U_N^- in den Raum U_{N+1}^- überführt. Es sei

$$\begin{aligned} |v_k \rangle &= a_k^+ |0 \rangle \quad , \\ |v_{k, k_1}^- \rangle &= a_k^+ |v_{k_1} \rangle = a_k^+ a_{k_1}^+ |0 \rangle \quad , \\ &\vdots \\ |v_{k, k_1, \dots, k_N}^- \rangle &= a_k^+ |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.79)$$

Der Operator a_k^+ erzeugt also aus dem Vakuum $|0 \rangle$ einen Einteilchenzustand $|v_k \rangle$ in U_1 . Wendet man a_k^+ auf einen Einteilchenzustand $|v_{k_1} \rangle$ an, so ergibt sich der antisymmetrische Zweiteilchenzustand $|v_{k, k_1}^- \rangle$. Diesen Zustand kann man auch durch Anwendung von $a_k^+ a_{k_1}^+$ auf das Vakuum generieren. Entsprechend lassen sich die antisymmetrischen N -Teilchenzustände konstruieren. Man nennt a_k^+ einen Erzeugungsoperator.

Weil bei der Vertauschung zweier Indizes der antisymmetrische Zustand sein Vorzeichen wechselt, gilt

$$a_k^+ a_{k'}^+ = -a_{k'}^+ a_k^+ \quad . \quad (3.80)$$

Insbesondere verschwindet also das Quadrat — und somit auch alle höheren Potenzen — von a_k^+ ,

$$a_k^+ a_k^+ = 0 \quad . \quad (3.81)$$

Dies ist Ausdruck des Pauli-Prinzips, demzufolge sich zwei Teilchen nicht im gleichen Einteilchenzustand k befinden können.

Nun wollen wir die Eigenschaften des zu a_k^+ adjungierten Operators

$$a_k = (a_k^+)^{\dagger} \quad (3.82)$$

untersuchen. In U^- lautet die Vollständigkeitsrelation

$$1 = |0\rangle \langle 0| + \int_{k_1} |v_{k_1}\rangle \langle v_{k_1}| dk_1 \quad (3.83)$$

$$+ \int_{k_1 < k_2} |v_{k_1, k_2}^-\rangle \langle v_{k_1, k_2}^-| dk_1 dk_2 + \dots \quad .$$

Die Anwendung von a_k^+ auf diesen Einheitsoperator ergibt

$$a_k^+ = |v_k\rangle \langle 0| + \int_{k_1} |v_{k, k_1}^-\rangle \langle v_{k_1}| dk_1 \quad (3.84)$$

$$+ \int_{k_1 < k_2} |v_{k, k_1, k_2}^-\rangle \langle v_{k_1, k_2}^-| dk_1 dk_2 + \dots \quad .$$

Will man hieraus eine Darstellung des adjungierten Operators a_k bekommen, so muß man nur die Reihenfolge der dyadischen Produkte vertauschen, d.h.

$$a_k = |0\rangle \langle v_k| + \int_{k_1} |v_{k_1}\rangle \langle v_{k, k_1}^-| dk_1$$

$$+ \int_{k_1 < k_2} |v_{k_1, k_2}^-\rangle \langle v_{k, k_1, k_2}^-| dk_1 dk_2 + \dots \quad .$$

Wegen der Orthogonalität der Vektoren zu verschiedenen Teilchenzahlen und der Orthonormierung der Vektoren entnehmen wir hieraus die Eigenschaften

$$a_k |0\rangle = 0 \quad , \quad (3.85)$$

$$a_k |v_{k'}\rangle = |0\rangle \langle v_k | v_{k'}\rangle = \delta(k, k') |0\rangle \quad , \quad (3.86)$$

$$a_k |v_{k', k''}^-\rangle = \int_{k_1} |v_{k_1}\rangle \langle v_{k, k_1}^- | v_{k', k''}^- \rangle dk_1$$

$$= \int_{k_1} |v_{k_1}\rangle (\delta(k, k') \delta(k_1, k'') - \delta(k_1, k') \delta(k, k'')) dk_1$$

$$= \delta(k, k') |v_{k''}\rangle - \delta(k, k'') |v_{k'}\rangle \quad . \quad (3.87)$$

Allgemein gilt

$$a_k |v_{k_1, \dots, k_N}^-\rangle = \delta(k, k_1) |v_{k_2, \dots, k_N}^-\rangle - \delta(k, k_2) |v_{k_1, k_3, \dots, k_N}^-\rangle + \dots \quad . \quad (3.88)$$

Der Operator a_k führt einen Zustand aus U_N^- über in einen Zustand aus U_{N-1}^- , wenn der Ausgangszustand ein Teilchen im Zustand k enthält. Bei dieser Operation wird ein Teilchen vernichtet. Daher nennt man a_k einen Vernichtungsoperator. Die Anwendung von a_k auf den Vakuumzustand ergibt Null.

Die wesentlichste Eigenschaft der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist ihre Vertauschungsrelation, die wir jetzt ableiten wollen. Wir wenden auf einen Zustand $|v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle$ zuerst a_k^+ und dann a_k an. Mit (3.88) und (3.79) erhalten wir

$$a_k a_{k'}^+ |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle = \delta(k, k') |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle - \delta(k, k_1) |v_{k', k_2, \dots, k_N}^- \rangle + \dots \quad (3.89)$$

Gehen wir in umgekehrter Reihenfolge vor, so resultiert

$$a_{k'}^+ a_k |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle = \delta(k, k_1) |v_{k', k_2, \dots, k_N}^- \rangle - \dots \quad (3.90)$$

Bei der Addition von (3.89) und (3.90) fallen alle Glieder bis auf das erste in (3.89) weg. Wir finden damit

$$(a_k a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k) |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle = \delta(k, k') |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle \quad (3.91)$$

Zusammen mit (3.80) erhalten wir damit für die Fermionen-Erzeugungs- und -Vernichtungsoperatoren die Antikommutatorenrelation

$$\{a_k, a_{k'}\} = 0 \quad , \quad (3.92)$$

$$\{a_k^+, a_{k'}^+\} = 0 \quad , \quad (3.93)$$

$$\{a_k, a_{k'}^+\} = \delta(k, k') \quad (3.94)$$

abgeleitet. Führt man eine entsprechende Rechnung für Bosonen durch, so findet man für deren Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die entsprechenden Relationen mit Kommutatoren statt mit Antikommutatoren wie bei Fermionen.

Wir hatten die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren durch Wirkung auf einen vollständigen, orthonormierten Satz von Einteilchenvektoren $|v_k \rangle$ und den antisymmetrischen Produktzuständen $|v_{k, k_1}^- \rangle, |v_{k, k_1, k_2}^- \rangle, \dots$ definiert. Wir wollen jetzt von speziellen Eigenvektoren ausgehen. Wir wählen die Ort-Spin-Eigenvektoren

$$|u_{\mathbf{r}m} \rangle = |u_{\mathbf{r}} \rangle |u^m \rangle \quad , \quad (3.95)$$

bzw. $|u_{\mathbf{r}m, \mathbf{r}_1 m_1}^- \rangle, \dots$ Dann werden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{\Psi}_m^+(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_m(\mathbf{r})$ für ein Teilchen am Ort \mathbf{r} mit der Spinkomponente $m\hbar$ definiert durch

$$\hat{\Psi}_m^+(\mathbf{r}) = |u_{\mathbf{r}, m} \rangle \langle 0| + \sum_{\mathbf{r}_1 m_1} |u_{\mathbf{r}m, \mathbf{r}_1 m_1}^- \rangle \langle u_{\mathbf{r}_1 m_1} | d^3 r_1 + \dots \quad , \quad (3.96)$$

$$\hat{\Psi}_m(\mathbf{r}) = |0 \rangle \langle u_{\mathbf{r}m} | + \sum_{\mathbf{r}_1 m_1} |u_{\mathbf{r}_1 m_1} \rangle \langle u_{\mathbf{r}m, \mathbf{r}_1 m_1}^- | d^3 r_1 + \dots \quad . \quad (3.97)$$

Diese Operatoren erfüllen wieder die Antikommutatorrelationen

$$\{\hat{\Psi}_m(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{m'}(\mathbf{r}')\} = 0 \quad , \quad (3.98)$$

$$\{\hat{\Psi}_m^+(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{m'}^+(\mathbf{r}')\} = 0 \quad , \quad (3.99)$$

$$\{\hat{\Psi}_m(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{m'}^+(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{mm'} \quad . \quad (3.100)$$

Als nächsten Schritt wollen wir einen Zusammenhang zwischen den Operatoren $\hat{\Psi}_m(\mathbf{r})$ und a_k erstellen. Der Zusammenhang zwischen den Vektoren $|v_k\rangle$, $|v_{k,k_1}^- \rangle$ und $|u_{\mathbf{r}m}\rangle$, $|u_{\mathbf{r}m,r_1m_1}^- \rangle$ wird vermittelt durch

$$|u_{\mathbf{r}m}\rangle = \int_k |v_k\rangle \langle v_k | u_{\mathbf{r}m}\rangle dk \quad , \quad (3.101)$$

$$|u_{\mathbf{r}m,r_1m_1}^- \rangle = \int_{k,k_1} |v_{k,k_1}^- \rangle \langle v_k | u_{\mathbf{r}m}\rangle \langle v_{k_1} | u_{\mathbf{r}_1m_1}\rangle dk dk_1 \quad . \quad (3.102)$$

Wir setzen dies in die Entwicklung für den Operator $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ ein und erhalten

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_m(\mathbf{r}) &= \int_k |0\rangle \langle u_{\mathbf{r}m} | v_k\rangle \langle v_k | dk + \\ &\int_{\mathbf{r}_1m_1} \int_{k,k_1,k'_1} |v_k\rangle \langle v_{k_1} | u_{\mathbf{r}_1m_1}\rangle \langle u_{\mathbf{r}_1m_1} | v_{k'_1}\rangle \langle u_{\mathbf{r}m} | v_k\rangle \langle v_{k,k'_1}^- | d^3r_1 dk dk_1 dk'_1 + \dots \end{aligned} \quad (3.103)$$

In der zweiten Zeile ergibt die Summation bzw. Integration über \mathbf{r}_1 und m_1 gerade $\delta(k_1, k'_1)$, so daß man auch noch die Integration über k'_1 ausführen kann. Es resultiert

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_m(\mathbf{r}) &= \int_k |0\rangle \langle u_{\mathbf{r}m} | v_k\rangle \langle v_k | dk + \\ &\int_{k,k_1} |v_{k_1}\rangle \langle u_{\mathbf{r}m} | v_k\rangle \langle v_{k,k_1}^- | dk dk_1 + \dots \end{aligned} \quad (3.104)$$

Entsprechend verfährt man mit allen weiteren Gliedern. Damit ergibt sich, daß die Operatoren $\hat{\Psi}_m(\mathbf{r})$ aus den a_k einfach durch die unitäre Transformation

$$\hat{\Psi}_m(\mathbf{r}) = \int_k a_k \langle u_{\mathbf{r}m} | v_k\rangle dk \quad (3.105)$$

auseinander hervorgehen. Umgekehrt erhält man die Operatoren a_k aus $\hat{\Psi}_m(\mathbf{r})$ durch

$$a_k = \int_{\mathbf{r}m} \hat{\Psi}_m(\mathbf{r}) \langle v_k | u_{\mathbf{r}m}\rangle d^3r \quad . \quad (3.106)$$

Wenn wir die Quantentheorie durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren formulieren wollen, so ist es notwendig, die symmetrischen N -Teilchen-Operatoren \mathcal{L} , die Observablen zugeordnet sind, als Funktion der a_k und a_k^\dagger auszudrücken. Dazu gehen wir zunächst von der Vollständigkeit der Produktzustände $|v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \dots v_{k_N}^N \rangle$ im unitären Raum U_N aus. Durch zweimaliges Einschleiben des Einheitsoperators können wir schreiben

$$\mathcal{L} = \int_{k_1, \dots, k_N} \int_{k'_1, \dots, k'_N} |v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N \rangle \langle v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N | \mathcal{L} v_{k'_1}^1 \dots v_{k'_N}^N \rangle \langle v_{k'_1}^1 \dots v_{k'_N}^N | dk_1 \dots dk_N dk'_1 \dots dk'_N \quad . \quad (3.107)$$

Betrachten wir identische Fermionen, so können wir unsere Untersuchungen auf den Raum U_N^- beschränken. In diesem Unterraum ist \mathcal{L} mit $\mathcal{A}\mathcal{L}\mathcal{A}$ identisch. Wir multiplizieren (3.107) von links und rechts mit \mathcal{A} . Es resultiert

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N!} \int \prod_{k_1, \dots, k_N} \int \prod_{k'_1, \dots, k'_N} |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle \langle v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N | \mathcal{L} v_{k'_1}^1 \dots v_{k'_N}^N \rangle \langle v_{k'_1, \dots, k'_N}^- | dk_1 \dots dk_N dk'_1 \dots dk'_N \quad . \quad (3.108)$$

Als wichtiges Anwendungsbeispiel diskutieren wir einen N -Teilchen-Operator \mathcal{L} , der sich additiv aus N Einteilchen-Operatoren zusammensetzt

$$\mathcal{L} = \sum_{\nu=1}^N f^\nu \quad . \quad (3.109)$$

Die einzelnen Operatoren f^ν sind also lauter gleiche Operatorfunktionen. Die Matrixelemente von \mathcal{L} , gebildet in den Produktzuständen, vereinfachen sich in diesem Fall zu

$$\begin{aligned} \left\langle v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N \left| \sum_{\nu=1}^N f^\nu v_{k'_1}^1 \dots v_{k'_N}^N \right. \right\rangle &= \left\langle v_{k_1}^1 \left| f^1 v_{k'_1}^1 \right. \right\rangle \delta(k_2, k'_2) \dots \delta(k_N, k'_N) \\ &+ \dots \\ &+ \delta(k_1, k'_1) \delta(k_2, k'_2) \dots \left\langle v_{k_N}^N \left| f^N v_{k'_N}^N \right. \right\rangle \quad . \quad (3.110) \end{aligned}$$

Jetzt setzen wir die Darstellung von \mathcal{L} aus (3.108) ein. Es folgt

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=1}^N f^\nu &= \frac{1}{N!} \int \prod_{k_1, \dots, k_N} \int \prod_{k'_1} |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle \langle v_{k_1}^1 | f^1 v_{k'_1}^1 \rangle \langle v_{k'_1, k_2, \dots, k_N}^- | dk_1 \dots dk_N dk'_1 \\ &+ \frac{1}{N!} \int \prod_{k_1, \dots, k_N} \int \prod_{k'_2} |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle \langle v_{k_2}^2 | f^2 v_{k'_2}^2 \rangle \langle v_{k_1, k'_2, \dots, k_N}^- | dk_1 \dots dk_N dk'_2 \\ &+ \dots \quad (3.111) \end{aligned}$$

Im zweiten Term nehmen wir eine Umbezeichnung der Integrationsvariablen vor: $k_1 \rightarrow k_2$, $k_2 \rightarrow k_1$, $k'_2 \rightarrow k'_1$. Das auftretende Matrixelement lautet dann $\langle v_{k_1}^2 | f^2 v_{k'_1}^2 \rangle$. Da alle f^ν dieselben Einteilchenoperatoren sind, sind die Matrixelemente unabhängig von den Teilchenindizes

$$\langle v_{k_1}^1 | f^1 v_{k'_1}^1 \rangle = \langle v_{k_1}^2 | f^2 v_{k'_1}^2 \rangle = \dots \quad . \quad (3.112)$$

Damit können wir generell schreiben

$$\langle v_{k_1} | f v_{k'_1} \rangle = f(k_1, k'_1) \quad . \quad (3.113)$$

Wir berücksichtigen ferner die Antisymmetrie der Zustände $|v^- \rangle$, so kann man $|v_{k_2, k_1, \dots, k_N}^- \rangle$ durch $-|v_{k_1, k_2, \dots, k_N}^- \rangle$ ersetzen. Damit ist gezeigt, daß der zweite Term von (3.111) identisch ist

mit dem ersten Term. Analog verfahren wir mit den restlichen Termen und erhalten so N -mal denselben Term. Dies führt schließlich auf

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=1}^N f^{\nu} &= \frac{1}{(N-1)!} \int \int_{k_1, \dots, k_N} \int \int_{k'_1} |v_{k_1, \dots, k_N}^{-}\rangle f(k_1, k_2) \langle v_{k'_1, \dots, k_N}^{-}| dk_1 \dots dk_N dk'_1 \\ &= \frac{1}{(N-1)!} \int \int_{k_1, \dots, k_N} \int \int_{k'_1} a_{k_1}^{+} |v_{k_2, \dots, k_N}^{-}\rangle f(k_1, k'_1) \langle v_{k_2, \dots, k_N}^{-}| a_{k'_1} dk_1 \dots dk_N dk'_1 \quad . \end{aligned} \quad (3.114)$$

Die Vektoren $\langle v_{k_2, \dots, k_N}^{-}$ sind vollständig im U_{N-1}^{-} . Daher ergibt die Integration über k_2, \dots, k_N einschließlich des Faktors $\frac{1}{(N-1)!}$ gerade 1. Wir substituieren nun $k_1 \rightarrow k$ und $k'_1 \rightarrow k'$. Damit bekommen wir das Ergebnis

$$\sum_{\nu} f^{\nu} = \int \int_{k, k'} a_k^{+} f(k, k') a_{k'} dk dk' \quad . \quad (3.115)$$

Damit ist die Summe $\sum f^{\nu}$ der Einteilchenoperatoren als Linearkombination der Operatoren $a_k^{+} a_{k'}$ ausgedrückt. Die Koeffizienten dieser Linearkombination sind die Matrixelemente $f(k, k')$ im Einteilchen-Raum U_1 . Es wird ein Teilchen im Zustand k' vernichtet und dafür ein Teilchen im Zustand k erzeugt. Das Gewicht, mit dem dies geschieht, ist das Matrixelement $f(k, k')$. Als konkrete Beispiele behandeln wir nun den Gesamtimpulsoperator sowie die Summe von Einteilchen-Hamilton-Operatoren.

Der Gesamtimpulsoperator lautet

$$\sum_{\nu} \mathbf{p}^{\nu} = \int \int_{k, k'} a_k^{+} \mathbf{p}(k, k') a_{k'} dk dk' \quad (3.116)$$

mit

$$\mathbf{p}(k, k') = \langle v_k | \mathbf{p} v_{k'} \rangle \quad . \quad (3.117)$$

Wählt man als $|v_k\rangle$ die Ort-Spin-Eigenvektoren $|u_{\mathbf{r}_m}\rangle$, so gilt

$$\langle u_{\mathbf{r}_m} | \mathbf{p} u_{\mathbf{r}'_m} \rangle = i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{mm'} \quad . \quad (3.118)$$

Mit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta'(x - x') dx = -f'(x') \quad (3.119)$$

erhalten wir

$$\sum_{\nu} \mathbf{p}^{\nu} = -i\hbar \sum_m \int \hat{\Psi}_m^{+}(\mathbf{r}) \nabla \hat{\Psi}_m(\mathbf{r}) d^3r \quad . \quad (3.120)$$

Für die Impuls-Spin-Eigenvektoren $|u_{\mathbf{p}_m}\rangle$ gilt

$$\langle u_{\mathbf{p}_m} | \mathbf{p} u_{\mathbf{p}'_m} \rangle = \mathbf{p}' \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{mm'} \quad . \quad (3.121)$$

Damit folgt

$$\sum_{\nu} \mathbf{p}^{\nu} = \sum_m \int \mathbf{p} a_m^{\dagger}(\mathbf{p}) a_m(\mathbf{p}) d^3p \quad . \quad (3.122)$$

Für die Summe von Einteilchen-Hamilton-Operatoren

$$\sum_{\nu} h^{\nu} = \sum_{\nu} \left(\frac{1}{2m} (\mathbf{p}^{\nu})^2 + V(\mathbf{x}^{\nu}) \right) \quad (3.123)$$

ergibt sich

$$\sum_{\nu} h^{\nu} = \int \int_{k,k'} a_k^{\dagger} \varepsilon(k, k') a_{k'} dk dk' \quad (3.124)$$

mit

$$\varepsilon(k, k') = \left\langle v_k \left| \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x}) \right| v_{k'} \right\rangle \quad . \quad (3.125)$$

Identifiziert man die v_k mit den Eigenvektoren von h , so ist

$$\varepsilon(k, k') = \varepsilon_k \delta(k, k') \quad . \quad (3.126)$$

Damit resultiert

$$\sum_{\nu} h^{\nu} = \int_k \varepsilon_k a_k^{\dagger} a_k dk \quad . \quad (3.127)$$

3.5 Besetzungszahl-Operatoren

In (3.127) sind die Matrixelemente der Einteilchen-Operatoren f^{ν} diagonal. Wählt man generell solche Einteilchenzustände $|v_k\rangle$, die Eigenvektoren von f sind mit

$$f |v_k\rangle = f_k |v_k\rangle \quad , \quad (3.128)$$

so ist

$$f(k, k') = f_k \delta(k, k') \quad . \quad (3.129)$$

Damit haben wir in vereinfachter Form

$$\sum_{\nu} f^{\nu} = \int_k f_k \mathcal{N}_k dk \quad . \quad (3.130)$$

Hierbei ist

$$\mathcal{N}_k = a_k^{\dagger} a_k \quad . \quad (3.131)$$

Diesen hermiteschen Operator nennt man den Besetzungszahloperator. Im Raum U_N^- wirkt er folgendermaßen

$$\mathcal{N}_k |v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle = \delta(k, k_1) |v_{k, k_2, \dots, k_N}^- \rangle + \delta(k, k_2) |v_{k_1, k, \dots, k_N}^- \rangle + \dots \quad . \quad (3.132)$$

Alle Vektoren $|v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle$, in denen kein Index mit k übereinstimmt, sind Eigenvektoren von \mathcal{N}_k zum Eigenwert 0, während die Vektoren $|v_{k_1, \dots, k_N}^- \rangle$, in denen irgendein Index gleich k ist, Eigenvektoren zum Eigenwert 1 sind. Der Besetzungszahl-Operator \mathcal{N}_k hat also die Eigenwerte

$$N_k = 0, 1 \quad . \quad (3.133)$$

Dies ist erneut Ausdruck des Pauli-Prinzips: In einem Zustand k kann sich höchstens ein Teilchen befinden. Die Summe

$$\mathcal{N} = \sum_k \mathcal{N}_k = \sum_k a_k^+ a_k \quad (3.134)$$

ist der Operator der Gesamtteilchenzahl. Seine Eigenwerte sind die ganzen Zahlen

$$N = \sum_k N_k = 0, 1, 2 \dots \quad . \quad (3.135)$$

Zum Eigenwert N gehört der Eigenraum U_N^- .

Wir wollen jetzt einige wichtige Vertauschungsrelationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Fermionen herleiten. Wir bemerken zuvor für die Operatoren \mathcal{F} , \mathcal{G} und \mathcal{H} die folgenden Rechenregeln

$$[\mathcal{F}\mathcal{G}, \mathcal{H}]_- = \mathcal{F}[\mathcal{G}, \mathcal{H}]_{\mp} \pm [\mathcal{F}, \mathcal{H}]_{\mp} \mathcal{G} \quad , \quad (3.136)$$

$$[\mathcal{F}\mathcal{G}, \mathcal{H}]_+ = \mathcal{F}[\mathcal{G}, \mathcal{H}]_{\pm} \mp [\mathcal{F}, \mathcal{H}]_{\mp} \mathcal{G} \quad . \quad (3.137)$$

Diese Relationen verifiziert man durch einfaches Ausrechnen. Mit

$$[\mathcal{F}, \mathcal{G}]_+ = \{\mathcal{F}, \mathcal{G}\} \quad (3.138)$$

bezeichnen wir den Antikommutator. Mit der Algebra der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und (3.136) resultiert

$$[a_{k'}^+ a_{k''}, a_k] = -\delta(k', k) a_{k''} \quad , \quad (3.139)$$

$$[a_{k'}^+ a_{k''}, a_k^+] = \delta(k'', k) a_{k'}^+ \quad . \quad (3.140)$$

Damit haben wir insbesondere

$$[\mathcal{N}_{k'}, a_k] = -\delta(k', k) a_{k'} \quad , \quad (3.141)$$

$$[\mathcal{N}_{k'}, a_k^+] = \delta(k', k) a_{k'}^+ \quad . \quad (3.142)$$

Hieraus läßt sich ableiten, daß gilt

$$[\mathcal{N}_{k'}, a_{k_1}^+ a_{k_2}] = \delta(k', k_1) a_{k_1}^+ a_{k_2} - \delta(k', k_2) a_{k_1}^+ a_{k_2} \quad . \quad (3.143)$$

Damit erhält man

$$[\mathcal{N}_{k'}, \mathcal{N}_k] = 0 \quad (3.144)$$

und

$$[\mathcal{N}, a_{k_1}^\dagger a_{k_2}] = 0 \quad (3.145)$$

Damit vertauscht auch die Summe der Einteilchenoperatoren $\sum f^\nu$ mit \mathcal{N} .

Wir wollen nun die zeitliche Änderung von a_k diskutieren. In der Vorlesung der Quantenmechanik hatten wir für die zeitliche Änderung des Operators $\hat{\mathcal{L}}$ gefunden

$$\frac{d\hat{\mathcal{L}}}{dt} = \frac{\partial \hat{\mathcal{L}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}] = \hat{\mathcal{L}} \quad (3.146)$$

Wir gehen davon aus, daß beim Operator a die explizite Zeitabhängigkeit verschwindet. Somit ist

$$\frac{da_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, a_k] \quad (3.147)$$

Mit dem Hamilton-Operator (3.124) und (3.139) folgt

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_k' \varepsilon(k, k') a_{k'} \quad (3.148)$$

In der Ort-Spin-Darstellung läßt sich (3.147) schreiben als

$$\frac{d\hat{\Psi}_m(\mathbf{r})}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \hat{\Psi}_m(\mathbf{r})] \quad (3.149)$$

In der Ort-Spin-Darstellung wird aus

$$\varepsilon(k, k') = \left\langle v_k \left| \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) \right| v_{k'} \right\rangle \quad (3.150)$$

der Ausdruck

$$\varepsilon(\mathbf{r}m, \mathbf{r}'m') = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} + V(\mathbf{r}) \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{mm'} \quad (3.151)$$

Damit wird (3.148) zu

$$i\hbar \frac{d\hat{\Psi}_m(\mathbf{r})}{dt} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}_m(\mathbf{r}) \quad (3.152)$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung in Operatorform.

3.6 Feldoperatoren

Wir besprechen die sogenannte „Zweite Quantisierung“ des Schrödinger-Feldes. Das gewählte Vorgehen gilt allgemein für die Feldtheorie. Durch die Quantisierung einer Feldtheorie gelangen wir zur Quantenfeldtheorie. Beispielsweise erhalten wir durch die Quantisierung des gekoppelten Maxwell-Dirac Feldes die Quantenelektrodynamik.

Bei der Quantisierung ordnen wir den Feldgrößen, so z.B. den Feldstärken, Feldoperatoren zu

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (3.153)$$

Der Feldoperator $\hat{\Psi}$ ist ebenso wie in der klassischen Feldtheorie eine Funktion des Ortes \mathbf{r} und der Zeit t . Hierbei sind \mathbf{r} und t Parameter. Die Entwicklung des Feldes nach einem vollständigen Satz orthonormierter Funktionen $v_k(\mathbf{r})$ ist auch für Feldoperatoren möglich. Es ist

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_k(t) v_k(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.154)$$

Hierbei sind die Entwicklungskoeffizienten c_k jetzt Operatoren. Aufgrund der Orthonormierung der Funktionen $v_k(\mathbf{r})$ läßt sich nach (3.154) auflösen nach

$$c_k(t) = \int \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) v_k^*(\mathbf{r}) d^3r \quad . \quad (3.155)$$

Für den adjungierten – aber keineswegs notwendigerweise selbstadjungierten – Feldoperator $\hat{\Psi}^+$ folgt aus (3.154) die Entwicklung

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_k^+(t) v_k^*(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.156)$$

und damit

$$c_k^+(t) = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, t) v_k(\mathbf{r}) d^3r \quad . \quad (3.157)$$

3.7 Funktional und Funktionalableitung

Wir führen nun einen mathematischen Einschub durch. Die Erweiterung der Funktionen mehrerer Veränderlicher $F = F(\phi_1, \dots, \phi_k, \dots)$ auf ein kontinuierlich veränderliches k führt zum Begriff des Funktionals. Es handelt sich dabei um eine Vorschrift, nach der einer Funktion $\phi(k)$ ein bestimmter Wert $F = F[\phi]$ zugeordnet wird. An Stelle von k schreiben wir künftig x . In Figur 12 ist schematisch die Abbildung einer Funktion $\phi(x)$ auf das Funktional F angegeben. Für ϕ und F lassen wir auch komplexe Werte zu. Im folgenden geben wir einige Beispiele von Funktionalen an:

1.) F sei die Fläche, die in einem Intervall $a \leq x \leq b$ durch die Funktion $\phi(x)$ gebildet wird,

$$F[\phi] = \int_a^b \phi(x) dx . \quad (3.158)$$

2.) Ist $f = f(\phi)$ eine Funktion von ϕ , zum Beispiel $f = \phi^2$, so ist das Integral

$$F[\phi] = \int_a^b f(\phi(x)) dx \quad (3.159)$$

ebenfalls ein Funktional F von ϕ .

3.) Ist $f = f(\phi, \phi')$ eine Funktion von ϕ und deren Ableitung ϕ' , so wird durch das Integral

$$F[\phi] = \int_a^b f(\phi(x), \phi'(x)) dx \quad (3.160)$$

wieder ein Funktional F von ϕ definiert. Man kann also zum Beispiel das Wirkungsintegral

$$\mathcal{A} = \int_{t_a}^{t_b} L(q_1, \dots, \dot{q}_1, \dots, t) dt \quad (3.161)$$

als Funktional der generalisierten Koordinaten q lesen.

4.) Ordnet man einer Funktion $\phi(x)$ ihren Wert $\phi(x')$ an der Stelle x' zu, so ist dadurch ein Funktional $F[\phi]$ definiert, das sich mit Hilfe der Diracschen Deltafunktion darstellen läßt

$$F[\phi] = \phi(x') = \int \phi(x) \delta(x' - x) dx . \quad (3.162)$$

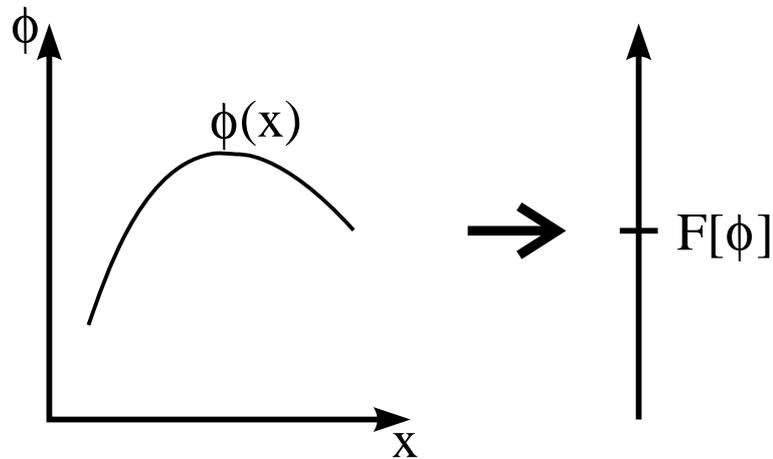
Die Definition eines Funktionals läßt sich auch auf Funktionen $\phi(x, y, \dots)$ mehrerer unabhängiger Veränderlicher x, y, \dots und auch auf mehrere unabhängige Funktionen $\phi_1(x, \dots), \phi_2(x, \dots)$ erweitern. Es gilt dann $F = F[\phi_1, \phi_2, \dots]$.

Wir kommen nun zur Funktionalableitung. Bevor wir zur mathematischen Definition gelangen, werden wir erst einige anschauliche Betrachtungen durchführen. Die unabhängige Variable sei hier die Zeit t . Das Funktional $F[\phi(t)]$ ist die Abbildung einer Funktion $\phi(t)$ auf eine Zahl. Die Frage lautet nun, wie ändert sich diese Zahl, wenn wir kleine Änderungen der Argumentfunktion $\phi(t)$ durchführen. Wir untersuchen also die Differenz

$$F[\phi(t) + \eta(t)] - F[\phi(t)] \quad (3.163)$$

für kleine $\eta(t)$. Zuerst teilen wir dazu die Zeit t in verschiedene Einzelintervalle ϵ mit den diskreten Randwerten t_i ein. Die Funktion $\phi(t)$ können wir in diesem Zusammenhang approximieren durch die Angabe der Werte ϕ_i zur Zeit t_i . Das Funktional $F[\phi(t)]$ ist nun eine Zahl, die von allen ϕ_i abhängt, ebenso wie eine Funktion von mehreren Variablen ϕ_i abhängen kann,

$$F[\phi(t)] \rightarrow F(\dots, \phi_i, \phi_{i+1}, \dots) . \quad (3.164)$$



Figur 12: Abbildung einer Funktion $\phi(x)$ auf ein Funktional $F[\phi]$.

Nun können wir die partielle Ableitung in bezug auf eine dieser Variablen ϕ_i , nämlich $\partial F/\partial \phi_i$, betrachten. Die Funktionalableitung in der diskretisierten Version bei $s = t_i$ ist dann gerade die partielle Ableitung dividiert durch das Intervall ϵ ,

$$\frac{\delta F}{\delta \phi(s)} \rightarrow \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial F}{\partial \phi_i}. \quad (3.165)$$

Wir schreiben für die Funktionalableitung also $\delta F/\delta \phi(s)$. Es muß jedoch betont werden, daß diese Nomenklatur nicht einheitlich ist. Wenn wir die Funktion ändern von $\phi(t)$ nach $\phi(t) + \eta(t)$, dann ändern wir in der diskretisierten Version alle ϕ_i von ϕ_i nach $\phi_i + \eta_i$ mit $\eta_i = \eta(t_i)$. Nach den gewöhnlichen Regeln der partiellen Differentiation lautet die Differenz in erster Ordnung

$$F(\dots, \phi_i + \eta_i, \phi_{i+1} + \eta_{i+1}, \dots) - F(\dots, \phi_i, \phi_{i+1}, \dots) = \sum_i \frac{\partial F}{\partial \phi_i} \eta_i. \quad (3.166)$$

Bezeichnen wir nun

$$\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial F}{\partial \phi_i} = K_i,$$

so ergibt die letzte Summe gerade $\sum_i K_i \eta_i \epsilon$, was im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ gerade $\int K(t) \eta(t) dt$ wird.

Bezüglich der Differenz (3.163) resultiert also in niedrigster Ordnung in η ein linearer Ausdruck in η . Wir schreiben dafür $\int K(s) \eta(s) ds$. Dann wird

$$K(s) = \frac{\delta F}{\delta \phi(s)} \quad (3.167)$$

die Funktionalableitung von F in bezug auf eine Variation der Funktion $\phi(t)$ bei $t = s$ genannt. In erster Ordnung gilt also

$$F[\phi + \eta] = F[\phi] + \int \frac{\delta F}{\delta \phi(s)} \eta(s) ds + \dots \quad (3.168)$$

$\delta F/\delta \phi(s)$ hängt von der Funktion $\phi(t)$ ab sowie von dem Wert s . Dieser Ausdruck ist ein Funktional von $\phi(t)$ und eine Funktion der Zeit s .

Wir können auch direkt von Differentialen ausgehen. Im Fall einer Funktion mehrerer Veränderlicher können wir schreiben

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial \phi_i} d\phi_i. \quad (3.169)$$

Ebenso gilt für die erste Variation eines Funktionals

$$\delta F = \int \frac{\delta F}{\delta \phi(s)} \delta \phi(s) ds. \quad (3.170)$$

Wir wollen nun die Änderung η etwas präziser fassen. Verändert man die Funktion $\phi(x)$ um $\delta \phi(x)$, so wird durch das Funktional der Funktion $\phi + \delta \phi$ ein Wert $F[\phi + \delta \phi] = F + \delta F$ zugeordnet. Die Änderung der Funktion ϕ und die zugeordneten Funktionale sind schematisch in Figur 13 wiedergegeben.

Variiert man die Funktion $\phi(x)$ nur in einer Umgebung dx_0 einer Stelle x_0 , so wird F um

$$F[\phi + \epsilon(x, x_0, dx_0) \delta \phi] - F[\phi] \quad (3.171)$$

verändert. Dabei ist

$$\epsilon(x, x_0, dx_0) = \begin{cases} 1 & \forall x \text{ in der Umgebung } dx_0 \text{ von } x_0 \\ 0 & \forall x \text{ außerhalb von } dx_0 \end{cases}. \quad (3.172)$$

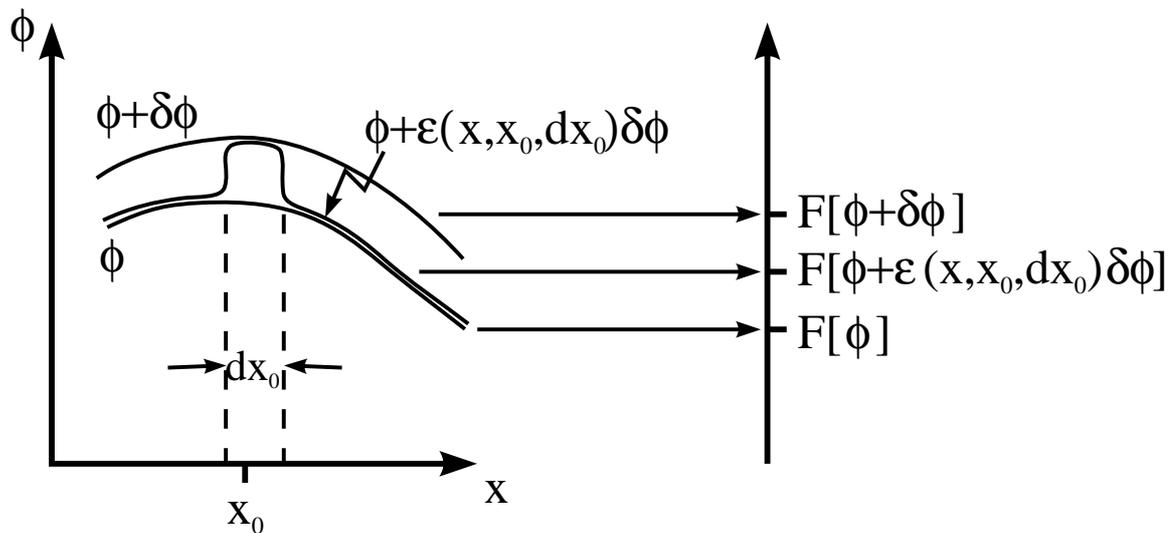
Den Grenzwert

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x_0)} = \lim_{dx_0 \rightarrow 0} \lim_{\delta \phi \rightarrow 0} \frac{F[\phi + \epsilon(x, x_0, dx_0) \delta \phi] - F[\phi]}{\delta \phi dx_0} \quad (3.173)$$

bezeichnet man, sofern er existiert, als Funktionalableitung von F nach $\phi(x_0)$. Das Differential δF zu einer beliebigen differentiellen Veränderung $\delta \phi$ erhält man durch Integration über x_0 ,

$$\delta F = \int_{x_0} \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x_0)} \delta \phi(x_0) dx_0. \quad (3.174)$$

Den Index 0 lassen wir im folgenden aus Einfachheitsgründen weg. Die Funktionalableitung ist die Verallgemeinerung der partiellen Ableitung $\partial F/\partial \phi_k$ einer Funktion F auf kontinuierliche



Figur 13: Links sind schematisch die Funktionen ϕ , $\phi + \epsilon(x, x_0, dx_0) \delta\phi$ und $\phi + \delta\phi$ aufgetragen. Rechts sind die zugehörigen Funktionalen angegeben.

k -Werte. Die Beziehung (3.174) entspricht dem totalen Differential einer Funktion mehrerer unabhängiger Veränderlicher.

Wir wollen nun einige Eigenschaften der Funktionalableitung diskutieren.

1.) Für das Funktional

$$F[\phi] = \phi(x') \quad (3.175)$$

folgt

$$\begin{aligned} \frac{\delta\phi(x')}{\delta\phi(x)} &= \lim_{dx \rightarrow 0} \lim_{\delta\phi \rightarrow 0} \frac{\phi(x') + \epsilon(x', x, dx) \delta\phi - \phi(x')}{\delta\phi dx} \\ &= \lim_{dx \rightarrow 0} \frac{\epsilon(x', x, dx)}{dx} . \end{aligned} \quad (3.176)$$

Entsprechend der Definition von ϵ sehen wir, daß bei einer Integration dieses Ausdrucks entweder 0 oder 1 resultiert, je nachdem ob x' im Integrationsbereich von x liegt oder nicht. Damit hat der Ausdruck (3.176) formal die Eigenschaft der Diracschen δ -Funktion. Multiplizieren wir (3.176) mit $f(x)$ und integrieren, so erhalten wir trivialerweise nach Integration $f(x')$. Damit haben wir

$$\frac{\delta\phi(x')}{\delta\phi(x)} = \delta(x' - x) . \quad (3.177)$$

Diese Beziehung ist nur die Verallgemeinerung von

$$\frac{\partial \phi_{k'}}{\partial \phi_k} = \delta_{kk'} \quad (3.178)$$

auf kontinuierliches k .

2.) Ist das Funktional die Ableitung ϕ' an einer Stelle x' ,

$$F[\phi] = \phi'(x'), \quad (3.179)$$

so folgt durch eine analoge Überlegung

$$\frac{\delta \phi'(x')}{\delta \phi(x)} = \delta'(x' - x) = -\frac{d}{dx} \delta(x' - x). \quad (3.180)$$

3.) Ist $f = f(\phi)$ eine differenzierbare Funktion von ϕ (zum Beispiel $f = \phi^2$), so ergibt sich für die Funktionalableitung von $F[\phi] = f(\phi(x'))$ aus der Definition wie in der gewöhnlichen Differentialrechnung die Kettenregel

$$\frac{\delta f(\phi(x'))}{\delta \phi(x)} = \frac{df}{d\phi} \frac{\delta \phi(x')}{\delta \phi(x)} = \frac{df}{d\phi} \delta(x' - x). \quad (3.181)$$

Entsprechend gilt für die Funktionalableitung von $F[\phi] = f(\phi(x'), \phi'(x'))$

$$\begin{aligned} \frac{\delta f(\phi(x'), \phi'(x'))}{\delta \phi(x)} &= \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\delta \phi(x')}{\delta \phi(x)} + \frac{\partial f}{\partial \phi'} \frac{\delta \phi'(x')}{\delta \phi(x)} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta(x' - x) - \frac{\partial f}{\partial \phi'} \frac{d}{dx} \delta(x' - x). \end{aligned} \quad (3.182)$$

4.) Ist $F[\phi] = \int f(\phi(x')) dx'$, so folgt für die Funktionalableitung

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)} = \int \frac{\delta f(\phi(x'))}{\delta \phi(x)} dx', \quad (3.183)$$

wobei wir die Vertauschbarkeit der Funktionalableitung mit der Integration vorausgesetzt haben. Wir setzen (3.181) ein und führen die Integration über x' durch. Es folgt

$$\frac{\delta F}{\delta \phi(x)} = \frac{df}{d\phi}. \quad (3.184)$$

Für das Funktional $F[\phi] = \int f(\phi(x'), \phi'(x')) dx'$ erhalten wir nach (3.182)

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)} = \frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \phi'}. \quad (3.185)$$

Es ist also zum Beispiel die Funktionalableitung des Wirkungsintegrals der Euler - Lagrange-sche Ausdruck.

Die Beziehungen für die Funktionalableitung lassen sich ohne weiteres auch auf Funktionen $\phi(x, y, \dots)$ mehrerer unabhängiger Variablen x, y, \dots und auch auf mehrere unabhängige Funktionen $\phi_1(x, \dots), \phi_2(x, \dots), \dots$ erweitern. Dies findet beispielsweise Anwendung, wenn wir die Lagrange - Funktion L mittels der Lagrange - Dichte l als Funktional der Felder und deren Ableitungen schreiben,

$$L[\psi_i, \dot{\psi}_i] = \int l(\psi_i, \text{grad } \psi_i, \dot{\psi}_i) d^3x . \quad (3.186)$$

3.8 Schrödinger-Feldtheorie

Das Schrödinger-Feld unter dem Einfluß eines äußeren Potentials $V(\mathbf{r})$ wird durch die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = i\hbar\Psi^*\dot{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m}\text{grad}\Psi^* \text{grad}\Psi - V\Psi^* \Psi \quad (3.187)$$

beschrieben. Die Lagrange-Funktion L ist das räumliche Integral der Lagrange-Dichte \mathcal{L}

$$L = \int d^3r \mathcal{L} . \quad (3.188)$$

Die Lagrange-Funktion ist nun ein Funktional des Feldes, was wir durch die eckigen Klammern andeuten

$$L(t) = L [\phi(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}(\mathbf{r}, t)] , \quad (3.189)$$

das heißt, sie hängt von den Werten von ϕ und $\dot{\phi}$ an allen Positionen des räumlichen Volumens ab. Man beachte, daß $L(t)$ als Funktional nicht von \mathbf{r} selbst abhängt.

Die Variation eines Funktionals ist gegeben durch

$$\delta F[\phi] = F[\phi + \delta\phi] - F[\phi] = \int d^3r \frac{\delta F[\phi]}{\delta\phi(\mathbf{r})} \delta\phi(\mathbf{r}) . \quad (3.190)$$

Hierbei bezeichnet $\delta F/\delta\phi(\mathbf{r})$ die Funktionalableitung. Für die Lagrange-Funktion folgt daher

$$\delta L [\phi, \dot{\phi}] = \int d^3r \left(\frac{\delta L}{\delta\phi(\mathbf{r})} \delta\phi(\mathbf{r}) + \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(\mathbf{r})} \delta\dot{\phi}(\mathbf{r}) \right) . \quad (3.191)$$

Durch Integration über die Lagrange-Funktion L entsteht die Wirkung

$$\mathcal{A} [\phi, \dot{\phi}] = \int_{t_1}^{t_2} dt L [\phi, \dot{\phi}] \quad (3.192)$$

mit $t_1 = -\infty$ und $t_2 = \infty$. Für die Variation der Wirkung resultiert

$$\begin{aligned}\delta A &= \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L[\phi, \dot{\phi}] = \int_{t_1}^{t_2} dt d^3r \left(\frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} \delta \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{r}, t)} \delta \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) \right) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt d^3r \left(\frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{r}, t)} \right) \delta \phi(\mathbf{r}, t) \quad .\end{aligned}\quad (3.193)$$

Hierbei wurde partiell integriert und die Randbedingung

$$\delta \phi(\mathbf{r}, t_1) = \delta \phi(\mathbf{r}, t_2) = 0 \quad (3.194)$$

benutzt, sowie die Beziehung

$$\delta \dot{\phi} = \frac{\partial}{\partial t} \delta \phi \quad . \quad (3.195)$$

Es gilt das Hamilton-Prinzip der stationären Wirkung

$$\delta A[\phi, \dot{\phi}] = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L[\phi, \dot{\phi}] = 0 \quad . \quad (3.196)$$

Damit folgt die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{\delta L}{\delta \phi} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} = 0 \quad . \quad (3.197)$$

Wir betrachten nur lokale Theorien. Wir wollen jetzt die Situation untersuchen, bei der die Lagrange-Funktion von der Feldfunktion ϕ , deren zeitlichen Ableitung $\dot{\phi}$ und zusätzlich noch vom Gradienten $\nabla \phi$ abhängt. Die Beschränkung auf lokale Lagrange-Dichten mit Ableitungen erster Ordnung erweist sich als ausreichend zur Beschreibung aller bekannten Feldtheorien. Es sei

$$L(t) = \int d^3r \mathcal{L}(\phi(\mathbf{r}, t), \nabla \phi(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}(\mathbf{r}, t)) \quad . \quad (3.198)$$

Unter Benutzung der Lagrange-Dichte \mathcal{L} läßt sich die Variation von $L(t)$ auch schreiben als

$$\begin{aligned}\delta L(t) &= \int d^3r \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi(\mathbf{r}, t)} \delta \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \phi(\mathbf{r}, t))} \delta \nabla \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\mathbf{r}, t)} \delta \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) \right) \\ &= \int d^3r \left(\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi(\mathbf{r}, t)} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \phi(\mathbf{r}, t))} \right) \delta \phi(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\mathbf{r}, t)} \delta \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) \right) \quad .\end{aligned}\quad (3.199)$$

Hierbei wurde benutzt, daß gilt

$$\delta \nabla \phi = \nabla \delta \phi \quad , \quad (3.200)$$

und es wurde partiell integriert. Damit dies zulässig ist, muß man fordern, daß die Felder und ihre Ableitungen an der Oberfläche gegen Null gehen. Durch Vergleich mit (3.191) resultiert als expliziter Ausdruck für die Funktionalableitungen

$$\begin{aligned}\frac{\delta L(t)}{\delta\phi(\mathbf{r},t)} &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{r},t)} - \nabla\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{r},t))} \quad , \\ \frac{\delta L(t)}{\delta\dot{\phi}(\mathbf{r},t)} &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{r},t)} \quad .\end{aligned}\tag{3.201}$$

Die Euler-Lagrange-Gleichung lautet dann ebenfalls explizit

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{r},t)} - \nabla\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{r},t))} - \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{r},t)} = 0 \quad .\tag{3.202}$$

In relativistischer Notation mit

$$x^\mu = (x^0, \mathbf{r}) = (ct, \mathbf{r})\tag{3.203}$$

kann dies geschrieben werden als

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi(x)} - \frac{\partial}{\partial x^\mu}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} = 0 \quad .\tag{3.204}$$

Wieder haben wir die Notation verwendet

$$\frac{\partial\phi}{\partial x^\mu} = \partial_\mu\phi = \left(\frac{1}{c}\partial_t\phi, \nabla\phi\right) \quad .\tag{3.205}$$

Hängt die Lagrange-Funktion von mehreren unabhängigen Feldern ϕ_r mit $r = 1, \dots, N$ ab, so läßt sich dies sofort verallgemeinern zu

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_r} - \frac{\partial}{\partial x^\mu}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_r)} = 0 \quad .\tag{3.206}$$

Schließlich wollen wir noch die Hamiltonsche Formulierung der klassischen Feldtheorie behandeln. In Analogie zur klassischen Punktmechanik definieren wir einen kanonisch konjugierten Impuls $\pi(\mathbf{r}, t)$ zu dem Feld $\phi(\mathbf{r}, t)$ durch

$$\pi(\mathbf{r}, t) = \frac{\delta L}{\delta\dot{\phi}(\mathbf{r}, t)} \quad .\tag{3.207}$$

π ist selbst wieder ein Feld. Der Vergleich mit (3.201) offenbart

$$\pi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{r}, t)} \quad .\tag{3.208}$$

aus der Euler-Lagrange-Gleichung (3.197) erkennen wir, daß gilt

$$\dot{\pi}(\mathbf{r}, t) = \frac{\delta L}{\delta\phi(\mathbf{r}, t)} \quad .\tag{3.209}$$

Die Hamilton-Funktion wird durch eine Legendre-Transformation eingeführt

$$H(t) = \int d^3r \pi(\mathbf{r}, t) \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) - L(t) \quad . \quad (3.210)$$

Die Hamilton-Funktion lässt sich als Integral über eine Hamilton-Dichte $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$ schreiben

$$H(t) = \int d^3r \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \quad (3.211)$$

mit

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \pi(\mathbf{r}, t) \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) - \mathcal{L}(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (3.212)$$

Auch die Hamilton-Gleichungen lassen sich in Analogie zur klassischen Punktmechanik ableiten. Sie lauten

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= \frac{\delta H}{\delta \pi} \quad , \\ \dot{\pi} &= -\frac{\delta H}{\delta \phi} \quad . \end{aligned} \quad (3.213)$$

Um sie abzuleiten, bilden wir die Variationen von H und nutzen die Legendre-Transformation aus

$$\delta H = \int d^3r (\dot{\phi} \delta \pi + \pi \delta \dot{\phi}) - \delta L = \int d^3r (\dot{\phi} \delta \pi - \dot{\pi} \delta \phi) \quad . \quad (3.214)$$

Der letzte Schritt folgt, da gilt

$$\delta L = \int d^3r \left(\frac{\delta L}{\delta \phi} \delta \phi + \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} \delta \dot{\phi} \right) = \int d^3r (\dot{\pi} \delta \phi + \pi \delta \dot{\phi}) \quad . \quad (3.215)$$

Ferner ist

$$\delta H = \int d^3r \left(\frac{\delta H}{\delta \pi} \delta \pi + \frac{\delta H}{\delta \phi} \delta \phi \right) \quad . \quad (3.216)$$

Der Vergleich von (3.214) mit (3.216) liefert sofort (3.213).

Da das Funktional $H[\phi, \pi]$ von ϕ, π und von deren Gradienten $\nabla \phi, \nabla \pi$ abhängen kann, lassen sich die Funktionalableitungen in (3.213) in Abhängigkeit von der Hamilton-Dichte explizit schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{\delta H}{\delta \phi} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \phi)} \quad , \\ \frac{\delta H}{\delta \pi} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi)} \quad . \end{aligned} \quad (3.217)$$

Schließlich wollen wir noch untersuchen, welche Rolle die Poisson-Klammern in der Feldtheorie spielen. Für zwei Funktionale $F[\phi, \pi]$ und $G[\phi, \pi]$ definieren wir (3.213)

$$\{F, G\}_{PK} = \int d^3r \left(\frac{\delta F}{\delta \phi(x)} \frac{\delta G}{\delta \pi(x)} - \frac{\delta F}{\delta \pi(x)} \frac{\delta G}{\delta \phi(x)} \right) . \quad (3.218)$$

Aufgrund der Hamilton-Bewegungsgleichung erfüllt die zeitliche Änderung eines Funktionals die Gleichung

$$\dot{F}(t) = \int d^3r \left(\frac{\delta F}{\delta \phi(x)} \dot{\phi}(x) + \frac{\delta F}{\delta \pi(x)} \dot{\pi}(x) \right) = \{F, H\}_{PK} , \quad (3.219)$$

sofern keine explizite Zeitabhängigkeit vorliegt.

In einem wichtigen Spezialfall läßt sich die Funktionalableitung sofort angeben. Es gilt

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' \phi(\mathbf{r}', t) \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (3.220)$$

Hierbei können wir \mathbf{r} ebenso wie t als Parameter des Funktionals betrachten. Die Funktionalableitung nach $\phi(\mathbf{r}', t)$ lautet dann

$$\frac{\delta \phi(\mathbf{r}, t)}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (3.221)$$

Dies wird auch aus der Definitionsgleichung der Funktionalableitung sofort deutlich

$$\delta \phi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r' \frac{\delta \phi(\mathbf{r}, t)}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} \delta \phi(\mathbf{r}', t) . \quad (3.222)$$

Wenn wir die Formulierung über diskrete Zellen vornehmen, können wir es auch sofort einsehen. Dann wird aus $\phi(\mathbf{r}, t)$ in einer Zelle $\phi_j(t)$ und entsprechend

$$\frac{\delta \phi(\mathbf{r}, t)}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} = \lim_{\Delta V_i \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V_i} \frac{\partial \phi_j}{\partial \phi_i} = \lim_{\Delta V_i \rightarrow 0} \frac{\delta_{ij}}{\Delta V_i} = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (3.223)$$

Ebenso folgt natürlich

$$\frac{\delta \pi(\mathbf{r}, t)}{\delta \pi(\mathbf{r}', t)} = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.224)$$

und auch

$$\frac{\delta \pi(\mathbf{r}, t)}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} = \frac{\delta \phi(\mathbf{r}, t)}{\delta \pi(\mathbf{r}', t)} = 0 , \quad (3.225)$$

da ϕ und π unabhängige Funktionale sind. Mit diesen Relationen lassen sich sofort die Poisson-Klammern von ϕ und π mit der Hamilton-Funktion ermitteln. Es ist

$$\begin{aligned} \dot{\phi}(\mathbf{r}, t) &= \{\phi(\mathbf{r}, t), H(t)\}_{PK} = \int d^3r' \frac{\delta \phi(\mathbf{r}, t)}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} \frac{\delta H(t)}{\delta \pi(\mathbf{r}', t)} = \frac{\delta H}{\delta \pi(\mathbf{r}, t)} \\ \dot{\pi}(\mathbf{r}, t) &= \{\pi(\mathbf{r}, t), H(t)\}_{PK} = - \int d^3r' \frac{\delta \pi(\mathbf{r}, t)}{\delta \pi(\mathbf{r}', t)} \frac{\delta H(t)}{\delta \phi(\mathbf{r}', t)} = - \frac{\delta H(t)}{\delta \phi(\mathbf{r}, t)} . \end{aligned} \quad (3.226)$$

Dies sind gerade die Hamilton-Bewegungsgleichungen. Besonders wichtig sind die Poisson-Klammern der Felder untereinander. Es resultiert

$$\begin{aligned} \{\phi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{PK} &= \int d^3r'' \frac{\delta\phi(\mathbf{r}, t)}{\delta\phi(\mathbf{r}'', t)} \frac{\delta\pi(\mathbf{r}', t)}{\delta\pi(\mathbf{r}'', t)} = \int d^3r'' \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \delta^3(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \\ &= \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad . \end{aligned} \quad (3.227)$$

Wegen (3.225) folgt

$$\{\phi(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}', t)\}_{PK} = \{\pi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{PK} = 0 \quad . \quad (3.228)$$

Diese Relationen gelten nur, wenn beide Felder das gleiche Zeitargument $t' = t$ enthalten.

Speziell betrachten wir jetzt das Schrödinger-Feld mit der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = i\hbar\Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\Psi^* \cdot \nabla\Psi - V(\mathbf{r}, t)\Psi^*\Psi \quad . \quad (3.229)$$

Bei der Variation der Wirkung sind $\Psi(\mathbf{r}, t)$ und $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ als zwei unabhängige Felder zu betrachten. Die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Psi} - \nabla \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\Psi)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\Psi}} &= 0 \quad , \\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Psi^*} - \nabla \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\Psi^*)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\Psi}^*} &= 0 \end{aligned} \quad (3.230)$$

führen mit der Lagrange-Dichte (3.229) auf die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\Psi + V(\mathbf{r}, t)\Psi \quad . \quad (3.231)$$

Das zu $\Psi(\mathbf{r}, t)$ kanonisch konjugierte Feld lautet

$$\pi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\Psi}} = i\hbar \Psi^*(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (3.232)$$

Das zu $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ konjugierte Feld verschwindet identisch. Für die Hamilton-Dichte ergibt sich damit

$$\mathcal{H} = \pi \frac{\partial\Psi}{\partial t} - \mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\Psi^* \cdot \nabla\Psi + V(\mathbf{r}, t)\Psi^*\Psi \quad . \quad (3.233)$$

Nach einer partiellen Integration können wir für die Hamilton-Funktion schreiben

$$H = \int d^3r \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (3.234)$$

Für die Poisson-Klammern zwischen den Feldern Ψ und π folgt erneut

$$\begin{aligned} \{\Psi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{PK} &= \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad , \\ \{\Psi(\mathbf{r}, t), \Psi(\mathbf{r}', t)\}_{PK} &= \{\pi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{PK} = 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.235)$$

3.9 Anwendung des Lagrange-Formalismus für Felder

Wir sind ausgegangen von der Lagrange-Funktion

$$L(t) = \int d^3r \mathcal{L}(\phi(\mathbf{r}, t), \nabla\phi(\mathbf{r}, t), \dot{\phi}(\mathbf{r}, t)) \quad , \quad (3.236)$$

die als Integral über die Lagrange-Dichte \mathcal{L} geschrieben wurde. Bei Anwesenheit mehrerer unabhängiger Felder ϕ_r mit $r = 1, \dots, N$ gelten die Euler-Lagrange-Differentialgleichungen

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_r} - \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_r)} = 0 \quad (3.237)$$

mit

$$\partial_\mu \phi = \left(\frac{1}{c} \partial_t \phi, \nabla \phi \right) \quad . \quad (3.238)$$

Ausgehend von der Lagrange-Dichte für das Schrödinger-Feld

$$\mathcal{L} = i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi^* \cdot \nabla \Psi - V(\mathbf{r}, t) \Psi^* \Psi \quad (3.239)$$

resultiert als Bewegungsgleichung die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r}, t) \Psi \quad . \quad (3.240)$$

Für das freie Klein-Gordon-Feld lautet die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} \left(\Psi, \Psi^*, \frac{\partial \Psi}{\partial x^\mu}, \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^\mu} \right) = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} \left(g^{\mu\nu} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^\mu} \frac{\partial \Psi}{\partial x^\nu} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi^* \Psi \right) \quad . \quad (3.241)$$

Es gilt die Einsteinsche Summenkonvention. Der Vorfaktor $\frac{\hbar^2}{2m}$ ist so gewählt, das $\int \mathcal{L} d^3r$ die Dimension einer Energie aufweist. Wir wenden die Euler-Lagrange-Gleichungen (3.237) an. Es folgt

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x^\mu} \right)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} = 0 = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} g^{\mu\nu} \frac{\partial \Psi}{\partial x^\nu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi \right) \quad (3.242)$$

und weiter

$$g^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} \Psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = 0 \quad . \quad (3.243)$$

Dies ist die Klein-Gordon-Gleichung für Ψ . Für die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \varrho (\partial^\mu y) (\partial_\mu y) \quad (3.244)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} &= 0 \quad , \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu y)} &= \varrho \partial^\mu y \quad .\end{aligned}\tag{3.245}$$

Die Euler-Lagrange-Gleichung lautet dann

$$\square y \equiv \partial_\mu \partial^\mu y = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - \nabla^2 y = 0 \quad .\tag{3.246}$$

Dies ist die Wellengleichung.

Die elektromagnetischen Feldgleichungen sind ebenfalls aus einer Lagrange-Dichte ableitbar

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) - j_\mu A^\mu \quad .\tag{3.247}$$

Die Euler-Lagrange-Gleichungen für die Komponenten A_ν ergeben dann

$$\partial_\mu (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = j^\nu \quad .\tag{3.248}$$

Der Faktor $\frac{1}{4}$ fällt durch die Summation weg. (3.248) ist gerade die kovariante Form der inhomogenen Maxwell-Gleichungen. Die Komponente mit $\nu = 0$ ergibt

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \varrho\tag{3.249}$$

mit

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla A_0\tag{3.250}$$

und $\varrho = j^0$. Die räumliche Komponenten ergeben

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{j}\tag{3.251}$$

mit

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad .\tag{3.252}$$

Auch die freie Dirac-Gleichung

$$(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - mc) \Psi(x) = 0\tag{3.253}$$

läßt sich aus einer Lagrange-Dichte ableiten. Die Anwendung der Euler-Lagrange-Gleichung auf die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(x) (i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - mc) \Psi(x)\tag{3.254}$$

mit

$$\bar{\Psi}(x) = \Psi^\dagger(x) \gamma^0\tag{3.255}$$

führt unmittelbar auf die Dirac-Gleichung.

3.10 Das quantisierte Schrödinger-Feld

Den Hamilton-Operator des Schrödinger-Feldes in Operatorform erhalten wir, indem wir von den klassischen Feldgrößen Ψ und Ψ^* zu den Feldoperatoren $\hat{\Psi}$ und $\hat{\Psi}^+$ übergehen

$$\begin{aligned} H [\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}] &= \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\Psi}^+ \cdot \nabla \hat{\Psi} + V(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \right) d^3r \\ &= \int \hat{\Psi}^+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi} d^3r \quad . \end{aligned} \quad (3.256)$$

Der hermitesche Operator H ist ein Funktional der Feldoperatoren $\hat{\Psi}^+$ und $\hat{\Psi}$. Wir setzen jetzt die Entwicklung der Feldoperatoren nach einem vollständigen Funktionensystem $v_k(\mathbf{r})$ ein. Analog zur Rechnung in der klassischen Feldtheorie resultiert

$$H [c^+, c] = \sum_{k, k'} c_k^+ \varepsilon_{kk'} c_{k'} dk dk' \quad . \quad (3.257)$$

Hierbei gilt für die c-Zahlen $\varepsilon_{kk'}$

$$\varepsilon_{kk'} = \int v_k^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] v_{k'} d^3r \quad . \quad (3.258)$$

Wählt man insbesondere für die $v_k(\mathbf{r})$ Eigenfunktionen der stationären Schrödinger-Gleichung zum Eigenwert E_a , so wird

$$\varepsilon_{aa'} = E_a \delta(a, a') \quad (3.259)$$

und

$$H = \sum_a E_a c_a^+ c_a \quad . \quad (3.260)$$

Wir erinnern an dieser Stelle an die erste Quantisierung und stellen eine Beziehung zwischen den klassischen Poisson-Klammern und den quantenmechanischen Kommutatoren her.

Die Poisson-Klammer zwischen zwei physikalischen Größen

$$F = F(q_1, \dots, p_1, \dots, t) \quad , \quad (3.261)$$

$$G = G(q_1, \dots, p_1, \dots, t) \quad , \quad (3.262)$$

die von den kanonischen Variablen q_i und p_i abhängen, war in der klassischen Mechanik definiert durch

$$\{F, G\} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} \right) \quad . \quad (3.263)$$

Dabei ist der Wert der Poisson-Klammer unabhängig von der Wahl der zugrunde liegenden kanonischen Variablen. Ersetzt man in der Definitionsgleichung (3.263) G durch q_i bzw. p_i , so

folgt

$$\{F, q_i\} = \frac{\partial F}{\partial p_i} , \quad (3.264)$$

$$\{F, p_i\} = -\frac{\partial F}{\partial q_i} . \quad (3.265)$$

Für die kanonisch konjugierten Größen q_i und p_i gilt daher

$$\{q_i, q_k\} = 0 , \quad (3.266)$$

$$\{p_i, p_k\} = 0 , \quad (3.267)$$

$$\{p_i, q_k\} = \delta_{ik} . \quad (3.268)$$

Für eine beliebige mechanische Größe (3.261) erhalten wir für die totale zeitliche Veränderung

$$\frac{dF}{dt} = \{H, F\} + \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\text{ex}} . \quad (3.269)$$

Setzt man $F = q_i$ bzw. p_i , so ergeben sich die Hamilton-Gleichungen in Form von Poisson-Klammern

$$\dot{q}_i = \{H, q_i\} , \quad (3.270)$$

$$\dot{p}_i = \{H, p_i\} . \quad (3.271)$$

In der Quantenmechanik gelten für die Orts- und Impulsoperatoren die Kommutatorrelationen

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_k] = 0 , \quad (3.272)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0 , \quad (3.273)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = -i\hbar \delta_{ik} . \quad (3.274)$$

Für die zeitliche Änderung einer Observablen $\hat{\mathcal{F}}$ haben wir in der Quantenmechanik

$$\frac{d\hat{\mathcal{F}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{F}}] + \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial t}\right)_{\text{ex}} \quad (3.275)$$

mit dem Hamilton-Operator $\hat{\mathcal{H}}$. Speziell folgt für die zeitliche Änderung des Orts- und Impulsoperators

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}_i] , \quad (3.276)$$

$$\frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_i] . \quad (3.277)$$

Offensichtlich können wir den Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik in erster Quantisierung vollziehen, indem wir die klassische Poisson-Klammer durch den quantenmechanischen Kommutator multipliziert mit $\frac{i}{\hbar}$ ersetzen,

$$\{L, M\} = N \quad \longrightarrow \quad \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{M}}] = \hat{\mathcal{N}} , \quad (3.278)$$

und die klassischen Größen durch die zugeordneten quantenmechanischen Operatoren substituieren.

Gleichermaßen gehen wir jetzt für die Feldtheorie vor. In der klassischen Feldtheorie war die Poisson-Klammer definiert durch

$$\{F, G\}_{\text{PK}} = \int d^3r \left(\frac{\delta F}{\delta \phi} \frac{\delta G}{\delta \pi} - \frac{\delta F}{\delta \pi} \frac{\delta G}{\delta \phi} \right) , \quad (3.279)$$

wobei F und G Funktionale des Feldes $\phi(\mathbf{r}, t)$ und des kanonischen Impulses $\pi(\mathbf{r}, t)$ sind,

$$F = F[\phi, \pi] , \quad (3.280)$$

$$G = G[\phi, \pi] . \quad (3.281)$$

Speziell resultieren die Poisson-Klammern

$$\{\phi(\mathbf{r}, t), \phi(\mathbf{r}', t)\}_{\text{PK}} = 0 , \quad (3.282)$$

$$\{\pi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{\text{PK}} = 0 , \quad (3.283)$$

$$\{\phi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{\text{PK}} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (3.284)$$

Die zeitliche Änderung eines Funktionals erfüllt die Gleichung

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\}_{\text{PK}} \quad (3.285)$$

mit der Hamilton-Funktion $H = H[\phi, \pi]$. Die Hamilton-Gleichung in Form von Poisson-Klammern lauten dementsprechend

$$\frac{d\phi(\mathbf{r}, t)}{dt} = \{\phi(\mathbf{r}, t), H(t)\}_{\text{PK}} , \quad (3.286)$$

$$\frac{d\pi(\mathbf{r}, t)}{dt} = \{\pi(\mathbf{r}, t), H(t)\}_{\text{PK}} . \quad (3.287)$$

Speziell für das Schrödinger-Feld gilt entsprechend

$$\pi(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = i\hbar \Psi^*(\mathbf{r}, t) , \quad (3.288)$$

$$H = \int d^3r \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) , \quad (3.289)$$

$$\{\Psi(\mathbf{r}, t), \Psi(\mathbf{r}', t)\}_{\text{PK}} = 0 , \quad (3.290)$$

$$\{\pi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{\text{PK}} = 0 , \quad (3.291)$$

$$\{\Psi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)\}_{\text{PK}} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (3.292)$$

Die zweite Quantisierung bzw. die kanonische Feldquantisierung geschieht nun dadurch, daß wir $\Psi(\mathbf{r}, t)$ und $\pi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ zu Operatoren $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ und $\hat{\pi}(\mathbf{r}, t) = i\hbar\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, t)$ machen. Die komplex konjugierte Wellenfunktion $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ wird durch den hermitesch adjungierten Feldoperator $\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, t)$ ersetzt. Ebenso werden die Poisson-Klammern durch Kommutatorrelationen ersetzt. Wir fordern die „gleichzeitigen Kommutatorrelationen“

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] = 0 \quad , \quad (3.293)$$

$$[\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}', t)] = 0 \quad , \quad (3.294)$$

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}', t)] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad . \quad (3.295)$$

Durch die Verwendung von $\hat{\Psi}^+$ hat sich der sonst auftretende Faktor $i\hbar$ herausgehoben. Wir werden nachweisen, daß durch diese Forderung der Quantisierung gerade Bose-Teilchen beschrieben werden.

Wir erinnern jetzt an die Entwicklung der Feldoperatoren in einen vollständigen Satz orthonormierter Funktionen

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \int_k c_k(t) v_k(\mathbf{r}) dk \quad . \quad (3.296)$$

Die Multiplikation von (3.293) mit $v_k(\mathbf{r}) v_{k'}(\mathbf{r}') d^3r d^3r'$ liefert nach Ortsintegration die entsprechende Vertauschungsrelation der Operatoren c_k . Diese Operatoren, die speziell den Kommutatorrelationen des Bose-Feldes genügen, bezeichnen wir mit b_k . So folgt insgesamt

$$[b_k(t), b_{k'}(t)] = 0 \quad , \quad (3.297)$$

$$[b_k^+(t), b_{k'}^+(t)] = 0 \quad , \quad (3.298)$$

$$[b_k(t), b_{k'}^+(t)] = \delta(k, k') \quad . \quad (3.299)$$

Bei Fermi-Teilchen muß dem Pauli-Prinzip Rechnung getragen werden. Wie wir bereits gesehen haben, wird dies durch Antikommutatorrelationen erreicht. Die Feldoperatoren erfüllen für Fermionen daher die Relationen

$$\{\hat{\Psi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{i'}(\mathbf{r}', t)\} = 0 \quad , \quad (3.300)$$

$$\{\hat{\Psi}_i^+(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{i'}^+(\mathbf{r}', t)\} = 0 \quad , \quad (3.301)$$

$$\{\hat{\Psi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{i'}^+(\mathbf{r}', t)\} = \delta_{ii'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad . \quad (3.302)$$

Die erste Gleichung (3.300)

$$\hat{\Psi}_i(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{i'}(\mathbf{r}', t) = -\hat{\Psi}_{i'}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_i(\mathbf{r}, t) \quad (3.303)$$

ist der quantenfeldtheoretische Ausdruck des Paulischen Antisymmetrieprinzips. Eine essentielle Folge davon ist, daß die Feldoperatoren an verschiedenen Orten nicht kommutieren

$$[\hat{\Psi}_i(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{i'}(\mathbf{r}', t)]_- \neq 0 \quad . \quad (3.304)$$

Dies impliziert, daß man das Fermi-Feld nicht ausmessen kann. Würde man das Feld an einem Raum-Zeit-Punkt bestimmen, so verliert durch eine weitere Messung des Feldes an einem anderen Ort die erste Messung ihre Bedeutung. Setzt man insbesondere $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ und $i = i'$, so ergibt sich

$$\hat{\Psi}_i^2(\mathbf{r}, t) = 0 \quad . \quad (3.305)$$

Dies ist die Beschreibung dafür, daß keine zwei Elektronen denselben Ort und den gleichen Spin einnehmen können. Wie bei den Bosonen können wir auf die Entwicklungskoeffizienten $c_k(t)$ übergehen. Für Fermionen bezeichnen wir sie mit $a_k(t)$, und es gilt

$$\{a_k(t), a_{k'}(t)\} = 0 \quad , \quad (3.306)$$

$$\{a_k^\dagger(t), a_{k'}^\dagger(t)\} = 0 \quad , \quad (3.307)$$

$$\{a_k(t), a_{k'}^\dagger(t)\} = \delta(k, k') \quad . \quad (3.308)$$

Die zeitliche Änderung des Feldoperators $\hat{\Psi}$ bestimmt sich aus

$$\frac{d\hat{\Psi}(\mathbf{r})}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Psi}(\mathbf{r})] \quad . \quad (3.309)$$

Sowohl für Bosonen wie auch für Fermionen gilt der Kommutator. Der Hamilton-Operator ist

$$\hat{\mathcal{H}}[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}] = \int \hat{\Psi}^+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi} d^3r \quad . \quad (3.310)$$

3.11 Teilchenzahl-Operatoren

Zunächst wollen wir den Kommutator zwischen $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ und irgendeiner Observablen

$$\mathcal{F} = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}') \hat{F}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') d^3r' \quad (3.311)$$

auswerten. Beispielsweise ist der Hamilton-Operator

$$H[\hat{\Psi}^+, \hat{\Psi}] = \int \hat{\Psi}^+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi} d^3r \quad (3.312)$$

oder der Operator des Gesamtimpulses

$$\mathbf{P} = -i\hbar \int \hat{\Psi}^+ \text{grad} \hat{\Psi} d^3r \quad (3.313)$$

von dieser Form. $\hat{F}(\mathbf{r}')$ ist im allgemeinen ein Differentialausdruck in \mathbf{r}' , der auf $\hat{\Psi}(\mathbf{r}')$ wirkt. Mit Hilfe der Relation

$$[\mathcal{F}_1 \mathcal{F}_2, \mathcal{G}]_- = \mathcal{F}_1 [\mathcal{F}_2, \mathcal{G}]_{\mp} \pm [\mathcal{F}_1, \mathcal{G}]_{\mp} \mathcal{F}_2 \quad , \quad (3.314)$$

die wir bereits behandelt hatten, resultiert

$$[\mathcal{F}, \hat{\Psi}(\mathbf{r})]_{\mp} = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}') \hat{F}(\mathbf{r}') [\hat{\Psi}(\mathbf{r}'), \hat{\Psi}(\mathbf{r})]_{\mp} d^3r' \pm \int [\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}'), \hat{\Psi}(\mathbf{r})]_{\mp} \hat{F}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') d^3r' . \quad (3.315)$$

Jetzt ist das Resultat unabhängig davon, ob wir die Vertauschungsrelationen von Bosonen oder Fermionen verwenden. Es ergibt sich stets

$$[\mathcal{F}, \hat{\Psi}(\mathbf{r})]_{\mp} = -\hat{F}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) . \quad (3.316)$$

Aufgrund der Hermitizität von \mathcal{F} folgt hieraus

$$[\mathcal{F}, \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})]_{\mp} = \hat{F}^*(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) . \quad (3.317)$$

Der Operator der zeitlichen Veränderung des Materiefeldes bestimmt sich im Bose- wie im Fermi-Fall aus dem Kommutator zwischen H und $\hat{\Psi}$

$$\frac{d}{dt} \hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{\Psi}(\mathbf{r})] . \quad (3.318)$$

Mit (3.312) und (3.316) erhalten wir sofort

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\Psi} + V \hat{\Psi} . \quad (3.319)$$

Dies ist die Schrödinger-Gleichung in Operatorform. Im Heisenberg-Bild wird die Zeitabhängigkeit durch die Operatoren getragen, und es gilt

$$\frac{d}{dt} \hat{\Psi}^H(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \hat{\Psi}^H(\mathbf{r}, t)}{\partial t} . \quad (3.320)$$

Damit wird (3.319) zu einer partiellen Differentialgleichung für die Operatorfunktion $\hat{\Psi}^H(\mathbf{r}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}^H}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\Psi}^H + V \hat{\Psi}^H . \quad (3.321)$$

Der Feldoperator $\hat{\Psi}^H(\mathbf{r}, t)$ im Heisenberg-Bild genügt der Schrödingerschen Feldgleichung. Die Zeitentwicklung wird durch eine unitäre Transformation vermittelt.

$$\hat{\Psi}^H(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H^H(t - t_0) \right\} \hat{\Psi}^H(\mathbf{r}, t_0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H^H(t - t_0) \right\} . \quad (3.322)$$

Im Schrödinger-Bild hingegen ist natürlich $\hat{\Psi}^S$ als explizit zeitunabhängiger Operator zeitlich konstant

$$\frac{\partial \hat{\Psi}^S}{\partial t} = 0 . \quad (3.323)$$

Erneut können wir die Feldoperatoren nach einem vollständigen Funktionensystem $v_k(\mathbf{r})$ entwickeln.

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_k(t) v_k(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.324)$$

Damit wird aus (3.319)

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_k = \sum_{k'} \varepsilon_{kk'} c_{k'} \quad . \quad (3.325)$$

Durch die Feldquantisierung erhalten wir für den Teilchenzahl-Operator

$$\mathcal{N} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d^3r = \sum_k b_k^\dagger b_k \quad . \quad (3.326)$$

Aus Einfachheitsgründen beschränken wir uns auf diskrete k -Werte. \mathcal{N} setzt sich additiv aus den Beiträgen $b_k^\dagger b_k$ der einzelnen Partialwellen zusammen. Die Anteile

$$\mathcal{N}_k = b_k^\dagger b_k \quad (3.327)$$

bezeichnet man als Besetzungszahl-Operatoren. \mathcal{N}_k ist hermitesch. Aus der Bose-Vertauschungsrelation folgt

$$b_i \mathcal{N}_k = b_i b_k^\dagger b_k = (b_k^\dagger b_i + \delta_{ik}) b_k \quad (3.328)$$

oder

$$[b_i, \mathcal{N}_k] = \delta_{ik} b_k \quad . \quad (3.329)$$

Der Übergang zur adjungierten Gleichung liefert

$$[b_i^\dagger, \mathcal{N}_k] = -\delta_{ik} b_k^\dagger \quad . \quad (3.330)$$

Für $i \neq k$ ist also \mathcal{N}_k mit b_i und b_i^\dagger vertauschbar. Für $i = k$ erhalten wir genau die beim harmonischen Oszillator abgeleiteten Relationen. Die Besetzungszahl-Operatoren \mathcal{N}_i und \mathcal{N}_k sind untereinander vertauschbar,

$$[\mathcal{N}_i, \mathcal{N}_k]_- = 0 \quad , \quad (3.331)$$

denn es ist

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_i \mathcal{N}_k - \mathcal{N}_k \mathcal{N}_i &= b_i^\dagger b_i \mathcal{N}_k - \mathcal{N}_k b_i^\dagger b_i = b_i^\dagger (\mathcal{N}_k b_i + \delta_{ik} b_k) - \mathcal{N}_k b_i^\dagger b_i \\ &= \mathcal{N}_k b_i^\dagger b_i - \delta_{ik} (b_k^\dagger b_i - b_i^\dagger b_k) - \mathcal{N}_k b_i^\dagger b_i = 0 \quad . \end{aligned} \quad (3.332)$$

Da die verschiedenen Besetzungszahl-Operatoren miteinander vertauschen, besitzen sie einen gemeinsamen Satz von Eigenvektoren

$$\mathcal{N}_k |u_{N_1, N_2, \dots, N_k, \dots}\rangle = N_k |u_{N_1, N_2, \dots, N_k, \dots}\rangle \quad . \quad (3.333)$$

Wir wählen einen festen Index k . Die Vertauschungsrelationen von \mathcal{N}_k mit b_k und b_k^+ stimmen mit jenen des harmonischen Oszillators überein, und wir können somit die dort gewonnenen Ergebnisse übertragen. Die Eigenwerte N_k der Besetzungszahl-Operatoren \mathcal{N}_k sind im Bose-Fall positive ganze Zahlen,

$$N_k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.334)$$

Die Eigenwerte des Gesamtteilchenzahl-Operators \mathcal{N} sind die Summe

$$N = \sum_k N_k \quad . \quad (3.335)$$

Entwickelt man das Feld nach Eigenfunktionen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung $v_k(\mathbf{r}) = u_a(\mathbf{r})$, so hat der Hamilton-Operator die Gestalt

$$H = \sum_a E_a \mathcal{N}_a \quad . \quad (3.336)$$

Mit der Diagonalisierung der \mathcal{N}_a erhält man damit auch die Gesamtenergie des Feldes. Die möglichen Eigenwerte E von H

$$H |u_{N_1, \dots}\rangle = E |u_{N_1, \dots}\rangle \quad (3.337)$$

lauten dann

$$E = \sum_a E_a N_a \quad . \quad (3.338)$$

Die Gesamtenergie des Feldes ist eine Summe ganzzahliger Vielfacher von E_a . Sie verhält sich so, als ob sie durch N_a Teilchen der Energie E_a aufgebaut wäre. Die zu den Energieeigenwerten E_a gehörigen Besetzungszahl-Operatoren \mathcal{N}_a sind mit H vertauschbar. Sie sind Erhaltungsgrößen

$$\frac{d}{dt} \mathcal{N}_a = \frac{i}{\hbar} [H, \mathcal{N}_a] = 0 \quad . \quad (3.339)$$

Aus der Behandlung des harmonischen Oszillators können wir auch die Wirkung der Operatoren b_k und b_k^+ auf die Eigenvektoren $|u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle$ übernehmen. b_k^+ erzeugt aus $|u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle$ einen Zustand, in dem die Besetzungszahl N_k um eins erhöht ist

$$b_k^+ |u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle = \sqrt{N_k + 1} |u_{N_1, \dots, N_k + 1, \dots}\rangle \quad . \quad (3.340)$$

b_k hingegen verringert die Besetzungszahl N_k um eins,

$$b_k |u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle = \sqrt{N_k} |u_{N_1, \dots, N_k-1, \dots}\rangle \quad . \quad (3.341)$$

Mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren kann man einen beliebigen Vektor $|u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle$ aus dem Vakuum

$$|0\rangle = |u_{00\dots0\dots}\rangle \quad (3.342)$$

erzeugen. Im Vakuum ist kein Teilchen vorhanden

$$b_k |0\rangle = 0 \quad . \quad (3.343)$$

Wir haben

$$|u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! \dots N_k! \dots}} (b_1^+)^{N_1} \dots (b_k^+)^{N_k} \dots |0\rangle \quad . \quad (3.344)$$

Numerieren wir die Zustände $|u\rangle$ nicht durch die Besetzungszahlen N_1, \dots, N_k, \dots , sondern durch die Quantenzahlen k, l, \dots , so hat man

$$\begin{aligned} N = 0 & & |0\rangle & , \\ N = 1 & & |u_k\rangle = b_k^+ |0\rangle & , \\ N = 2 & & |u_{kl}\rangle = b_k^+ b_l^+ |0\rangle = |u_{lk}\rangle & \quad \text{für } k \neq l \\ & & \frac{1}{\sqrt{2}} (b_k^+)^2 |0\rangle & \end{aligned} \quad (3.345)$$

Wegen der Vertauschbarkeit der Operatoren b_k^+ sind die Zustände $|u_{kl\dots}\rangle$ symmetrisch in den Quantenzahlen. Eine Nummerierung der Teilchen kommt überhaupt nicht ins Spiel, weil von vornherein stets nur von der Anzahl der Teilchen die Rede ist.

Alle Linearkombinationen von Zuständen (3.344) bilden die Gesamtheit aller symmetrischen Zustände. Sie spannen den symmetrischen unitären Raum U^+ der Bosonen auf. Wählt man einen festen Eigenwert N von \mathcal{N} , so hat man es mit dem Unterraum U_N^+ zu tun, in dem ein System mit fester Teilchenzahl beschrieben wird.

Wir wollen jetzt den Zusammenhang mit der üblichen Schrödinger-Gleichung herstellen. Dazu betrachten wir den Unterraum mit einem Teilchen, also $N = 1$. Dann ist

$$|u_k\rangle = b_k^+ |0\rangle \quad (3.346)$$

ein Einteilchenzustand. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für diesen Zustand kann man schreiben als

$$\phi(k) \equiv \langle u_k | \phi \rangle = \langle 0 | b_k \phi \rangle \quad . \quad (3.347)$$

Identifizieren wir b_k insbesondere mit dem Feldoperator $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$, so wird

$$|u_k\rangle = \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})|0\rangle \quad (3.348)$$

der Ortseigenvektor eines Teilchens. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für eine Ortsmessung lautet daher

$$\phi(\mathbf{r}) = \langle 0|\Psi(\mathbf{r})\phi\rangle \quad (3.349)$$

Im Heisenberg-Bild erfüllt $\hat{\Psi}^H(\mathbf{r}, t)$ die Schrödinger-Gleichung. $|\phi^H\rangle$ ist zeitlich konstant. Damit erhalten wir auch wieder für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\phi(\mathbf{r}, t)$ die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + V \phi \quad (3.350)$$

Die Matrixelemente von H im Unterraum eines Teilchens lauten

$$\langle u_{l_1}|H|u_{l_2}\rangle = \sum_{k,k'} \langle 0|b_{l_1}b_k^+\varepsilon_{kk'}b_{k'}b_{l_2}^+|0\rangle \quad (3.351)$$

Aus den Vertauschungsrelationen folgt

$$b_{k'}b_{l_2}^+|0\rangle = (\delta_{k'l_2} + b_{l_2}^+b_{k'})|0\rangle = \delta_{k'l_2}|0\rangle \quad (3.352)$$

Analog folgt

$$\langle 0|b_{l_1}b_k^+ = \delta_{kl_1}\langle 0| \quad (3.353)$$

Damit erhalten wir

$$\langle u_{l_1}|H|u_{l_2}\rangle = \sum_{k,k'} \delta_{kl_1} \varepsilon_{kk'} \delta_{k'l_2} = \varepsilon_{l_1l_2} \quad (3.354)$$

Die Matrixelemente des Hamilton-Operators des Feldes im Unterraum U_1 sind mit den Matrixelementen eines Teilchens identisch.

3.12 Teilchenzahl-Operatoren für Fermionen

Die Besetzungszahl-Operatoren

$$\mathcal{N}_k = a_k^+ a_k \quad (3.355)$$

für Fermionen haben relativ einfache Eigenschaften, da gilt

$$a_k^2 = 0 \quad , \quad (3.356)$$

$$a_k^{+2} = 0 \quad (3.357)$$

und

$$a_k a_k^+ + a_k^+ a_k = 1 \quad (3.358)$$

Wir betrachten das Quadrat von \mathcal{N}_k , also

$$\mathcal{N}_k^2 = a_k^+ a_k a_k^+ a_k = a_k^+ (a_k a_k^+) a_k = a_k^+ (1 - a_k^+ a_k) a_k = a_k^+ a_k \quad . \quad (3.359)$$

Damit haben wir

$$\mathcal{N}_k^2 = \mathcal{N}_k \quad . \quad (3.360)$$

Für verschiedene Indizes gilt aufgrund der Antikommutatorrelation die Vertauschbarkeit der \mathcal{N}_k untereinander,

$$[\mathcal{N}_i, \mathcal{N}_k] = 0 \quad . \quad (3.361)$$

Die Besetzungszahl-Operatoren besitzen somit einen gemeinsamen Satz von Eigenwerten

$$\mathcal{N}_k |u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle = N_k |u_{N_1, \dots, N_k, \dots}\rangle \quad . \quad (3.362)$$

Auch für die Eigenwerte gilt

$$N_k^2 = N_k \quad . \quad (3.363)$$

Damit finden wir für Fermionen die Lösungen

$$N_k = 0, 1 \quad . \quad (3.364)$$

In einem Zustand k kann sich höchstens ein Teilchen befinden. Dies ist Ausdruck des Pauli-Prinzips.

Es gilt demnach

$$a_k^+ a_k |u_{\dots, 0_k, \dots}\rangle = 0 \quad , \quad (3.365)$$

$$a_k^+ a_k |u_{\dots, 1_k, \dots}\rangle = |u_{\dots, 1_k, \dots}\rangle \quad . \quad (3.366)$$

Wir wollen jetzt die Wirkung der Operatoren a_k und a_k^+ auf diese Eigenvektoren erarbeiten. Dazu wenden wir zunächst a_k auf (3.365) an und erhalten unter Verwendung von (3.358)

$$(1 - a_k^+ a_k) a_k |u_{\dots, 0_k, \dots}\rangle = 0 \quad . \quad (3.367)$$

Aufgrund von (3.356) verschwindet aber der zweite Term, und wir bekommen

$$a_k |u_{\dots, 0_k, \dots}\rangle = 0 \quad . \quad (3.368)$$

Befindet sich kein Teilchen im Zustand k , so liefert die Anwendung von a_k Null. Wir multiplizieren (3.366) mit a_k^+ . Die linke Seite verschwindet aufgrund von (3.357). Damit haben wir

$$a_k^+ |u_{\dots,1_k,\dots}\rangle = 0 \quad . \quad (3.369)$$

Der Eigenwert 1 kann nicht überschritten werden. Die Beziehung

$$a_k^+ a_k a_k^+ |u_{\dots,0_k,\dots}\rangle = (1 - a_k a_k^+) a_k^+ |u_{\dots,0_k,\dots}\rangle = a_k^+ |u_{\dots,0_k,\dots}\rangle \quad (3.370)$$

kann man auch in der Form schreiben

$$\mathcal{N}_k |a_k^+ u_{\dots,0_k,\dots}\rangle = |a_k^+ u_{\dots,0_k,\dots}\rangle \quad . \quad (3.371)$$

Dies impliziert, $|a_k^+ u_{\dots,0_k,\dots}\rangle$ ist Eigenvektor von \mathcal{N}_k zum Eigenwert 1. Es gilt also für den Erzeugungsoperator

$$a_k^+ |u_{\dots,0_k,\dots}\rangle = |u_{\dots,1_k,\dots}\rangle \quad (3.372)$$

Der Operator a_k^+ erzeugt ein Fermion im Zustand k . Gleichung (3.365) schreiben wir jetzt in der Form

$$(1 - a_k a_k^+) |u_{\dots,0_k,\dots}\rangle = 0 \quad . \quad (3.373)$$

Wir wenden jetzt a_k auf (3.372) an, dies ergibt nach (3.373)

$$a_k |u_{\dots,1_k,\dots}\rangle = |u_{\dots,0_k,\dots}\rangle \quad . \quad (3.374)$$

Durch a_k wird ein Fermion im Zustand k vernichtet.

Ein beliebiger Eigenvektor läßt sich aus dem Vakuum $|0\rangle$ durch Anwendung der Erzeugungsoperatoren a_k^+ aufbauen. Kennzeichnen wir die Zustände $|u\rangle$ erneut nicht durch die Besetzungszahlen $N_1 \dots$ sondern durch die Quantenzahlen k, l, \dots , so erhalten wir

$$\begin{aligned} N = 0 & & |0\rangle & , \\ N = 1 & & |u_k\rangle = a_k^+ |0\rangle & , \\ N = 2 & & |u_{kl}^- \rangle = a_k^+ a_l^+ |0\rangle = -|u_{lk}^- \rangle & . \\ \vdots & & \vdots & \end{aligned} \quad (3.375)$$

Aufgrund von $a_k^+ a_l^+ = -a_l^+ a_k^+$ sind diese Zustände antisymmetrisch in den Quantenzahlen. Gleiche Quantenzahlen können nicht auftreten. Alle Linearkombinationen der Vektoren bilden den antisymmetrischen Raum U^- der Fermionen.

3.13 Die Fermi-Verteilung

Als Anwendung der zweiten Quantisierung als Vielteilchenformalismus wollen wir die Fermi-Verteilung ableiten. Wir wollen die mittlere Teilchenzahl eines Systems unabhängiger Fermionen berechnen, die sich im thermischen Gleichgewicht in einem Energiezustand k befinden. Entsprechend den Gesetzen der Thermodynamik und statistischen Physik gilt hierfür

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle = \text{Sp} \varrho \mathcal{N}_k \quad . \quad (3.376)$$

Dabei ist \mathcal{N}_k der Teilchenzahl-Operator und ϱ der statistische Operator. Liegt das System mit einer mittleren Energie

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \text{Sp} \varrho \mathcal{H} \quad (3.377)$$

und einer mittleren Teilchenzahl

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \text{Sp} \varrho \mathcal{N} \quad (3.378)$$

vor, so ist ϱ im unitären Raum U^- durch den großkanonischen statistischen Operator

$$\varrho = \frac{e^{-\beta \mathcal{H} + \mu \mathcal{N}}}{\text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H} + \mu \mathcal{N}}} \quad (3.379)$$

zu beschreiben. Dabei ist

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (3.380)$$

und μ das chemische Potential. Wir verwenden

$$\xi = \frac{\mu}{\beta} \quad . \quad (3.381)$$

Aufgrund von

$$\mathcal{H} = \sum_k \varepsilon_k \mathcal{N}_k \quad (3.382)$$

und

$$\mathcal{N} = \sum_k \mathcal{N}_k \quad (3.383)$$

erhalten wir für den statistischen Operator

$$\varrho = \frac{y_1^{\mathcal{N}_1} y_2^{\mathcal{N}_2} \dots}{\text{Sp} (y_1^{\mathcal{N}_1} y_2^{\mathcal{N}_2} \dots)} \quad (3.384)$$

mit der Abkürzung

$$y_k = e^{-\beta \varepsilon_k + \mu} \quad . \quad (3.385)$$

Die Spur in (3.376) berechnen wir in der Besetzungszahl-Darstellung mit den Eigenwerten N_k der Operatoren \mathcal{N}_k . Es folgt

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{N}_k \rangle &= \frac{\sum_{N_1, N_2, \dots, N_k, \dots} y_1^{N_1} y_2^{N_2} \dots y_k^{N_k} \dots N_k}{\sum_{N_1, N_2, \dots, N_k, \dots} y_1^{N_1} y_2^{N_2} \dots y_k^{N_k} \dots} \\ &= \frac{\sum_{N_k} y_k^{N_k} N_k}{\sum_{N_k} y_k^{N_k}} = \frac{y_k}{1 + y_k} \quad . \end{aligned} \quad (3.386)$$

Hierbei wurde ausgenutzt, daß N_k nur die Eigenwerte 0 und 1 annehmen kann. Die mittlere Teilchenzahl in einem Energiezustand k beträgt also im thermischen Gleichgewicht

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle = \frac{1}{e^{-\mu + \beta \varepsilon_k} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \xi)} + 1} \quad . \quad (3.387)$$

Dies ist die Fermi-Verteilung. Am absoluten Nullpunkt mit $T \rightarrow 0$ und daher $\beta \rightarrow \infty$ gilt

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle^0 = \begin{cases} 0 & \text{für } \varepsilon_k > \xi^0 \\ 1 & \text{für } \varepsilon_k < \xi^0 \end{cases} \quad . \quad (3.388)$$

Hierbei ist ξ^0 gleich ξ für $T = 0$. ξ^0 ist die Fermi-Kante. Alle Energiezustände k , die zu Einteilchenenergien ε_k gehören, die kleiner als die Fermi-Kante sind, sind mit einem Fermion besetzt. Alle Zustände, die zu höheren Energien gehören, sind unbesetzt.

Bei endlichen Temperaturen hingegen bestehen auch für die höheren Energien endliche Erwartungswerte $\langle \mathcal{N}_k \rangle$. Diese sind eine Funktion von β , μ und den äußeren Parametern wie Volumen V , Magnetfeld H usw., von denen die Energien $\varepsilon_k = \varepsilon_k(V, H, \dots)$ abhängen. Also haben wir

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle = \langle \mathcal{N}_k \rangle(\beta, \mu, V, H, \dots) \quad . \quad (3.389)$$

Die mittlere Gesamtteilchenzahl ist

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \sum_k \frac{1}{e^{-\mu + \beta \varepsilon_k} + 1} = \langle \mathcal{N} \rangle(\beta, \mu, V, H, \dots) \quad . \quad (3.390)$$

Diese Relation kann man dazu benutzen, um das chemische Potential μ als Funktion von $\langle \mathcal{N} \rangle$ zu bestimmen.

3.14 Die Hartree-Fock-Theorie

Wir haben bislang hauptsächlich Systeme freier Teilchen behandelt. Nun soll ein System von Fermionen beschrieben werden, die untereinander mit einer 2-Teilchen-Wechselwirkung koppeln. Für den Hamilton-Operator des Systems, ausgedrückt durch die Feldoperatoren $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ machen wir den folgenden Ansatz

$$H = H_0 + H_1 \quad , \quad (3.391)$$

wobei H_0 der freie Hamilton-Operator ist

$$H_0 = \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \mathcal{D}_x \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (3.392)$$

\mathcal{D}_x bezeichnet den freien Schrödinger-Differentialoperator

$$\mathcal{D}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (3.393)$$

Mit x fassen wir \mathbf{r} und t abkürzend zusammen. Der 2-Teilchen-Wechselwirkungsoperator soll lauten

$$H_1 = \frac{1}{2} \int d^3r' d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \quad . \quad (3.394)$$

Die Funktion $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ist das Wechselwirkungspotential, von dem wir annehmen, daß es reell und symmetrisch ist,

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad . \quad (3.395)$$

Im Falle eines Systems von wechselwirkenden Elektronen ist zum Beispiel

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3.396)$$

das wechselseitige Coulomb-Potential. Der Faktor $\frac{1}{2}$ in (3.394) soll die Doppelzählung der Beiträge zur Wechselwirkungsenergie aufheben.

Wir betrachten nun die Bewegungsgleichung für den Feldoperator $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$. Es gilt für die Dynamik der Operatoren

$$\frac{d}{dt} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)] \quad . \quad (3.397)$$

Daraus bekommen wir die Heisenberg-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), H] \quad . \quad (3.398)$$

Dieser Kommutator enthält zwei Anteile. Im Heisenberg-Bild hatten wir im Fall der freien Schrödinger-Gleichung den freien Anteil bereits ausgewertet

$$[\hat{\Psi}(x), H_0] = \int d^3x' [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')] \mathcal{D}_{x'} \hat{\Psi}(x') = \mathcal{D}_x \hat{\Psi}(x) \quad . \quad (3.399)$$

Im folgenden nutzen wir erneut die Relation aus

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\} \quad , \quad (3.400)$$

oder ausgeschrieben

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \quad . \quad (3.401)$$

Auch den Wechselwirkungsbeitrag können wir mit der Identität (3.400) so umformen, so daß wir die Antikommutatorrelationen der Feldoperatoren im Rahmen der kanonischen Quantisierung verwenden können. Es ist

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(x), H_1] &= \frac{1}{2} \int d^3x' d^3x'' U(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'')] \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x' d^3x'' U(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') (\hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x') [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'')] \\ &\quad + [\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x')] \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'')) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x' d^3x'' U(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') (\hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'') \\ &\quad - \hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'') \hat{\Psi}(x) + \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'') \\ &\quad - \hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'')) \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x' d^3x'' U(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') [\hat{\Psi}^+(x'') \hat{\Psi}^+(x') (\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')\} \hat{\Psi}(x'') \\ &\quad - \hat{\Psi}(x') \{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x'')\}) + (\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x'')\} \hat{\Psi}^+(x') \\ &\quad - \hat{\Psi}^+(x'') \{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^+(x')\}) \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'')] \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x' d^3x'' U(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') (\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \hat{\Psi}^+(x') \\ &\quad - \hat{\Psi}^+(x'') \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')) \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x'') \\ &= \frac{1}{2} \int d^3x' (U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) + U(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x') \hat{\Psi}(x) \quad . \quad (3.402) \end{aligned}$$

Aufgrund der Symmetriebedingung des Potentials erhalten wir schließlich für den Kommutator

$$[\hat{\Psi}(x), H_1] = \int d^3x' \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x') U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \hat{\Psi}(x) \quad . \quad (3.403)$$

Damit lautet die Bewegungsgleichung für den Feldoperator

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(x) - \mathcal{D}_x \hat{\Psi}(x) - \int d^3x' \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x') U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \hat{\Psi}(x) = 0 \quad . \quad (3.404)$$

Dies ist eine nichtlineare partielle Integrodifferentialgleichung für den Feldoperator. Wegen ihrer relativ komplizierten Struktur kann man nicht ohne weiteres hoffen, eine exakte Lösung zu finden, sondern man ist auf Näherungsmethoden angewiesen. Es sei nochmals darauf hingewiesen, daß es sich bei $\hat{\Psi}(x)$ nicht um eine c -Zahlen-Funktion handelt. Dann könnte man das Problem mit numerischen Integrationsmethoden behandeln. Vielmehr ist $\hat{\Psi}(x)$ ein nichtkommutierender Hilbert-Raum-Operator.

Um (3.404) in eine lösbare Form zu bringen, wird man daher wieder versuchen, von den Operatoren zu klassischen Funktionen überzugehen. Zur Trennung von Orts- und Zeitvariablen entwickeln wir den Feldoperator in eine vollständige und orthogonale Einteilchenbasis $\varphi_i(\mathbf{r})$. Es ist mit $\mathbf{x} = \mathbf{r}$

$$\hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) = \sum_i a_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.405)$$

Für die Operatoren $a_i(t)$ gelten die Antikommutatorrelationen der Fermionen. Der Hamilton-Operator, ausgedrückt durch die Erzeuger und Vernichter, hat nun die folgende Gestalt,

$$H_0 = \sum_{i,j} d_{ij} a_i^+(t) a_j(t) \quad (3.406)$$

mit

$$d_{ij} = \int d^3x \varphi_i^*(\mathbf{x}) D_x \varphi_j(\mathbf{x}) \quad (3.407)$$

und

$$H_1 = \sum_{i,j,k,l} u_{ijkl} a_i^+(t) a_j^+(t) a_k(t) a_l(t) \quad (3.408)$$

mit

$$u_{ijkl} = \frac{1}{2} \int d^3x' d^3x \varphi_i^*(\mathbf{x}') \varphi_j^*(\mathbf{x}) U(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_k(\mathbf{x}) \varphi_l(\mathbf{x}') \quad . \quad (3.409)$$

Als Nebenbetrachtung wählen wir für die $\varphi_i(\mathbf{x})$ Eigenlösungen $u_i(\mathbf{x})$ der stationären Schrödinger-Gleichung mit

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) u_i(\mathbf{x}) = \varepsilon_i u_i(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.410)$$

Damit wird aus dem freien Hamilton-Operator

$$H_0 = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) = \sum_i a_i^+ a_i \varepsilon_i \quad . \quad (3.411)$$

Die Zeitabhängigkeit der Operatoren $a_i(t)$ ist dann durch

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_i(t) = [a_i(t), H_0] = \sum_j \varepsilon_j [a_i(t), a_j^+(t) a_j(t)] = \varepsilon_i a_i(t) \quad (3.412)$$

bestimmt. Dies wird sofort gelöst durch

$$a_i(t) = e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} a_i(0) \equiv e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} a_i \quad . \quad (3.413)$$

Bei Verwendung der Eigenfunktions-Basis unterscheiden sich die Operatoren $a_i(t)$ zu unterschiedlichen Zeiten also nur durch einen zahlenwertigen Phasenfaktor.

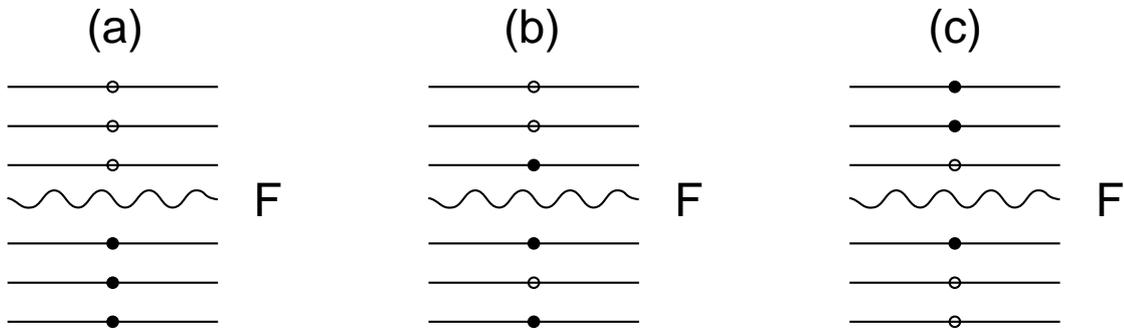
Aufgrund des Wechselwirkungsterms H_1 ist die Zeitentwicklung der Heisenberg-Operatoren $a_i(t)$ im allgemeinen Fall nicht mehr durch einen Phasenfaktor bestimmt. Vielmehr erkennt man an der formalen Lösung der Heisenberg-Gleichung

$$a_i(t) = e^{iHt/\hbar} a_i(0) e^{-iHt/\hbar} \quad , \quad (3.414)$$

daß eine Mischung entsteht. Nur für den speziellen Hamilton-Operator H_0 mit der diagonalen Kopplungsmatrix $d_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij}$ ergibt die Auswertung das einfache Resultat (3.413). Der Kommutator des vollen Hamilton-Operators $[H, a_i]$ enthält jedoch Produkte der Form $a_i a_j^\dagger a_k$. Dies hat zur Folge, daß der Operator $a_i(0)$, der zum Zeitpunkt $t = 0$ ein reiner 1-Teilchen-Vernichtungsoperator war, sich für $t \neq 0$ zu einer komplizierten Überlagerung von Erzeugern und Vernichtern entwickelt. Man kann daher nicht hoffen, daß das wechselwirkende Teilchensystem durch einen n -Teilchen-Zustandsvektor der Form

$$|\Psi\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \quad (3.415)$$

exakt beschrieben werden kann. Die Wellenfunktion des wechselwirkenden System kann nicht durch eine einzelne Slater-Determinante beschrieben werden. Vielmehr enthält der exakte Grundzustand eines Fermionensystems Beimischungen von Teilchen-Loch Anregungen, wie sie durch Operatoren der Art $a_i^\dagger a_j$ generiert werden



Der Grundzustand eines wechselwirkenden Fermionensystems wird näherungsweise durch Auffüllen der Einteilchenniveaus φ_i bis zur Fermi-Kante F beschrieben (a). Der exakte Zustandsvektor enthält jedoch beliebig viele Beimischungen von 1-Teilchen-1-Loch- (b), 2-Teilchen-2-Loch-Konfigurationen (c) etc. In der zu diskutierenden Hartree-Fock-Näherung werden diese jedoch vernachlässigt.

Als essentielle Näherung werden wir jetzt die Mischung mittels Teilchen-Loch-Anregungen, d.h. die Korrelationen, vernachlässigen. Die Zeitentwicklung des Operators $a_i(t)$ ist also durch

das einfache Verhalten

$$a_i(t) = e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} a_i \quad (3.416)$$

determiniert. Der Zustandsvektor ist durch einen reinen Produktzustand festgelegt. Es muß nun die Einteilchenbasis $\varphi_i(\mathbf{x})$ so gewählt werden, so daß die gewählte Näherung möglichst gut ist. Zu diesem Zweck bilden wir Matrixelemente der Bewegungsgleichung (3.404) für den Feldoperator zwischen dem n -Teilchen-Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ und dem $(n-1)$ -Teilchen-Vektoren $a_l|\Psi\rangle$,

$$\langle\Psi|a_l^+ \mathcal{O}|\Psi\rangle = 0 \quad . \quad (3.417)$$

Hier steht \mathcal{O} für die Operatorgleichung (3.404). Natürlich müßte (3.404) nicht nur für diese speziellen Matrixelemente, sondern auch für alle anderen möglichen Matrixelemente zwischen komplizierteren n - und $(n-1)$ -Teilchen-Konfigurationen erfüllt sein. Dies ist jedoch mit einer einzelnen Slater-Determinante so nicht zu erreichen.

Die Bedingung (3.417) führt zu einer Bestimmungsgleichung für die Basisfunktionen $\varphi_i(\mathbf{x})$. Wir werden jetzt die Matrixelemente der einzelnen Terme in (3.404) auswerten. Zunächst bekommen wir

$$\langle\Psi|a_l^+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}|\Psi\rangle = \sum_i \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{x}) \langle\Psi|a_l^+ a_i|\Psi\rangle \quad . \quad (3.418)$$

Mit dem Ansatz (3.415) verschwindet dieser Ausdruck, sofern die Indizes l und i nicht abgepaart sind. Für $l = i$ ergibt sich

$$\langle\Psi|a_l^+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}|\Psi\rangle = n_l \varepsilon_l \varphi_l(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.419)$$

Für den freien Anteil in (3.404) ergibt sich ganz analog

$$\langle\Psi|a_l^+ \mathcal{D}_x \hat{\Psi}(x)|\Psi\rangle = n_l \mathcal{D}_x \varphi_l(\mathbf{x}) \quad . \quad (3.420)$$

Etwas aufwendiger gestaltet sich die Berechnung des Wechselwirkungsterms. Es ist

$$\begin{aligned} \langle\Psi|a_l^+ \int d^3x' \hat{\Psi}^+(x') \hat{\Psi}(x') U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \hat{\Psi}(x)|\Psi\rangle &= \int d^3x' \sum_{i,j,k} U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \varphi_i^*(\mathbf{x}') \varphi_j(\mathbf{x}') \varphi_k(\mathbf{x}) \\ &\langle\Psi|a_l^+ a_i^+ a_j a_k|\Psi\rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.421)$$

Erneut müssen die Indizes abgepaart sein. Dies kann aber auf zwei Weisen geschehen.

$$\begin{aligned} \langle\Psi|a_l^+ a_i^+ a_j a_k|\Psi\rangle &= \delta_{lj} \delta_{ik} \langle\Psi|a_l^+ a_i^+ a_l a_i|\Psi\rangle + \delta_{lk} \delta_{ij} \langle\Psi|a_l^+ a_i^+ a_i a_l|\Psi\rangle \\ &= \delta_{lj} \delta_{ik} \langle\Psi|-\hat{n}_l \hat{n}_i + \delta_{li} \hat{n}_l|\Psi\rangle + \delta_{lk} \delta_{ij} \langle\Psi|\hat{n}_l \hat{n}_i - \delta_{li} \hat{n}_l|\Psi\rangle \\ &= n_l n_i (\delta_{lk} \delta_{ij} - \delta_{lj} \delta_{ik}) \quad . \end{aligned} \quad (3.422)$$

Beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile von (3.422) haben wir ausgenutzt, daß gilt

$$\begin{aligned} a_l^\dagger a_i^\dagger a_l a_i &= a_l^\dagger (1 - a_l a_i^\dagger) a_i \\ &= a_l^\dagger a_i - a_l^\dagger a_l a_i^\dagger a_i = \delta_{li} \hat{n}_l - \hat{n}_l \hat{n}_i \end{aligned} \quad (3.423)$$

und

$$\begin{aligned} a_l^\dagger a_i^\dagger a_i a_l &= -a_l^\dagger a_i^\dagger a_l a_i = -a_l^\dagger (1 - a_l a_i^\dagger) a_i \\ &= -a_l^\dagger a_i + a_l^\dagger a_l a_i^\dagger a_i = -\delta_{li} \hat{n}_l + \hat{n}_l \hat{n}_i \end{aligned} \quad (3.424)$$

Wir setzen jetzt alles in (3.417) ein und kürzen den gemeinsamen Faktor n_l . Wir erhalten

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_x \varphi_l(\mathbf{x}) + \int d^3 x' \sum_i n_i [\varphi_i^*(\mathbf{x}') \varphi_i(\mathbf{x}') U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \varphi_l(\mathbf{x}) \\ - \varphi_i^*(\mathbf{x}') \varphi_l(\mathbf{x}') U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x})] &= \varepsilon_l \varphi_l(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (3.425)$$

Dies ist die Hartree-Fock-Gleichung. Unter Verwendung der Dichtematrix

$$\varrho(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \sum_i n_i \varphi_i^*(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}') = \varrho^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (3.426)$$

schreiben wir diesen Ausdruck etwas um. Die Dichte ist der Diagonalterm

$$\varrho(\mathbf{x}) = \varrho(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \sum_i n_i \varphi_i^*(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (3.427)$$

Damit lautet die Hartree-Fock-Gleichung

$$\mathcal{D}_x \varphi_l(\mathbf{x}) + \int d^3 x' \varrho(\mathbf{x}') U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \varphi_l(\mathbf{x}) - \int d^3 x' \varrho(\mathbf{x}', \mathbf{x}) U(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \varphi_l(\mathbf{x}') = \varepsilon_l \varphi_l(\mathbf{x}) \quad (3.428)$$

Diese Gleichung enthält zwei Wechselwirkungsterme. Der Direktterm mit dem positiven Vorzeichen hat genau die Form, die man aus der klassischen Physik anschaulich erwartet. Das Teilchen im Orbital l spürt das Potential, das durch die Dichteverteilung $\varrho(\mathbf{x}')$ aller Teilchen im System hervorgerufen wird, inklusive der Selbstwechselwirkung für $i = l$. Die Fermi-Dirac-Statistik erzwingt jedoch das zusätzliche Auftreten des Austauschterms. Dieser ist nichtlokal, denn $\varphi_l(\mathbf{x}')$ hängt von allen \mathbf{x}' ab und kann daher nicht als einfache Potential-Wechselwirkung verstanden werden. Ein Nebeneffekt des Austauschterms ist, daß er den Beitrag der Selbstwechselwirkung aufhebt.

Im Gegensatz zur Operatorgleichung (3.404) ist (3.428) ein System von gekoppelten nichtlinearen Integrodifferentialgleichungen für die c -Zahlen-Funktionen $\varphi_l(\mathbf{x})$. Dieses Gleichungssystem kann man durch numerische Integration lösen. Man beginnt mit einem gewählten Satz von Startlösungen $\varphi_l^{(0)}(\mathbf{x})$, berechnet die Dichten und löst (3.428) durch numerische Integration

und generiert so eine verbesserte Lösung $\varphi_i^{(1)}(\boldsymbol{x})$. Dann iteriert man. Die Hartree-Fock-Methode bildet den Grundstein für die Berechnung der Eigenschaften von Vielteilchensystemen in vielen Bereichen der Physik, so zum Beispiel in der Atom-, Kern- und Festkörperphysik. Allerdings erweist es sich häufig als notwendig, über den Ansatz einer Slater-Determinante hinauszugehen und Teilchenkorrelationen zu berücksichtigen.

4 Streutheorie

4.1 Einführung in die Problematik

Neue Objekte in der Physik generiert und untersucht man vielfach im Rahmen von Streuprozessen. Beispielsweise basiert die Erzeugung von Elementarteilchen oder das Studium von Kernkräften auf der Streuung von Teilchen. Als einfachsten Fall können wir die Streuung eines Teilchens an einem vorgegebenen Potential $V(\mathbf{r})$ untersuchen. Dabei nehmen wir an, daß wir Rückstoßeffekte der Quelle, die das Potential generiert, vernachlässigen können. Um asymptotisch freie Zustände zu haben, nehmen wir ferner an, daß das Potential lokalisiert sei und in großen Abständen verschwindet.

Vor der Streuung möge sich das Teilchen in großer Entfernung vom Streuzentrum kräftefrei bewegen. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\phi(\mathbf{r}, t)$ ist für $t \rightarrow -\infty$ ein kräftefreies Wellenpaket. Für die Festlegung des Impulses wird angenommen, daß die Wellenlänge λ wesentlich kleiner als die räumlichen Ausdehnungen l, d des Wellenpakets ist,

$$\lambda \ll l, d \quad . \quad (4.1)$$

In dem Zeitintervall, in dem das Wellenpaket über das Streuzentrum hinwegstreicht, ist das Potential $V(\mathbf{r})$ wirksam. Die Zeitentwicklung des Wellenpakets ist durch den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (4.2)$$

determiniert, wobei wir eine nichtrelativistische Dynamik angenommen haben. Für $t \rightarrow +\infty$ ist das Teilchen wieder außerhalb des Potentials. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\phi(\mathbf{r}, t)$ besteht als Folge des Streuvorgangs aus der durchgehenden Welle und einer nach allen Seiten auslaufenden Streuwelle. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Teilchen in einem unter dem Raumwinkel Ω aufgestellten Detektor D nachgewiesen wird, ist durch $d\Omega \int |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 r^2 dr$ gegeben. Für $d \ll r \sin \Theta$ ist diese Wahrscheinlichkeit ausschließlich durch die Streuwelle bestimmt. Die nach vorwärts gestreute Welle mit $\Theta = 0$ hingegen kann nicht von der durchgehenden Welle getrennt werden.

Die quantentheoretische Behandlung des Streuvorgangs im Schrödinger-Bild besteht darin, daß man die zeitliche Veränderung des Zustandsvektors $|\phi(t)\rangle$ studiert. Wie bei jedem zeitabhängigen Problem ist dafür eine Anfangsbedingung vorzugeben, die die physikalische Situation vor Beginn der Streuung beschreibt. Somit haben wir

$$\begin{array}{ccc} t \rightarrow -\infty & t \text{ endlich} & t \rightarrow +\infty \\ |\phi(t)\rangle & |\phi(t)\rangle & |\phi(t)\rangle \\ \text{vorgegeben} & & \text{gesucht} \\ \mathcal{H}_0 & \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V & \mathcal{H}_0 \end{array} \quad (4.3)$$

Bei der mathematischen Durchführung dieses Problems geht man meist von den Eigenvektoren $|u_a^0\rangle$ des ungestörten Hamilton-Operators

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 \quad (4.4)$$

aus, der kontinuierliche Eigenwerte mit $E_a \geq 0$ besitzt,

$$\mathcal{H}_0 |u_a^0\rangle = E_a |u_a^0\rangle \quad (4.5)$$

Die Eigenvektoren bilden ein vollständiges Basissystem und sind auf δ -Funktionen normiert,

$$\langle u_a^0 | u_{a'}^0 \rangle = \delta(a, a') \quad (4.6)$$

Ein beliebiger kräftefreier Zustand lautet in der Entwicklung nach den Vektoren

$$|\phi(t)\rangle = \sum_a c(a) e^{-\frac{iE_a t}{\hbar}} |u_a^0\rangle da \quad (4.7)$$

Hierbei determinieren die Koeffizienten $c(a)$ die spezielle Form des Pakets. Es gilt die Normierung

$$\sum_a |c(a)|^2 da = 1 \quad (4.8)$$

Im Schrödinger-Bild besteht für den Zustandsvektor $|\phi\rangle$ zwischen zwei Zeiten t und t_0 der Zusammenhang

$$|\phi(t)\rangle = e^{-\frac{i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\phi(t_0)\rangle \quad (4.9)$$

Der Streuzustand $|\phi(t)\rangle$, der sich aus dem für $t \rightarrow -\infty$ vorgegebenem freien Paket entwickelt, lautet daher

$$|\phi(t)\rangle = e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \sum_a c(a) e^{-\frac{i(E_a - \mathcal{H})t_0}{\hbar}} |u_a^0\rangle da \quad (4.10)$$

Den Grenzwert $t_0 \rightarrow -\infty$ transformieren wir jetzt um. Es gilt

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} F(t_0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t'} F(t') dt' \quad (4.11)$$

mit $\varepsilon > 0$. Hierbei ist

$$\varepsilon \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t'} F(t') dt' = \int_{-\infty}^0 e^x F\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx \quad (4.12)$$

mit $\varepsilon t' = x$. Also gilt weiter

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon t'} F(t') dt' &= \int_{-\infty}^0 e^x \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} F\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx \\ &= \int_{-\infty}^0 e^x F(-\infty) dx = F(-\infty) \int_{-\infty}^0 e^x dx = F(-\infty) \quad (4.13) \end{aligned}$$

Damit schreiben wir für (4.10)

$$|\phi(t)\rangle = e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \sum_a c(a) \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{\varepsilon}{\hbar} \int_{-\infty}^0 e^{-\frac{i(E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon)t'}{\hbar}} dt' |u_a^0\rangle da \quad . \quad (4.14)$$

Wir führen die Integration über t' aus. Dies ergibt die Vektoren

$$\begin{aligned} |u_a^{(+)}\rangle &\equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{\varepsilon}{\hbar} \int_{-\infty}^0 e^{-\frac{i(E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon)t'}{\hbar}} dt' |u_a^0\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{i\varepsilon}{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon} |u_a^0\rangle \quad . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Man beachte, daß aufgrund der stationären Schrödinger-Gleichung der Operator $(\mathcal{H} - E_a)^{-1}$ nicht existiert. Man kann daher ε nicht einfach Null setzen. (4.15) läßt sich auch umschreiben in

$$|u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(1 + \frac{1}{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon} V \right) |u_a^0\rangle \quad . \quad (4.16)$$

Es ist

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(1 + \frac{1}{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon} V \right) |u_a^0\rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon + V}{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon} \right) |u_a^0\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{(E_a - \mathcal{H}_0) + i\varepsilon}{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon} \right) |u_a^0\rangle \quad . \end{aligned} \quad (4.17)$$

Wir multiplizieren (4.16) mit $E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon$ und nutzen aus, daß gilt

$$(\mathcal{H}_0 - E_a) |u_a^0\rangle = 0 \quad . \quad (4.18)$$

Es folgt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} (E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon) |u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} i\varepsilon |u_a^0\rangle \quad (4.19)$$

oder

$$\mathcal{H} |u_a^{(+)}\rangle = E_a |u_a^{(+)}\rangle \quad , \quad (4.20)$$

d.h., die Vektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ sind Eigenvektoren des Hamilton-Operators $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$ zu den kontinuierlichen Eigenwerten E_a . Die Vektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ sind auf δ -Funktionen normiert.

Wir definieren den Greenschen Operator

$$\mathcal{G}^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{E - \mathcal{H} \pm i\varepsilon} \quad . \quad (4.21)$$

Damit haben wir

$$|u^{(\pm)}\rangle = \left(1 + \mathcal{G}^{(\pm)} V \right) |u_a^0\rangle \quad . \quad (4.22)$$

Der Streuzustand $|\phi(t)\rangle$ zu einer endlichen Zeit ist eine Linearkombination der Eigenvektoren $|u_a^{(+)}\rangle$. Es gilt

$$|\phi(t)\rangle = \int_a^f c(a) e^{-\frac{iE_a t}{\hbar}} |u_a^{(+)}\rangle da \quad . \quad (4.23)$$

Die Entwicklungskoeffizienten $c(a)$ sind diejenigen der einfallenden, kräftefreien Welle.

Wir hatten gefunden, daß gilt

$$|u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{i\varepsilon}{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon} |u_a^0\rangle \quad . \quad (4.24)$$

In dieser Form ist es nicht einfach, $|u_a^{(+)}\rangle$ zu berechnen. Wir addieren zur rechten Seite $(E_a - \mathcal{H}_0) |u_a^0\rangle = 0$ und lösen nach $|u_a^0\rangle$ auf. Es folgt

$$\begin{aligned} |u_a^0\rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{E_a - \mathcal{H}_0 + i\varepsilon} (E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon) |u_a^{(+)}\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(1 - \frac{1}{E_a - \mathcal{H}_0 + i\varepsilon} V \right) |u_a^{(+)}\rangle \quad . \end{aligned} \quad (4.25)$$

Wir definieren den freien Greenschen Operator

$$\mathcal{G}_0^{(+)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{E_a - \mathcal{H}_0 + i\varepsilon} \quad . \quad (4.26)$$

Dies führt auf die wichtige Relation

$$|u_a^{(+)}\rangle = |u_a^0\rangle + \mathcal{G}_0^{(+)} V |u_a^{(+)}\rangle \quad . \quad (4.27)$$

Dies ist die Lippmann-Schwinger-Gleichung. Wir projizieren diese Gleichung auf eine Basis $|v_\Lambda\rangle$ des Hilbert-Raums. Dies ergibt

$$\langle v_\Lambda | u_a^{(+)} \rangle = \langle v_\Lambda | u_a^0 \rangle + \int_{\Lambda'}^f \int_{\Lambda''}^f \langle v_\Lambda | \mathcal{G}_0^{(+)} v_{\Lambda'} \rangle \langle v_{\Lambda'} | V v_{\Lambda''} \rangle \langle v_{\Lambda''} | u_a^{(+)} \rangle d\Lambda' d\Lambda'' \quad . \quad (4.28)$$

Dies ist eine Integralgleichung für die unbekannte Funktion $\langle v_\Lambda | u_a^{(+)} \rangle = u_a^{(+)}(\Lambda)$. Es gilt demnach

$$u_a^{(+)}(\Lambda) = u_a^0(\Lambda) + \int_{\Lambda'}^f \int_{\Lambda''}^f G_0^{(+)}(\Lambda, \Lambda') V(\Lambda', \Lambda'') u_a^{(+)}(\Lambda'') d\Lambda' d\Lambda'' \quad . \quad (4.29)$$

Hierbei ist

$$V(\Lambda', \Lambda'') = \langle v_{\Lambda'} | V v_{\Lambda''} \rangle \quad (4.30)$$

das Matrixelement des Streupotentials und

$$G_0^{(+)}(\Lambda, \Lambda') = \langle v_\Lambda | \mathcal{G}_0^{(+)} v_{\Lambda'} \rangle \quad (4.31)$$

die freie Greensche Funktion.

In der Impulsdarstellung mit $|v_\Lambda\rangle \rightarrow |u_{\mathbf{p}}\rangle$ ist mit $\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ die Greensche Funktion diagonal,

$$G_0^{(+)}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{E_a - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i\varepsilon} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad . \quad (4.32)$$

Damit wird aus der Integralgleichung

$$u_a^{(+)}(\mathbf{p}) = u_a^0(\mathbf{p}) + \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{E_a - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i\varepsilon} \int V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') u_a^{(+)}(\mathbf{p}') d^3p' \quad . \quad (4.33)$$

Hat man das einfallende Wellenpaket nach ebenen Wellen entwickelt, so wird

$$u_a^0(\mathbf{p}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = \hbar^{\frac{3}{2}} \delta(\mathbf{p} - \hbar \mathbf{k}) \quad . \quad (4.34)$$

Wir wollen nun die Ortsdarstellung der freien Greenschen Funktion ermitteln. Zu diesem Zweck fügen wir Impulswischenzustände ein

$$\begin{aligned} G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \langle u_{\mathbf{r}} | \mathcal{G}_0^{(+)} | u_{\mathbf{r}'} \rangle \\ &= \int \int \langle u_{\mathbf{r}} | u_{\mathbf{p}} \rangle \langle u_{\mathbf{p}} | \mathcal{G}_0^{(+)} | u_{\mathbf{p}'} \rangle \langle u_{\mathbf{p}'} | u_{\mathbf{r}'} \rangle d^3p d^3p' \quad . \end{aligned} \quad (4.35)$$

Mit

$$\langle u_{\mathbf{r}} | u_{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} \quad (4.36)$$

folgt damit

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int \frac{e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\hbar}}}{E_a - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i\varepsilon} d^3p \quad . \quad (4.37)$$

Wir wollen nun die Integration ausführen. Dazu führen wir für \mathbf{p} Polarkoordinaten ein mit der Polarachse in Richtung von $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Es sei

$$R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad . \quad (4.38)$$

Dann gilt

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{e^{\frac{iRp \cos \vartheta}{\hbar}}}{E_a - \frac{p^2}{2m} + i\varepsilon} p^2 dp \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \quad . \quad (4.39)$$

Es folgt sofort

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{e^{\frac{iRp \cos \vartheta}{\hbar}}}{E_a - \frac{p^2}{2m} + i\varepsilon} p^2 dp \sin \vartheta d\vartheta \quad . \quad (4.40)$$

Wir substituieren

$$u = \cos \vartheta \quad (4.41)$$

mit

$$\frac{du}{d\vartheta} = -\sin \vartheta \quad (4.42)$$

und daher

$$\sin \vartheta d\vartheta = -du \quad (4.43)$$

Damit bekommen wir für das verbleibende Winkelintegral

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\pi e^{\frac{iRp \cos \vartheta}{\hbar}} \sin \vartheta d\vartheta = \int_1^{-1} (-du) e^{iRpu/\hbar} \\ &= \int_{-1}^1 du e^{iRpu/\hbar} = \frac{\hbar}{iRp} \left(e^{\frac{iRp}{\hbar}} - e^{-\frac{iRp}{\hbar}} \right) \end{aligned} \quad (4.44)$$

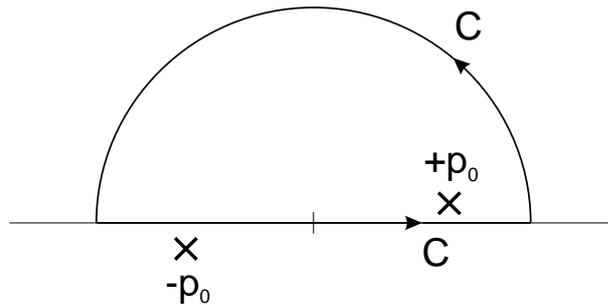
Es verbleibt somit die Berechnung des Integrals

$$\begin{aligned} G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{2\pi\hbar}{(2\pi\hbar)^3 iRp} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_0^\infty \frac{(e^{iRp/\hbar} - e^{-iRp/\hbar})}{E_a + i\varepsilon - \frac{p^2}{2m}} p^2 dp \\ &= \frac{2m}{(2\pi\hbar)^2 iR} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{\frac{iR}{\hbar} p}}{2m(E_a + i\varepsilon) - p^2} dp \end{aligned} \quad (4.45)$$

Dieses verbleibende Integral werten wir mit Hilfe des Residuensatzes in der komplexen p -Ebene aus. Der Integrand besitzt an den Stellen

$$p = \pm p_0 = \pm \sqrt{2m(E_a + i\varepsilon)} \quad (4.46)$$

Pole.



Die Integration wird entlang des Weges C durchgeführt. Das Integral ergibt dann gerade $2\pi i$ -mal das Residuum an der Stelle $+p_0$. Man erkennt hier die Rolle des Vorzeichens von ε . Das Vorzeichen sondert die richtige Lösung aus. Das Integral über den Halbkreis verschwindet. Nach dem Residuensatz gilt

$$\int_C f(p) dp = 2\pi i \operatorname{Res} f(p) \Big|_{p=p_0} \quad (4.47)$$

Ferner gilt für einen Pol m -ter Ordnung

$$\text{Res}f(p)\Big|_{p=p_0} = \frac{1}{(m-1)!} \frac{d^{m-1}}{dp^{m-1}} \left[f(p) \cdot (p-p_0)^m \right] \Big|_{p=p_0} . \quad (4.48)$$

Der vorliegende Pol ist erster Ordnung, d.h. $m = 1$. Es ist

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{iR}{\hbar}p}}{\left(\sqrt{2m(E_a+i\varepsilon)}+p\right)\left(\sqrt{2m(E_a+i\varepsilon)}-p\right)} dp \\ &= 2\pi i \left[\frac{e^{\frac{iR}{\hbar}p} \left(p - \sqrt{2m(E_a+i\varepsilon)}\right) p}{\left(\sqrt{2m(E_a+i\varepsilon)}+p\right)\left(\sqrt{2m(E_a+i\varepsilon)}-p\right)} \right]_{p=p_0} \\ &= -2\pi i \frac{e^{\frac{iR}{\hbar}p_0}}{2p_0} = -\pi i e^{\frac{iR}{\hbar}p_0} . \end{aligned} \quad (4.49)$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \frac{2m}{(2\pi\hbar)^2 iR} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(-\pi i e^{\frac{iR}{\hbar}p_0} \right) \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2 R} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} e^{\frac{iR}{\hbar}p_0} . \end{aligned} \quad (4.50)$$

Wir definieren

$$k_a = \sqrt{\frac{2mE_a}{\hbar^2}} . \quad (4.51)$$

Jetzt führen wir den Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow +0$ durch und bekommen

$$G_0^{(+)} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_a|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} . \quad (4.52)$$

Somit resultiert als Integralgleichung für die Eigenfunktion $u_a^{(+)}(\mathbf{r})$

$$u_a^{(+)}(\mathbf{r}) = u_a^0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik_a|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') u_a^{(+)}(\mathbf{r}') d^3r' . \quad (4.53)$$

Hat man das einfallende Wellenpaket nach ebenen Wellen entwickelt, so gilt hierbei

$$u_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} . \quad (4.54)$$

Wir können auch die entsprechende Gleichung für $|u^{(-)}\rangle$ studieren. Hierbei gilt

$$|u^{(-)}\rangle = |u^0\rangle + \mathcal{G}_0^{(-)} V |u^{(-)}\rangle \quad (4.55)$$

mit

$$\mathcal{G}_0^{(-)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{E - \mathcal{H}_0 - i\varepsilon} \quad (4.56)$$

und $\varepsilon > 0$. Für die Matrixelemente $G_0^{(-)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dieses Operators liefert bei der komplexen Integration der Pol

$$p = -\sqrt{2m(E - i\varepsilon)} \quad (4.57)$$

einen Beitrag, dessen Residuum auf

$$G_0^{(-)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (4.58)$$

führt. $G_0^{(-)}$ nennt man die avancierte, $G_0^{(+)}$ die retardierte Greensche Funktion.

Wir bestimmen nun das asymptotische Verhalten der Lösung $u_a^{(+)}(\mathbf{r})$ für Entfernungen r des Aufpunktes vom Streuzentrum, die groß gegen die Reichweite r' des Potentials sind. Für $r \gg r'$ ersetzen den Nenner in der Greenschen Funktion durch $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow r$. Setzen wir allgemein

$$F = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2rr' \cos \vartheta + r'^2} \quad , \quad (4.59)$$

so erhalten wir mit $r_> = \max(r, r')$ und $r_< = \min(r, r')$ und daher $\frac{r_<}{r_>} < 1$ die Entwicklung

$$r_> \sqrt{1 - 2\frac{r_<}{r_>} \cos \vartheta + \left(\frac{r_<}{r_>}\right)^2} = r_> \left[1 - \cos \vartheta \frac{r_<}{r_>} + \frac{1}{2} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \left(\frac{r_<}{r_>}\right)^2 + \dots \right] \quad . \quad (4.60)$$

Im Argument der Exponentialfunktion der Greenschen Funktion setzen wir in niedrigster Ordnung

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{e}r' \quad (4.61)$$

mit dem Einheitsvektor \mathbf{e} in Richtung zum Aufpunkt

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad . \quad (4.62)$$

Dies bewirkt für (4.53) das asymptotische Verhalten

$$u_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e}) \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r} \right] \quad \text{für } r \rightarrow \infty. \quad (4.63)$$

Damit setzt sich $u_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ zusammen aus einer ebenen Welle und einer Kugelwelle. Die Größe $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e})$ nennt man Streuamplitude. Sie hängt von der Richtung \mathbf{e} ab. Sie ist gegeben durch

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e}) = -\frac{\sqrt{2\pi}m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{e}r'} V(\mathbf{r}') u_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}') d^3r' \quad . \quad (4.64)$$

Die Streuamplitude hat die Dimension einer Länge. Verwenden wir jetzt

$$k\mathbf{e} = \mathbf{q} \quad (4.65)$$

und

$$\langle u_{\mathbf{q}} | u_{\mathbf{r}} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad , \quad (4.66)$$

so können wir auch schreiben

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int \langle u_{\mathbf{q}} | V u_{\mathbf{r}'} \rangle \langle u_{\mathbf{r}'} | u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle d^3 r' \quad . \quad (4.67)$$

Damit können wir die Streuamplitude auch ausdrücken als

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle u_{\mathbf{q}} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \quad . \quad (4.68)$$

Dies ist unabhängig von der zuvor gewählten Ortsdarstellung.

4.2 Die Bornsche Näherung

Wir werden ein Näherungsverfahren behandeln, das es erlaubt, $|u_a^{(+)}\rangle$ als Entwicklung in Potenzen des Störpotentials zu ermitteln. Diese Entwicklung ist anwendbar, wenn das Störpotential die einfallende Welle nur geringfügig verändert. Wir gehen aus von der Gleichung

$$|u_a^{(+)}\rangle = |u_a^0\rangle + \mathcal{G}_0^{(+)} V |u_a^{(+)}\rangle \quad , \quad (4.69)$$

die wir iterativ lösen wollen. Für $V = 0$ lautet die Lösung nullter Ordnung

$$|u_a^{(+0)}\rangle = |u_a^0\rangle \quad . \quad (4.70)$$

Wir setzen diese Lösung in die rechte Seite von (4.69) ein. Es folgt als Lösung erster Ordnung

$$|u_a^{(+1)}\rangle = |u_a^0\rangle + \mathcal{G}_0^{(+)} V |u_a^0\rangle \quad . \quad (4.71)$$

Wiederholen wir dieses Verfahren, so erhalten wir schließlich

$$|u_a^{(+)}\rangle = \left(1 + \mathcal{G}_0^{(+)} V + \left(\mathcal{G}_0^{(+)} V \right)^2 + \dots \right) |u_a^0\rangle \quad . \quad (4.72)$$

Dies ist die Bornsche Reihe. Wenn man das einfallende Wellenpaket nach ebenen Wellen entwickelt hat, so ist $|u_a^0\rangle = |u_{\mathbf{k}}^0\rangle$.

Wir setzen die Näherung $|u_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle \approx |u_{\mathbf{k}}\rangle$ in den Ausdruck für die Streuamplitude ein und erhalten so in erster Bornscher Näherung

$$f_{\mathbf{k}}^1(\mathbf{e}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle u_{\mathbf{q}} | V u_{\mathbf{k}} \rangle \quad . \quad (4.73)$$

In der Ortsdarstellung lautet dieser Ausdruck

$$f_{\mathbf{k}}^1(\mathbf{e}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3 r \quad (4.74)$$

mit $\mathbf{q} = k\mathbf{e}$. Die Streuamplitude ist in erster Bornscher Näherung proportional der Fourier-Transformierten des Potentials.

Wir wollen das dreidimensionale Raumintegral etwas reduzieren, was für kugelsymmetrische Potentiale $V(\mathbf{r})$ leicht möglich ist. Wir führen hierzu Kugelkoordinaten ein und legen die Polachse in Richtung des Vektors $\mathbf{k} - \mathbf{q}$. Es folgt

$$f_{\mathbf{k}}^1(\mathbf{e}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{i|\mathbf{k}-\mathbf{q}|r \cos \vartheta} V(r) r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \quad . \quad (4.75)$$

Die Integration über φ liefert sofort

$$f_{\mathbf{k}}^1(\mathbf{e}) = -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{i|\mathbf{k}-\mathbf{q}|r \cos \vartheta} V(r) r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta \quad . \quad (4.76)$$

Mit der Substitution $u = \cos \vartheta$ führen wir die Integration über ϑ durch. Es resultiert

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}^1(\mathbf{e}) &= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{-1}{i|\mathbf{k}-\mathbf{q}|r} [e^{-i|\mathbf{k}-\mathbf{q}|r} - e^{i|\mathbf{k}-\mathbf{q}|r}] V(r) r^2 dr \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \frac{2}{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} \int_0^\infty V(r) r \sin(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|r) dr \quad . \end{aligned} \quad (4.77)$$

Es ist jetzt

$$\begin{aligned} \kappa &= |\mathbf{k}-\mathbf{q}| = |\mathbf{k}-k\mathbf{e}| = \sqrt{k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} + k^2 e^2} \\ &= \sqrt{2k^2(1 - \cos \Theta)} = \sqrt{4k^2 \frac{1}{2}(1 - \cos \Theta)} = 2k \sin \frac{\Theta}{2} \quad . \end{aligned} \quad (4.78)$$

Als Spezialfall betrachten wir jetzt die Streuung am Yukawa-Potential. Bei der Wechselwirkung von Nukleonen und Mesonen spielt das Yukawa-Potential eine zentrale Rolle. Es ist bestimmt durch

$$V(r) = g^2 \frac{e^{-\frac{r}{r_0}}}{r} \quad . \quad (4.79)$$

Hierbei ist r_0 ein Maß für die Reichweite der nuklearen Kräfte. Typischerweise ist

$$r_0 \approx 1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m} \quad . \quad (4.80)$$

g^2 bezeichnet die Kopplungskonstante und bestimmt die Stärke der Wechselwirkung. r_0 ist mit der Masse m_π des Pions, dem Austauscheteilchen der starken Wechselwirkung, verknüpft. r_0 ist von der Größenordnung der Compton-Wellenlänge des Pions. Für $m_\pi \rightarrow 0$ oder alternativ $r_0 \rightarrow \infty$ geht das Yukawa-Potential als Grenzfall in das Coulomb-Potential über. Wir erhalten

für die Streuamplitude

$$\begin{aligned}
 f^1(\Theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty V(r) r \sin(\kappa r) dr = -\frac{2mg^2}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty e^{-\frac{r}{r_0}} \sin \kappa r dr \\
 &= -\frac{2mg^2}{\hbar^2 \kappa} \Im \int_0^\infty e^{-\left(\frac{1}{r_0} - i\kappa\right)r} dr = -\frac{2mg^2}{\hbar^2 \kappa} \Im \left[\frac{-1}{-\left(\frac{1}{r_0} - i\kappa\right)} \right] \\
 &= -\frac{2mg^2}{\hbar^2 \kappa} \Im \frac{\frac{1}{r_0} + i\kappa}{\left(\frac{1}{r_0}\right)^2 + \kappa^2} .
 \end{aligned} \tag{4.81}$$

Damit haben wir schließlich

$$f^1(\Theta) = -\frac{2mg^2}{\hbar^2} \frac{1}{\left(\frac{1}{r_0}\right)^2 + \left(2k \sin \frac{\Theta}{2}\right)^2} . \tag{4.82}$$

Untersuchen wir den Spezialfall

$$2k \ll \frac{1}{r_0} , \tag{4.83}$$

so haben wir mit

$$\frac{(\hbar k)^2}{2m} = E \tag{4.84}$$

auch

$$E \ll \frac{\hbar^2}{8mr_0^2} . \tag{4.85}$$

In diesem Fall niedriger Energien wird die Streuamplitude unabhängig vom Winkel Θ .

Mit $r_0 \rightarrow \infty$ und $g \rightarrow q$ untersuchen wir jetzt die Streuung am Coulomb-Potential. In diesem Spezialfall erhalten wir in erster Bornscher Näherung

$$f^1(\Theta) = -\frac{q^2}{4E} \frac{1}{\sin^2 \frac{\Theta}{2}} . \tag{4.86}$$

Die Streuamplitude ist für alle Energien winkelabhängig.

4.3 Der Wirkungsquerschnitt

Wir entwickeln das kräftefreie, einfallende Wellenpaket nach ebenen Wellen oder Impulseigenfunktionen,

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int c(\mathbf{k}) e^{-i\frac{E(k)t}{\hbar}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3k \tag{4.87}$$

mit

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{4.88}$$

und der Normierungsbedingung

$$\int |c(\mathbf{k})|^2 d^3k = 1 \quad . \quad (4.89)$$

Für endliche Zeiten t gilt für die Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int c(\mathbf{k}) e^{-\frac{iE(\mathbf{k})t}{\hbar}} u_{\mathbf{k}}^{(+)} d^3k \quad . \quad (4.90)$$

Wir betrachten nun den Grenzfall $t \rightarrow +\infty$. Hierbei können wir die asymptotische Entwicklung für $u_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ einsetzen. Damit resultiert für die Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int c(\mathbf{k}) e^{-i\frac{E(\mathbf{k})t}{\hbar}} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \right) d^3k \quad . \quad (4.91)$$

Diese besteht aus einem in der Einfallrichtung weiterlaufenden Paket und einer nach allen Richtungen gestreuten Welle. Wenn wir annehmen, daß das einfallende Paket einen relativ scharfen Impuls $\mathbf{p}_0 = \hbar\mathbf{k}_0$ besitzt, so daß die Funktion $c(\mathbf{k})$ ein ausgeprägtes Maximum für $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ aufweist, so kann man das Zerfließen des Wellenpakets vernachlässigen. Wir entwickeln die Wahrscheinlichkeitsamplitude als Funktion von \mathbf{k} um \mathbf{k}_0 . Wir machen eine Entwicklung in

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 \quad (4.92)$$

und wählen den Einheitsvektor

$$\mathbf{e}_0 = \frac{\mathbf{k}_0}{k_0} \quad . \quad (4.93)$$

Damit ist

$$k \approx k_0 + \mathbf{e}_0\mathbf{k}' \quad (4.94)$$

und entsprechend

$$E(k) \approx E_0 + \hbar\mathbf{v}_0\mathbf{k}' \quad . \quad (4.95)$$

\mathbf{v}_0 ist die Einfallsgeschwindigkeit des Teilchens. Diese Entwicklung führen wir weiter, indem wir für die Streuamplitude schreiben

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e}) = |f| e^{i\alpha} \quad (4.96)$$

mit der genäherten Phase

$$\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{e}) \approx \alpha(\mathbf{k}_0, \mathbf{e}) + \mathbf{k}' \text{grad}_{\mathbf{k}_0} \alpha \quad . \quad (4.97)$$

Wir verwenden die Abkürzung

$$\mathbf{a}_0(\mathbf{e}) = \text{grad}_{\mathbf{k}_0} \alpha \quad . \quad (4.98)$$

Somit haben wir näherungsweise

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e}) \approx f_0(\mathbf{e}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{a}_0(\mathbf{e})} \quad . \quad (4.99)$$

Dies setzen wir in (4.91) ein. Dabei ziehen wir die konstanten Terme vor das Integral. Es folgt

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i(\mathbf{p}_0 \mathbf{r} - E_0 t)}{\hbar}} \int c(\mathbf{k}' + \mathbf{k}_0) e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t)} d^3 k' \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} f_0(\mathbf{e}) \frac{e^{\frac{i(\mathbf{p}_0 \mathbf{r} - E_0 t)}{\hbar}}}{r} \int c(\mathbf{k}' + \mathbf{k}_0) e^{i\mathbf{k}'[\mathbf{e}_0(r - v_0 t) - \mathbf{a}_0(\mathbf{e})]} d^3 k' \end{aligned} \quad (4.100)$$

mit $\mathbf{p}_0 = \hbar \mathbf{k}_0$.

Wir schreiben jetzt für die Einhüllende des einlaufenden Wellenpaketes zur Zeit $t = 0$

$$A(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int c(\mathbf{k}' + \mathbf{k}_0) e^{i\mathbf{k}' \mathbf{r}} d^3 k' \quad (4.101)$$

mit der Normierung

$$\int |A(\mathbf{r})|^2 d^3 r = 1 \quad . \quad (4.102)$$

Mit dieser Abkürzung folgt für den auslaufenden Zustand

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \phi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{i(\mathbf{p}_0 \mathbf{r} - E_0 t)}{\hbar}} A(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t) + f_0(\mathbf{e}) \frac{e^{\frac{i(\mathbf{p}_0 \mathbf{r} - E_0 t)}{\hbar}}}{r} A(\mathbf{e}_0(r - v_0 t) + \mathbf{a}_0(\mathbf{e})) \quad . \quad (4.103)$$

Der erste Term entspricht dem ungestört durchlaufenden Paket. Die Einhüllende bewegt sich mit der Einfallsgeschwindigkeit \mathbf{v}_0 . Der zweite Term beschreibt die auslaufende Kugelwelle mit der Gruppengeschwindigkeit v_0 . Die Einhüllende ist durch jene der einfallenden Welle gegeben.

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem Detektor zu finden, der in der Richtung \mathbf{e} so aufgestellt sei, daß die durchgehende Welle an ihm vorbeigeht, ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \omega(\mathbf{e}) d\Omega &= d\Omega \int_0^\infty |\phi_{\text{str.}}(\mathbf{r}, t)|^2 r^2 dr \\ &= d\Omega |f_0(\mathbf{e})|^2 \int_0^\infty |A(\mathbf{e}_0(r - v_0 t) + \mathbf{a}_0)|^2 dr \quad . \end{aligned} \quad (4.104)$$

$\phi_{\text{str.}}$ bezeichnet den zweiten Term in (4.103). Das Absolutbetragsquadrat der Streuamplitude mit der Dimension einer Fläche ist der differentielle Wirkungsquerschnitt für die elastische Streuung von Teilchen des Impulses $\mathbf{p}_0 = \hbar \mathbf{k}_0$ in Richtung von \mathbf{e} ,

$$\frac{d\sigma^{\text{el}}}{d\Omega} = |f_0(\mathbf{e})|^2 \quad . \quad (4.105)$$

Das Integral über den räumlichen Winkel ist der totale elastische Wirkungsquerschnitt

$$\sigma^{\text{el}} = \int |f_0(\mathbf{e})|^2 d\Omega \quad . \quad (4.106)$$

Speziell für das Coulomb-Potential folgt in erster Bornscher Näherung der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma^{\text{el}}}{d\Omega} = \left(\frac{q^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\Theta}{2}} \quad . \quad (4.107)$$

4.4 Die S-Matrix und das optische Theorem

Für den Meßprozeß im Zusammenhang mit einer Streuung ist die Kenntnis des Zustandsvektors $|\phi(t)\rangle$ zu einer endlichen Zeit t von unmaßgeblicher Bedeutung. Von besonderer Relevanz hingegen ist der Zusammenhang zwischen den kräftefreien Zuständen zu Beginn bei $t \rightarrow -\infty$ und am Ende für $t \rightarrow +\infty$ des Streuprozesses. Wir entwickeln den Anfangs- und Endzustand nach den selben Basisvektoren $|u_a^0\rangle$,

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |\phi^S(t)\rangle = \int_a^f c(a) e^{-\frac{iE_a t}{\hbar}} |u_a^0\rangle da \quad , \quad (4.108)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\phi^S(t)\rangle = \int_a^f \tilde{c}(a) e^{-\frac{iE_a t}{\hbar}} |u_a^0\rangle da \quad . \quad (4.109)$$

Die Aufgabe zur Lösung des Streuproblems besteht darin, die unbekannte Funktion $\tilde{c}(a)$ aus der vorgegebenen Anfangsverteilung $c(a)$ zu berechnen.

Wir gehen nun ins Wechselwirkungsbild, für das gilt

$$|\phi^W(t)\rangle = e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} |\phi^S(t)\rangle \quad . \quad (4.110)$$

Damit resultiert

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |\phi^W(t)\rangle = \int_a^f c(a) |u_a^0\rangle da \quad , \quad (4.111)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |\phi^W(t)\rangle = \int_a^f \tilde{c}(a) |u_a^0\rangle da \quad . \quad (4.112)$$

Damit sind die kräftefreien Zustände zeitunabhängig. Der Zeitpunkt t_S , an dem das Schrödinger-Bild mit dem Wechselwirkungsbild übereinstimmen soll, wird willkürlich zu $t_S = 0$ gesetzt.

Im Wechselwirkungsbild besteht für den Zustandsvektor zwischen zwei Zeiten t und t_0 der Zusammenhang

$$|\phi^W(t)\rangle = \hat{C}^W(t, t_0) |\phi^W(t_0)\rangle \quad (4.113)$$

mit

$$\hat{C}^W(t, t_0) = e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}} e^{-\frac{i\mathcal{H}_0 t_0}{\hbar}} \quad . \quad (4.114)$$

In (4.113) nutzen wir die Vollständigkeit der Basisvektoren $|u_a^0\rangle$ aus und projizieren mit $\langle u_a^0|$. Es folgt

$$\langle u_a^0 | \phi^W(t) \rangle = \int_{a'}^f \langle u_a^0 | \hat{C}^W(t, t_0) | u_{a'}^0 \rangle \langle u_{a'}^0 | \phi^W(t_0) \rangle da' \quad . \quad (4.115)$$

Aus (4.111) und (4.112) erkennen wir den Zusammenhang

$$c(a) = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \langle u_a^0 | \phi^W(t_0) \rangle \quad , \quad (4.116)$$

$$\tilde{c}(a) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle u_a^0 | \phi^W(t) \rangle \quad . \quad (4.117)$$

Damit läßt sich aus (4.115) ableiten

$$\tilde{c}(a) = \int_{a'} S(a, a') c(a') da' \quad (4.118)$$

mit

$$S(a, a') = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \langle u_a^0 | \hat{C}^W(t, t_0) u_{a'}^0 \rangle \quad (4.119)$$

Die Matrix $S(a, a')$ ist die Streumatrix oder S -Matrix. Wir schreiben die S -Matrix etwas um. Es ist

$$\begin{aligned} S(a, a') &= \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \langle u_a^0 | e^{\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}} e^{-\frac{i\mathcal{H}_0 t_0}{\hbar}} u_{a'}^0 \rangle \\ &= \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \langle e^{-\frac{i\mathcal{H}_0 t}{\hbar}} u_a^0 | e^{-\frac{i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}} | e^{-\frac{i\mathcal{H}_0 t_0}{\hbar}} u_{a'}^0 \rangle \\ &= \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \langle e^{-\frac{iE_a t}{\hbar}} u_a^0 | e^{-\frac{i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}} | e^{-\frac{iE_{a'} t_0}{\hbar}} u_{a'}^0 \rangle \\ &= \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \langle e^{-\frac{i(E_a - \mathcal{H})t}{\hbar}} u_a^0 | e^{-\frac{i(E_{a'} - \mathcal{H})t_0}{\hbar}} u_{a'}^0 \rangle \quad (4.120) \end{aligned}$$

Zur Berechnung der Grenzwerte verwenden wir die Relation

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} F(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon t'} F(t') dt' \quad (4.121)$$

mit $\varepsilon > 0$. Damit bekommen wir

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left| e^{-\frac{i(E - \mathcal{H})t}{\hbar}} u^0 \right\rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{i\varepsilon}{\mp(E - \mathcal{H}) + i\varepsilon} |u^0\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(1 + \frac{1}{E - \mathcal{H} \mp i\varepsilon} V \right) |u^0\rangle \\ &= \left(1 + \mathcal{G}^{(\mp)} V \right) |u^0\rangle \equiv |u^{(\mp)}\rangle \quad (4.122) \end{aligned}$$

Mit diesen Ausdrücken können wir die S -Matrix schreiben als

$$S(a, a') = \langle u_a^{(-)} | u_{a'}^{(+)} \rangle \quad (4.123)$$

Aus (4.122) folgt

$$|u_a^{(-)}\rangle = |u_a^{(+)}\rangle + \left(\mathcal{G}_a^{(-)} - \mathcal{G}_a^{(+)} \right) V |u_a^0\rangle \quad (4.124)$$

Mit

$$\langle u_a^- | = \langle u_a^+ | + \langle u_a^0 | V \left(\mathcal{G}_a^{(+)} - \mathcal{G}_a^{(-)} \right) \quad (4.125)$$

erhalten wir

$$S(a, a') = \delta(a, a') + \langle u_a^0 | V \left(\mathcal{G}_a^{(+)} - \mathcal{G}_a^{(-)} \right) u_{a'}^{(+)} \rangle \quad (4.126)$$

Wir verwenden jetzt die Definition von $\mathcal{G}^{(\pm)}$ und nutzen aus, daß $|u_{a'}^{(+)}\rangle$ Eigenvektor von \mathcal{H} zum Eigenwert $E_{a'}$ ist. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} (\mathcal{G}_a^{(+)} - \mathcal{G}_a^{(-)}) |u_{a'}^{(+)}\rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left(\frac{1}{E_a - \mathcal{H} + i\varepsilon} - \frac{1}{E_a - \mathcal{H} - i\varepsilon} \right) |u_{a'}^{(+)}\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{-2i\varepsilon}{(E_a - E_{a'})^2 + \varepsilon^2} |u_{a'}^{(+)}\rangle = -2\pi i \delta(E_a - E_{a'}) |u_{a'}^{(+)}\rangle \end{aligned} \quad (4.127)$$

Hierbei haben wir von der Darstellung der δ -Funktion

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} y(x, \varepsilon) \quad (4.128)$$

mit

$$y(x, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (4.129)$$

Gebrauch gemacht. Für die S -Matrix resultiert damit das Ergebnis

$$S(a, a') = \delta(a, a') - 2\pi i \langle u_a^0 | V u_{a'}^{(+)} \rangle \delta(E_a - E_{a'}) \quad (4.130)$$

Der erste Term beschreibt wieder die durchgehende Welle, der zweite beschreibt die Streuwelle. Wir verwenden als Basissystem $|u_a^0\rangle$ Impulseigenvektoren $|u_{\mathbf{k}}\rangle$. Das Matrixelement $\langle u_{\mathbf{k}'e} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle$ war der Streuamplitude proportional,

$$f_{\mathbf{k}}(e) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle u_{\mathbf{q}} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \quad (4.131)$$

Wir führen einen Operator T ein durch

$$T = V (1 + \mathcal{G}^{(+)} V) \quad (4.132)$$

Damit bekommen wir

$$\langle u_a^0 | V u_{a'}^{(+)} \rangle = \langle u_a^0 | T u_{a'}^0 \rangle \quad (4.133)$$

Wir haben es jetzt mit Matrixelementen zwischen freien Zuständen zu tun. Die S -Matrix schreiben wir als

$$S(a, a') = \delta(a, a') - 2\pi i \langle u_a^0 | T | u_{a'}^0 \rangle \delta(E_a - E_{a'}) \quad (4.134)$$

Aus der Unitarität der S -Matrix als Folge der Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit läßt sich das optische Theorem ableiten. Als Basis betrachten wir Impulseigenvektoren. Damit lautet die S -Matrix

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2\pi i \langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \quad (4.135)$$

Die Unitaritätsbedingung

$$\int_l U(k, l) U^*(k', l) dl = \int_l U^*(l, k) U(l, k') dl = \delta(k, k') \quad (4.136)$$

impliziert dann für die S -Matrix

$$\int_{\mathbf{k}'} S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') S^*(\mathbf{k}'', \mathbf{k}') d^3 k' = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') \quad . \quad (4.137)$$

Wir setzen (4.135) in (4.137) ein. Dies führt auf die Beziehung

$$\begin{aligned} & 2\pi i \left(\langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}''}^{(+)} \rangle - \langle u_{\mathbf{k}''} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle^* \right) \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}''}) \\ &= (2\pi)^2 \int_{\mathbf{k}'} \langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle \langle u_{\mathbf{k}''} | V u_{\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle^* \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \delta(E_{\mathbf{k}''} - E_{\mathbf{k}'}) d^3 k' \quad . \end{aligned} \quad (4.138)$$

Um mit Hilfe der δ -Funktion die Integration durchführen zu können, nutzen wir aus, daß gilt

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad . \quad (4.139)$$

Mit der Regel

$$\delta(x^2 - \alpha^2) = \frac{\delta(x - \alpha) + \delta(x + \alpha)}{2|\alpha|} \quad (4.140)$$

und

$$\delta(\lambda x) = \frac{1}{|\lambda|} \delta(x) \quad (4.141)$$

folgt

$$\delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) = \frac{m}{k\hbar^2} \delta(k - k') \quad . \quad (4.142)$$

Hierbei haben wir berücksichtigt, daß k und k' definitionsgemäß nur positive Werte annehmen können, so daß der Term $\delta(k + k')$ keinen Beitrag liefert. In sphärischen Koordinaten schreiben wir ferner

$$d^3 k' = k'^2 dk' d\Omega \quad (4.143)$$

und integrieren über den Radialanteil k' . Es folgt

$$\frac{i}{k} \left(\langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}''}^{(+)} \rangle - \langle u_{\mathbf{k}''} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle^* \right) = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \int_{\Omega'} \langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle \langle u_{\mathbf{k}''} | V u_{\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle^* d\Omega' \quad (4.144)$$

mit der zusätzlichen Bedingung

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}''| \quad . \quad (4.145)$$

In (4.144) wählen wir speziell $\mathbf{k} = \mathbf{k}''$. Somit erhalten wir

$$-\frac{2}{k} \Im \langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \int_{\Omega'} \left| \langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}'}^{(+)} \rangle \right|^2 d\Omega' \quad . \quad (4.146)$$

Für die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung mit $\mathbf{q} = \mathbf{k}$ und entsprechend $\Theta = 0$ gilt

$$f_{\mathbf{k}}(\Theta = 0) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle u_{\mathbf{k}} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \quad . \quad (4.147)$$

Für den totalen Wirkungsquerschnitt haben wir hingegen

$$\sigma_{\mathbf{k}} = \int |f_{\mathbf{k}}(\mathbf{e})|^2 d\Omega = \int \left| -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle u_{\mathbf{q}} | V u_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \right|^2 d\Omega \quad . \quad (4.148)$$

Damit ist die linke Seite in (4.146) proportional dem Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude während die rechte Seite proportional dem totalen Wirkungsquerschnitt ist. Damit haben wir das optische Theorem abgeleitet. Es lautet

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \Im f_{\mathbf{k}}(\Theta = 0) \quad . \quad (4.149)$$

Es ist eine direkte Folge der Unitarität der S -Matrix. Dieses Theorem gilt auch für nichtelastische Streuung.

4.5 Partialwellenanalyse der Streuung

Wir wenden uns der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = V(r) \psi \quad (4.150)$$

mit

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad (4.151)$$

zu, wobei wir das Potential $V(r)$ von Anfang an in Rechnung stellen. Die Eigenlösung von (4.150) für Zentralfelder $V(r)$ zur Energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, zum Quadrat des Drehimpulses \mathbf{L}^2 mit den Eigenwerten $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ und zur Drehimpulskomponente $L_z = \hbar m$ lautet

$$\psi_{\ell m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \quad . \quad (4.152)$$

Setzen wir ferner

$$R_{\ell} = \frac{u_{\ell}}{r} \quad , \quad (4.153)$$

so bekommen wir aus (4.150)

$$\frac{d^2 u_{\ell}}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] u_{\ell} = V(r) u_{\ell} \quad . \quad (4.154)$$

Die allgemeine Lösung von (4.150) kann nach dem Orthogonalsystem $\psi_{\ell m}(r, \vartheta, \varphi)$ entwickelt werden,

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} C_{\ell m} R_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \quad . \quad (4.155)$$

Wir generieren die Gesamtlösung durch Überlagerung von Zuständen, die sich durch den Wert des Bahndrehimpulses ℓ und durch seine z -Komponente m unterscheiden.

Für den Streuprozeß wählen wir die Richtung für die einfallende Welle als die z -Richtung. Dann müssen wir eine partikuläre Lösung finden, die die asymptotische Form

$$\psi(r \rightarrow \infty) = e^{ikz} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.156)$$

besitzt. Dies ist eine Überlagerung der primären ebenen Welle und der gestreuten Welle. Diese Lösung besitzt Rotationssymmetrie um die z -Achse und hängt daher nicht vom Winkel φ ab. Wir betrachten daher in der Entwicklung (4.155) nur die Glieder mit $m = 0$. Die gesuchte Lösung können wir somit darstellen als

$$\psi(r, \vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell} R_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \vartheta) \quad (4.157)$$

Die Aufgabe der Streutheorie besteht nun in der Ermittlung der Koeffizienten C_{ℓ} .

Zunächst studieren wir im Rahmen einer Nebenbetrachtung die Asymptotik von $R_{\ell}(r)$ für $r \rightarrow \infty$. Für $r \rightarrow \infty$ können wir in (4.154) den Bahndrehimpulsanteil des effektiven Potentials sowie das Potential selber vernachlässigen. Es resultiert

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} = Eu \quad (4.158)$$

Für $E > 0$ folgt als Lösung

$$u = D_1 e^{ikr} + D_2 e^{-ikr} \quad (4.159)$$

und somit

$$R = D_1 \frac{e^{ikr}}{r} + D_2 \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (4.160)$$

Wir untersuchen stationäre Lösungen, bei denen der Strom der einlaufenden Teilchen gleich dem Strom der auslaufenden Teilchen sein muß. Dies bedingt, daß D_1 und D_2 vom Betrag her gleich sein müssen,

$$|D_1| = |D_2| \quad (4.161)$$

Setzen wir daher an

$$D_1 = \frac{1}{2i} A e^{i\alpha} \quad (4.162)$$

$$D_2 = -\frac{1}{2i} A e^{-i\alpha} \quad (4.163)$$

wobei A und α reelle Größen sind, so folgt als asymptotische Lösung für $R(r)$

$$R = A \frac{\sin(kr + \alpha)}{r} \quad (4.164)$$

$R(r)$ bildet eine stehende Kugelwelle. Die Phase α hängt im allgemeinen vom Drehimpuls ℓ ab. Wir setzen

$$\alpha_{\ell} = -\frac{\pi\ell}{2} + \eta_{\ell} \quad (4.165)$$

wobei wir eine neue Phase η_ℓ eingeführt haben.

Die Normierung für $R_\ell(r)$ können wir so wählen, daß

$$A = \frac{1}{k} \quad (4.166)$$

wird. Damit haben wir die gesuchte asymptotische Form

$$R_\ell(r \rightarrow \infty) = \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi\ell}{2} + \eta_\ell\right)}{kr} \quad (4.167)$$

Bei dieser Wahl der Normierung wird der asymptotische Ausdruck (4.157) für $\psi(r, \vartheta)$

$$\psi(r \rightarrow \infty, \vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell P_\ell(\cos \vartheta) \left\{ \frac{e^{ikr - \frac{i\pi\ell}{2} + i\eta_\ell}}{2ikr} - \frac{e^{-ikr + \frac{i\pi\ell}{2} - i\eta_\ell}}{2ikr} \right\} \quad (4.168)$$

Jetzt muß C_ℓ so bestimmt werden, daß die Asymptotik (4.168) mit (4.156) übereinstimmt. Zu diesem Zweck entwickeln wir zunächst die ebene Welle

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} \quad (4.169)$$

nach Legendre-Polynomen. Es gilt

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) e^{\frac{i\pi\ell}{2}} j_\ell(kr) P_\ell(\cos \vartheta) \quad (4.170)$$

mit den sphärischen Besselfunktionen $j_\ell(kr)$. Es ist

$$e^{\frac{i\pi\ell}{2}} = i^\ell \quad (4.171)$$

Wir haben hierbei die ebene Welle durch Überlagerung stehender Kugelwellen repräsentiert. Jeder Term in (4.170) ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung (4.150) für $V(r) = 0$. Für große r gilt für die sphärischen Besselfunktionen

$$j_\ell(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right) \quad (4.172)$$

Für die Streuamplitude schreiben wir als Entwicklung in Legendre-Polynomen

$$f(\vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{f_\ell}{2ik} P_\ell(\cos \vartheta) \quad (4.173)$$

Damit resultiert als asymptotischer Ausdruck für $\psi(r, \vartheta)$

$$\psi(r \rightarrow \infty, \vartheta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\cos \vartheta) \left\{ (2\ell + 1) e^{\frac{i\pi\ell}{2}} \left[\frac{e^{ikr - \frac{i\pi\ell}{2}}}{2ikr} - \frac{e^{-ikr + \frac{i\pi\ell}{2}}}{2ikr} \right] + \frac{f_\ell}{2ik} \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \quad (4.174)$$

Jetzt vergleichen wir (4.174) mit (4.168). Durch Koeffizientenvergleich erhalten wir

$$C_\ell e^{-i\eta_\ell} = (2\ell + 1) e^{\frac{i\pi\ell}{2}} , \quad (4.175)$$

$$C_\ell e^{-\frac{i\pi\ell}{2} + i\eta_\ell} = (2\ell + 1) + f_\ell . \quad (4.176)$$

Damit haben wir

$$f_\ell = (2\ell + 1) (e^{2i\eta_\ell} - 1) . \quad (4.177)$$

Somit ist die Streuamplitude mit der Streuphase η_ℓ verknüpft,

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\eta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \vartheta) . \quad (4.178)$$

Das Absolutbetragsquadrat der Streuamplitude ergibt den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 . \quad (4.179)$$

Somit gilt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\eta_\ell} - 1) P_\ell(\cos \vartheta) \right|^2 . \quad (4.180)$$

Bei den einzelnen Drehimpulsanteilen spricht man von den Partialwellenbeiträgen. Mit

$$\int P_\ell^2(\cos \vartheta) d\Omega = \frac{4\pi}{2\ell + 1} , \quad (4.181)$$

$$\int P_\ell(\cos \vartheta) P_{\ell'}(\cos \vartheta) d\Omega = 0 \quad \text{für } \ell \neq \ell' \quad (4.182)$$

erhalten wir den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \eta_\ell . \quad (4.183)$$

Wir definieren den Partialquerschnitt als

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \eta_\ell . \quad (4.184)$$

Für $\ell = 0$ sprechen wir von s-Wellen-Streuung, für $\ell = 1$ von p-Wellen-Streuung usw. Die s-Wellen-Streuung besitzt Kugelsymmetrie, die p-Wellen-Streuung hingegen Dipolsymmetrie.

Wir wollen nochmals den Zusammenhang zwischen dem Wirkungsquerschnitt und der Streuamplitude etwas beleuchten. Bei der Streuung interessiert uns die Zahl der gestreuten Teilchen, die pro Zeiteinheit durch das Flächenelement dS hindurchgehen. Dabei steht das Flächenelement dS senkrecht zu dem vom Streuzentrum aus gezogenen Radiusvektor. Diesen Teilchenstrom bezeichnen wir mit dN . dN ist proportional zu dS , umgekehrt proportional zum Quadrat der Entfernung r vom Streuzentrum und proportional zum Teilchenstrom \tilde{N} im Primärstrahl,

$$dN = \tilde{N} \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{dS}{r^2} . \quad (4.185)$$

\tilde{N} ist die pro Zeiteinheit durch eine Einheitsfläche durchgehende Teilchenzahl. Der Proportionalitätsfaktor $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ ist der differentielle Wirkungsquerschnitt. $\frac{dS}{r^2}$ ist der Raumwinkel $d\Omega$, unter welchem die Fläche dS vom Streuzentrum aus erscheint. Das Verhältnis $\frac{dN}{\tilde{N}}$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit für die Streuung in den Raumwinkel $d\Omega$. Die Dimension der Größen ist

$$\dim [dN] = \frac{1}{s} , \quad (4.186)$$

$$\dim [\tilde{N}] = \frac{1}{s \text{ m}^2} , \quad (4.187)$$

$$\dim \left[\frac{d\sigma}{d\Omega} \right] = \text{m}^2 . \quad (4.188)$$

Die Größe

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (4.189)$$

nennen wir den totalen Wirkungsquerschnitt. Die Streuwelle ψ schreiben wir im allgemeinen als Summe aus zwei Anteilen,

$$\psi = \psi^0 + u , \quad (4.190)$$

wobei ψ^0 den einfallenden Teilchen und u den gestreuten Teilchen entspricht. Nehmen wir an, daß die Teilchen sich in z -Richtung bewegen, so hat ψ^0 die Form

$$\psi^0 = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{L^3}} \quad (4.191)$$

mit $L^3 = 1 \text{ m}^3$. Die Wellenfunktion ψ^0 ist so normiert, daß die Dichte der einfallenden Teilchen

$$|\psi^0|^2 = 1 \text{ m}^{-3} \quad (4.192)$$

ist. Wir haben ein Teilchen pro Volumeneinheit vorliegen. Mit

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (4.193)$$

bekommen wir für den Strom

$$\tilde{N} = J_z = \frac{\hbar k}{m} |\psi^0|^2 = v |\psi^0|^2 \quad (4.194)$$

mit $v = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$. Damit hat \tilde{N} die Dimension $\frac{1}{s \text{ m}^2}$.

Die Funktion u , die den Zustand der gestreuten Teilchen darstellt, muß für große Abstände r die Form einer auslaufenden Kugelwelle haben,

$$u(r \rightarrow \infty, \vartheta) = f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} . \quad (4.195)$$

Wir berechnen jetzt den Strom der gestreuten Teilchen in großer Entfernung vom Streuzentrum.

Es ist

$$J_r = \frac{i\hbar}{2m} \left[u \frac{\partial u^*}{\partial r} - u^* \frac{\partial u}{\partial r} \right] = \frac{\hbar k}{m} |f(\vartheta)|^2 \frac{1}{r^2} = \frac{v |f(\vartheta)|^2}{r^2} . \quad (4.196)$$

Daraus folgt für den Strom durch die Fläche dS

$$dN = J_r dS = v |f(\vartheta)|^2 d\Omega \quad . \quad (4.197)$$

Aus (4.197), (4.192) und (4.185) bekommen wir schließlich den Zusammenhang

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{dN}{\tilde{N}} = |f(\vartheta)|^2 d\Omega \quad , \quad (4.198)$$

also

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 \quad . \quad (4.199)$$

5 Die Pfadintegral-Darstellung der Quantenmechanik

5.1 Vorwort zur Pfadintegral-Methode

Pfadintegrale erlauben eine alternative Beschreibung der Quantenmechanik und der Quantenfeldtheorie. Im Vergleich zu den Formulierungen der Quantentheorie von Schrödinger oder Heisenberg ermöglicht die Pfadintegral-Methode vielfach ein anschaulicheres Verständnis quantenmechanischer Phänomene. Jedoch muß betont werden, daß eine vollständige Äquivalenz zur Schrödinger-Theorie besteht. Neue oder gar abweichende Resultate in bezug auf die Erkenntnisse der traditionellen Quantenmechanik sind daher nicht zu erwarten. Außerdem sind explizite Berechnungen mit Pfadintegralen zumeist ungleich komplexer und langwieriger verglichen mit bekannten und erprobten Verfahren zur Lösung der Schrödinger-Gleichung. Daher werden Pfadintegral-Methoden oftmals nur formal angewendet. Generell trägt die Pfadintegral-Methode aber zu einem grundsätzlichen Verständnis der Quantenmechanik bei.

Pfadintegrale sind auch in der statistischen Physik von fundamentaler Bedeutung und haben eine weitverbreitete Anwendung beim Studium von Vielteilchensystemen. Technische Bedeutung haben sie in jüngster Zeit dadurch erlangt, daß zahlreiche Prozesse in modernen Eichtheorien bisher ausschließlich mit Pfadintegralen behandelt werden konnten.

Einigen Grundgedanken von Dirac folgend wurde die Pfadintegral-Darstellung der Quantenmechanik von Feynman eingeführt. An didaktischer Brillanz ist das Lehrbuch von Feynman über die Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik nur schwerlich zu übertreffen.

Schulman hat ein weiteres exzellentes Lehrbuch über Pfadintegrale geschrieben. Die Monographie von Schulman ist teilweise recht ambitiös und somit gerade für den Anfänger etwas schwer verdaulich. Daher erscheint eine neue elementare Einführung in die Pfadintegral-Methode durchaus gerechtfertigt. Gerade für Studenten ist eine ausführliche Darstellung einzelner Rechenschritte sehr hilfreich. Dies erhöht rein formal die Zahl der notwendigen Zeilen, um einen gegebenen Sachverhalt zu erläutern. Aber letztlich bleibt bei diesem Vorgehen dennoch mehr Zeit für das physikalische Verständnis der prinzipiellen Grundgedanken.

5.2 Quantenfluktuationen und die Summe über alle Pfade

Bei der Bestimmung des klassischen Pfades unter Verwendung des Variationsprinzips hatten wir rein formal die Wirkung entlang verschiedener Pfade in der Umgebung des klassischen Pfades miteinander verglichen. Der klassische Pfad folgte dann aus der Forderung eines Extremums für die Wirkung.

Interpretiert man die klassische Beschreibung in etwas überzogener Weise anschaulich, so scheint die Natur fähig zu sein, verschiedene Wege bezüglich ihrer Wirkung miteinander vergleichen zu

können, um schließlich für das klassische System den Pfad extremaler Wirkung auszuwählen. Diese Interpretation wird etwas verständlicher, wenn man von dem quantenmechanischen Sachverhalt ausgeht, daß jedes physikalische System Quantenfluktuationen unterworfen ist. Diese Fluktuationen sind im klassischen Limes unbeobachtbar, da sie sich gerade zu einer Beschreibung durch den klassischen Pfad mitteln. Eine solche, mit der Mechanik offensichtlich konsistente Vorstellung ist jedoch nur dann wirklich gerechtfertigt, wenn sie auch quantenmechanische Phänomene erklärt, die einer rein klassischen Beschreibung nicht zugänglich sind.

Um dies etwas ausführlicher zu erläutern, betrachten wir die Elektronenbeugung am Doppelspalt. Entsprechend unseren Kenntnissen aus der Quantenmechanik, können Teilchen durchaus auch Welleneigenschaften zeigen, die mit den mechanischen Größen Energie und Impuls durch die De Broglie - Beziehungen verknüpft sind.

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \hbar \mathbf{k} , \\ E &= \hbar \omega . \end{aligned} \tag{5.1}$$

Dabei ist \hbar die Plancksche Konstante

$$\hbar = 6.582173 \times 10^{-22} \text{ MeV s} . \tag{5.2}$$

Unter speziellen experimentellen Bedingungen zeigen Elektronen also ein ähnliches Verhalten wie Licht. Für Wellenphänomene ist aber die Bedeutung verschiedener Wege aus der Optik bekannt. Trifft eine Welle auf eine undurchlässige Wand W mit zwei Öffnungen, so zeigt die Intensität I auf einem Beobachtungsschirm S hinter der Wand W die aus der Quantenmechanik bekannten Interferenzbilder. Die schematische Versuchsanordnung und die dazugehörige Intensität $I(x)$ ist qualitativ in der Figur angegeben.

Ein entscheidendes Ingredienz der Quantentheorie ist, daß die Gesetze für die Kombinationen von Wahrscheinlichkeiten nicht der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie entsprechen. Beim Doppelspaltexperiment gilt für die Gesamtwahrscheinlichkeit P dafür, daß das Elektron ausgehend von der Quelle Q und nach Passieren der beiden Öffnungen in der Wand W am Ort x auf dem Schirm S auftrifft,

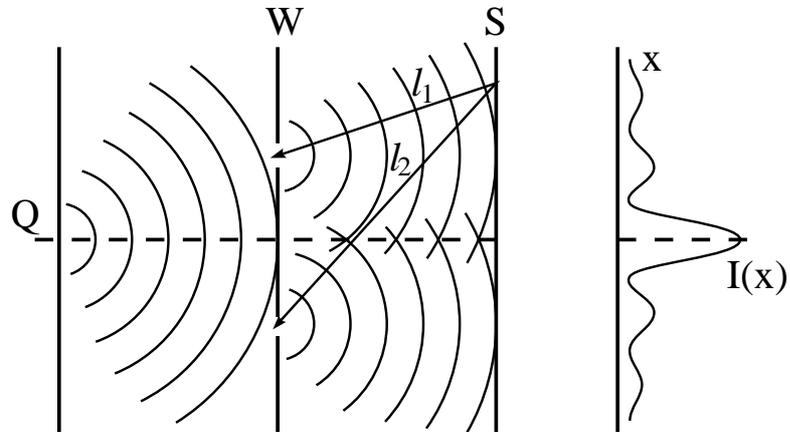
$$P \neq P_1 + P_2 , \tag{5.3}$$

wobei $P_{1(2)}$ die Wahrscheinlichkeit für den selben Prozeß bezeichnet, wenn das Loch 2(1) geschlossen wird. Aus der Quantenmechanik wissen wir, daß wir die Wahrscheinlichkeiten mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsamplituden ermitteln können. Es gilt

$$P = |\phi|^2 \tag{5.4}$$

mit

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 . \tag{5.5}$$



Schematische Darstellung des Doppelspaltversuchs und der resultierenden Intensität $I(x)$ auf dem Schirm S .

Ebenso ist

$$\begin{aligned} P_1 &= |\phi_1|^2, \\ P_2 &= |\phi_2|^2. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Offensichtlich ist aber generell

$$P = |\phi_1 + \phi_2|^2 \neq P_1 + P_2. \quad (5.7)$$

Ebenso wissen wir aus der elementaren Darstellung der Quantenmechanik, daß die Amplitude ϕ proportional ist zu

$$\phi \sim e^{ikl_1} + e^{ikl_2}, \quad (5.8)$$

wobei die geometrische Bedeutung der Abstände l_1 und l_2 aus der Figur entnommen werden kann. Die Amplitude auf dem Schirm ergibt sich also, wenn man den Wegen durch die Öffnung i mit $i = 1, 2$ die Amplitude e^{ikl_i} zuordnet und über die beiden Möglichkeiten summiert.

Um den Doppelspaltversuch zu verallgemeinern, denken wir uns den Raum zwischen der Emissionsquelle Q und dem Detektorschirm S mit mehreren undurchlässigen Wänden aufgefüllt. Jede einzelne Wand soll eine gewisse Anzahl von Löchern aufweisen. Wollen wir auch hier wieder

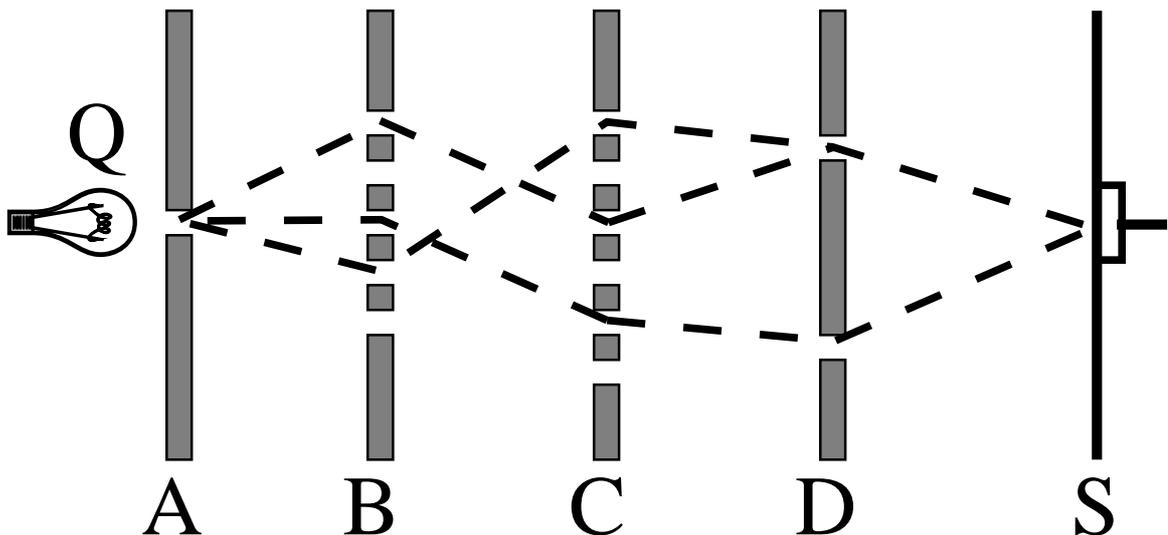
die Gesamtwahrscheinlichkeit $P(x)$ berechnen, so müssen wir für jede einzelne Möglichkeit i des Weges des Elektrons die zugehörige Amplitude ϕ_i ermitteln. Es folgt dann

$$P = \left| \sum_i \phi_i \right|^2 . \quad (5.9)$$

Wir superponieren also die Amplituden für die einzelnen Wege und bilden schließlich das Betragsquadrat. Die nächste Figur zeigt schematisch verschiedene Pfade zwischen zwei vorgegebenen Punkten in einem gegitterten Raum.

Dieses Gedankenexperiment läßt sich weiter verallgemeinern, indem wir uns den Raum vollständig gegittert vorstellen. Wir haben nun über eine unendliche Vielzahl von Wegen $\mathbf{r}(t)$ des Elektrons zu summieren. Die Gesamtamplitude erhält man in Erweiterung der theoretischen Beschreibung des Doppelspaltversuchs dadurch, daß man jedem Weg eine Einzelamplitude zuordnet und wieder über alle Alternativen des Weges summiert. Wir müssen nun eine Regel angeben, wie die verschiedenen Pfade zur Gesamtamplitude beitragen. Bei der Summation der einzelnen Amplituden trägt jede mit dem selben Betrag aber mit unterschiedlicher Phase bei. Diese Behauptung muß natürlich noch verifiziert werden. Es gilt

$$\phi = \sum_{\text{alle Pfade } q} \phi^{\text{Einzel}}[q] . \quad (5.10)$$



Schematische Darstellung drei alternativer Wege durch die Öffnungen der Wände A , B , C , D .

Das Hamiltonsche Variationsprinzip läßt uns vermuten, daß die Einzelamplituden durch die Wirkung der entsprechenden Pfade bestimmt sind. In der Wellentheorie ist die Amplitude durch den Ausdruck $e^{ikx} = e^{ipx/\hbar}$ bestimmt. Er hat die Form $e^{i \text{Wirkung}/\hbar}$.

Da die Amplitude vom *gesamten* Pfad abhängen muß, ist es naheliegend, daß klassische Wirkungsfunktional $\mathcal{A}[q(t)]$ zu benutzen und jedem Weg $q(t)$ eine Amplitude

$$\phi^{\text{Einzel}}[q] = e^{i\mathcal{A}[q]/\hbar} \quad (5.11)$$

zuzuordnen. Die Gesamtamplitude ϕ ist dann gegeben durch

$$\phi = \sum_{\text{alle Pfade } q} e^{i\mathcal{A}[q]/\hbar} . \quad (5.12)$$

Daß dieser Ausdruck im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ mit der Mechanik konsistent ist, sieht man qualitativ sehr leicht ein: Für Wirkungen \mathcal{A} groß verglichen mit \hbar ändert sich die Phase \mathcal{A}/\hbar bei infinitesimalen Variationen von $q(t)$ im allgemeinen sehr stark, so daß sich die Beiträge gegeneinander auslöschen werden. Es liegt eine destruktive Interferenz vor. Eine Ausnahme macht nur die Umgebung des *klassischen* Pfades, da hier die Wirkung \mathcal{A} stationär ist und somit die Amplituden aller benachbarten Wege konstruktiv interferieren können.

Die gesamte Übergangsamplitude ϕ , die wir auch Propagator nennen, hängt offensichtlich davon ab, wann und wo das Teilchen gestartet ist, und wann und wo wir die Wahrscheinlichkeit, die durch das Betragsquadrat der Amplitude bestimmt ist, beobachten. Diese Abhängigkeit von den Anfangs- und Endpunkten bringen wir durch die folgende Notation explizit zum Ausdruck

$$G(q_b, t_b; q_a, t_a) \equiv \phi = \sum_{\text{alle Pfade } q} e^{i\mathcal{A}[q]/\hbar} . \quad (5.13)$$

Die Vorschrift “Summe über alle Pfade” müssen wir mathematisch noch genauer fassen. Dabei werden wir von einer Formulierung im Phasenraum, also dem Produktraum aus Ortsraum und Impulsraum, ausgehen.

5.3 Repetitorium zur Greenschen Funktion in der Quantenmechanik

Die Grundgleichung der Quantenmechanik ist die Schrödinger - Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H \psi(\mathbf{r}, t) . \quad (5.14)$$

Betrachten wir die Bewegung eines Teilchens mit der Masse m in einem Potential $V(\mathbf{r}, t)$, so gilt

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}, t) \quad (5.15)$$

mit

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 . \quad (5.16)$$

Die Schrödinger - Gleichung ist eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Kennen wir also die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ zu einer speziellen Zeit t und für alle \mathbf{r} , so bestimmt dies eindeutig die Wellenfunktion für alle \mathbf{r} und alle anderen Zeiten t' . Da die Schrödinger - Gleichung außerdem linear in ψ ist, gilt das Superpositionsprinzip sowie ein linearer Zusammenhang zwischen den Wellenfunktionen zu verschiedenen Zeiten, beispielsweise zwischen $\psi(\mathbf{r}, t')$ und $\psi(\mathbf{r}, t)$. Dies impliziert weiter, daß ψ eine homogene Integralgleichung der Form

$$\psi(\mathbf{r}', t') = \int G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3 r \quad (5.17)$$

befriedigt. Hierbei erstreckt sich die Integration über den ganzen Raum.

Die Gleichung (5.17) dient gleichzeitig zur Definition der Funktion G . G nennen wir die zum Hamilton - Operator H korrespondierende Greensche Funktion. Mit Hilfe der Greenschen Funktion G und dem Anfangswert $\psi(\mathbf{r}, t)$ ist es uns möglich, die Wellenfunktion an allen Raumpunkten \mathbf{r}' und zu allen Zeiten t' zu bestimmen.

In den folgenden Betrachtungen beschränken wir uns zunächst auf die sogenannte retardierte Greensche Funktion, die der einschränkenden Bedingung

$$G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{für} \quad t' < t \quad (5.18)$$

unterworfen ist.

Um etwas vertrauter zu werden mit der Greenschen Funktion und für spätere Anwendungen ermitteln wir zunächst im eindimensionalen Fall die Eigenfunktionsdarstellung der Greenschen Funktion.

5.4 Die Eigenfunktionsdarstellung der Greenschen Funktion

Wir wollen nun eine weitere wichtige Relation bezüglich der Greenschen Funktion ableiten, die für einige nachfolgende Rechnungen von Bedeutung ist. Wir betrachten zeitunabhängige Hamilton-Operatoren, d.h., es gilt die stationäre Gleichung

$$H\phi_n = E_n \phi_n \quad , \quad (5.19)$$

und wir können die zeitabhängige Wellenfunktion $\psi_n(x, t)$ ansetzen als

$$\psi_n(x, t) = e^{-(i/\hbar)E_n t} \phi_n(x) . \quad (5.20)$$

Die rein ortsabhängigen Wellenfunktionen $\phi_n(x)$ seien vollständig und orthonormal

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \delta_{mn} . \quad (5.21)$$

In dem durch die Basisfunktionen $\phi_n(x)$ aufgespannten Hilbert-Raum können wir jede Funktion $f(x)$ darstellen als Superposition der Basisfunktionen

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) . \quad (5.22)$$

Die Entwicklungskoeffizienten a_n lassen sich leicht bestimmen. Wir bilden

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \delta_{mn} = a_m . \quad (5.23)$$

Somit folgt zusammengefaßt

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x) f(x) dx . \quad (5.24)$$

Setzen wir diesen Ausdruck in (5.22) ein, so führt dies offensichtlich auf die Identität

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(y) f(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y) \right] f(y) dy . \quad (5.25)$$

Durch diese einfachen Umformungen haben wir eine Darstellung der δ -Funktion gewonnen

$$\delta(x - y) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y) , \quad (5.26)$$

was natürlich durch die angenommene Vollständigkeit der Basisfunktionen bereits impliziert wurde.

Wir können nun die Greensche Funktion durch die Basisfunktionen ϕ_n ausdrücken. Zum Zeitpunkt t_1 gilt

$$f(x) \equiv \Psi(x, t_1) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t_1} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x) \quad (5.27)$$

für eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Es folgt

$$c_n = a_n e^{(i/\hbar)E_n t_1}. \quad (5.28)$$

Zum Zeitpunkt $t_2 > t_1$ gilt analog

$$\Psi(x, t_2) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t_2} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{(i/\hbar)E_n(t_1-t_2)} \phi_n(x). \quad (5.29)$$

Nun nutzen wir die Relation (5.24) für a_n aus. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \Psi(x, t_2) &= \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) e^{-(i/\hbar)E_n(t_2-t_1)} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(y) f(y) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y) e^{-(i/\hbar)E_n(t_2-t_1)} f(y) dy. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Dies vergleichen wir mit der Definitionsgleichung der Greenschen Funktion

$$\Psi(x, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, t_2; y, t_1) f(y) dy \quad (5.31)$$

und ermitteln schließlich die Eigenfunktionsdarstellung für den Integralkern

$$G(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x_2) \phi_n^*(x_1) e^{-(i/\hbar)E_n(t_2-t_1)} \quad \text{für } t_2 > t_1. \quad (5.32)$$

5.5 Einführung der Pfadintegration –

Diskussionen im Rahmen des Hamilton-Formalismus

In der klassischen Mechanik können wir die Wirkung $\mathcal{A}[q(t), p(t)]$ als Funktional der generalisierten Koordinate $q(t)$ und des generalisierten Impulses $p(t)$ ausdrücken. Unter Verwendung der Hamilton-Funktion ist die Wirkung definiert durch das folgende Zeitintegral in den Grenzen t_a und t_b

$$\mathcal{A}[q(t), p(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \{p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t), t)\} dt. \quad (5.33)$$

Die generalisierte Geschwindigkeit $\dot{q}(t)$ ist hierbei eine Funktion des generalisierten Impulses, d.h. $\dot{q} = \dot{q}(p)$.

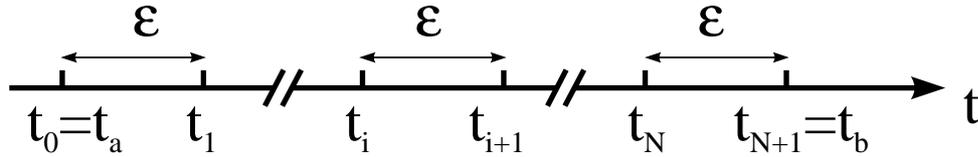
Der Grundgedanke der Summation über alle Wege im Phasenraum von q_a nach q_b kann in eine mathematische Formulierung übertragen werden, indem man die Zeitachse zwischen den Zeitpunkten t_a und t_b diskretisiert. Wir betrachten die diskreten Zeitpunkte

$$\begin{aligned} t_0 &= t_a, \\ t_n &= t_0 + n\epsilon = t_a + n\epsilon \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots, N, \\ t_{N+1} &= t_b. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Der Abstand zwischen jeweils zwei benachbarten diskreten Zeitpunkten ist einfach gegeben durch

$$\epsilon = \frac{t_b - t_a}{N + 1} = \frac{T}{N + 1}. \quad (5.35)$$

Das Zeitintervall $T = t_b - t_a$ ist konstant. Die Diskretisierung der Zeitachse ist in der Figur dargestellt.



Diskretisierung der Zeitachse. Im Bild ist die Zeitachse zwischen den Zeitpunkten t_1 und t_i bzw. zwischen t_{i+1} und t_N unterbrochen, was durch die doppelten schrägen Linien angedeutet wird.

$q_n = q(t_n)$ und $p_n = p(t_n)$ können alle möglichen Werte annehmen, und wir müssen über alle diese Werte integrieren. Die Endpunkte q_a und q_b bleiben aber fest, während hingegen über die Endimpulse p_{N+1} auch integriert werden soll. Die (t, q) -Ebene wird in der nächsten Figur veranschaulicht. Ebenso wie die (t, q) -Ebene kann natürlich auch die (t, p) -Ebene dargestellt werden. Als entscheidender Unterschied ist jedoch zum Zeitpunkt $t_b = t_{N+1}$ der zugehörige Endimpuls p_{N+1} *nicht* fixiert sondern variabel. Also kann auch p_{N+1} alle möglichen Werte annehmen.

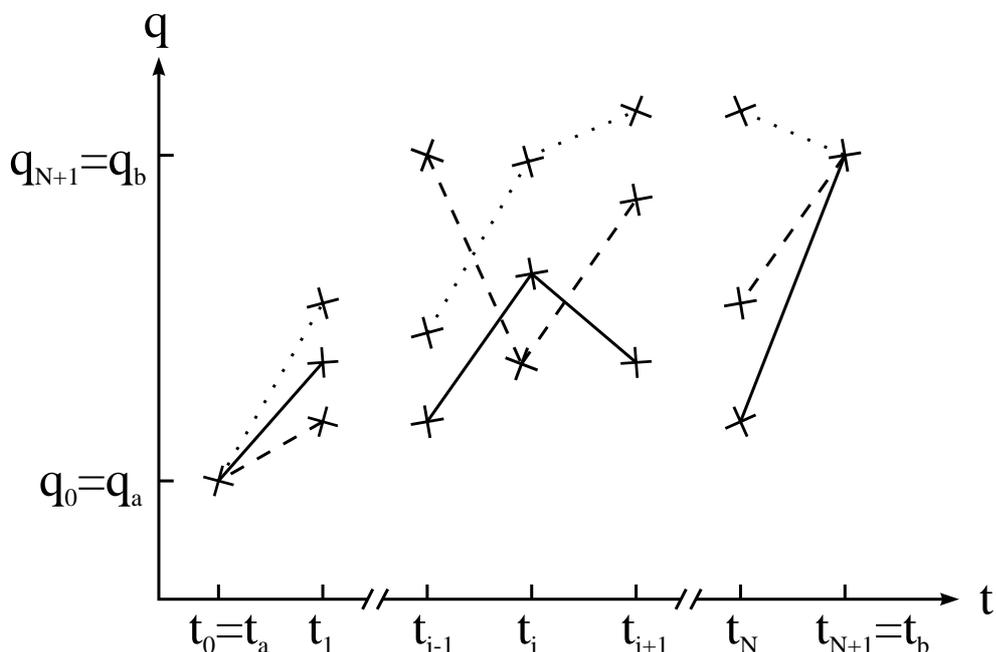
Das Wirkungsfunktional $\mathcal{A}[p, q]$ geht bei einer stückweisen, linearen Approximation des Weges in eine Funktion der $2N + 1$ Stützstellen $q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_{N+1}$ über.

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_{N+1}) = \\ \sum_{n=1}^{N+1} \epsilon \left[p_n \frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} - \frac{1}{2} (H(p_n, q_n, t_n) + H(p_n, q_{n-1}, t_n)) \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Im geforderten Limes $N \rightarrow \infty$ oder äquivalent $\epsilon \rightarrow 0$ mit der zusätzlichen Bedingung $(N + 1)\epsilon = t_b - t_a = T$ repräsentiert die Funktion (5.36) immer besser das ursprüngliche Funktional.

Zusammen mit den Integrationen über die Stützstellen führt dies zu der folgenden *Definition* des Propagators und der Summe über alle Pfade

$$G(q_b, t_b; q_a, t_a) \equiv \sum_{\substack{\text{alle Pfade von} \\ q_a \text{ nach } q_b}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[p, q] \right\}$$



Schematisch werden die Pfade zwischen den Punkten (t_a, q_a) und (t_b, q_b) angedeutet. Die Endpunkte $q(t_a) = q_a$ und $q(t_b) = q_b$ sind fixiert. An den diskreten Zeitpunkten $t = t_1$ bis $t = t_N$ können die generalisierten Koordinaten q_i jedoch alle Werte annehmen.

$$\begin{aligned}
&\equiv \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^N dq_n \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \frac{dp_{N+1}}{2\pi\hbar} \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \epsilon \left[p_n \frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} - \frac{1}{2} (H(p_n, q_n, t_n) + H(p_n, q_{n-1}, t_n)) \right] \right\} \\
&\equiv \int \mathcal{D}q \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[p, q] \right\} . \tag{5.37}
\end{aligned}$$

Wir haben dabei die abkürzende Bezeichnung

$$\mathcal{D}q = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \prod_{n=1}^N dq_n \tag{5.38}$$

eingeführt. Analoges gilt für $\mathcal{D}p$. Wir integrieren über alle Phasenraumvolumenelemente $dq_n dp_n$ gemessen in Einheiten des Planckschen Wirkungsquantums $\hbar = 2\pi\hbar$. Die zusätzliche Integration über p_{N+1} sagt aus, daß auch über alle Endimpulse bei $t = t_{N+1}$ integriert werden muß.

5.6 Die Wirkung in der klassischen Mechanik

Wir beginnen unsere formale Studien mit einem Rückblick auf die klassische Mechanik. Hier haben wir gelernt, daß wir ein physikalisches System durch eine Lagrange - Funktion

$$L = L(q, \dot{q}, t) \quad (5.39)$$

mit den generalisierten Koordinaten $q = q(t)$ und den generalisierten Geschwindigkeiten $\dot{q} = \dot{q}(t)$ beschreiben können. q kann dabei synonym für einen Satz von N Variablen q_i mit $i = 1, \dots, N$ stehen.

Eine zentrale Rolle im Pfadintegral - Formalismus nimmt die Wirkung \mathcal{A} ein, die als Zeitintegral über die Lagrange - Funktion zwischen den Zeitpunkten t_a und t_b definiert ist,

$$\mathcal{A} = \int_{t_a}^{t_b} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt . \quad (5.40)$$

Die Gesetzmäßigkeiten für die Dynamik des Systems folgen aus dem Hamilton - Prinzip. Es besagt, daß die Wirkung \mathcal{A} für den klassischen physikalischen Weg

$$q_{kl} = q_{kl}(t) \quad (5.41)$$

extremal werden muß. Dies bedeutet, daß für alle infinitesimalen Variationen $\delta q(t)$ mit festgehaltenen Endpunkten

$$\begin{aligned} \delta q(t_a) &\equiv 0 & \text{mit} & & q(t_a) &\equiv q_a , \\ \delta q(t_b) &\equiv 0 & \text{mit} & & q(t_b) &\equiv q_b , \end{aligned} \quad (5.42)$$

die Variation $\delta \mathcal{A}$ des Wirkungsfunktional $\mathcal{A}[q(t)]$ verschwinden muß,

$$\delta \mathcal{A} = 0 . \quad (5.43)$$

Wir führen die Variation aus. Es ist

$$\delta \mathcal{A} = \mathcal{A}[q + \delta q] - \mathcal{A}[q] = 0 . \quad (5.44)$$

Wir setzen die Definition (5.40) ein

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[q + \delta q] &= \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{q} + \delta \dot{q}, q + \delta q, t) dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left[L(\dot{q}, q, t) + \delta \dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \delta q \frac{\partial L}{\partial q} \right] dt \\ &= \mathcal{A}[q] + \int_{t_a}^{t_b} \left[\delta \dot{q} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \delta q \frac{\partial L}{\partial q} \right] dt . \end{aligned} \quad (5.45)$$

Nach partieller Integration erhalten wir bekanntermaßen

$$\mathcal{A}[q + \delta q] - \mathcal{A}[q] = \delta q \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right|_{t_a}^{t_b} - \delta q \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right] dt . \quad (5.46)$$

Der erste Term der rechten Seite ist null, da δq an den Endpunkten q_a und q_b verschwindet. Aus dem Hamilton - Prinzip folgt so die Euler - Lagrange - Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 . \quad (5.47)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung bestimmt den klassischen Pfad $q(t) = q_{kl}(t)$. Der Ausdruck

$$\frac{\delta \mathcal{A}}{\delta q} = - \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right\} \quad (5.48)$$

stellt die Funktionalableitung der Wirkung \mathcal{A} in bezug auf den Weg q dar.

In der klassischen Mechanik ist also die Form des Wirkungsintegrals $\mathcal{A} = \int L dt$ von Interesse, nicht aber unbedingt der Extremwert \mathcal{A}_{kl} selber. Dieses Interesse leitet sich aus der Notwendigkeit ab, die Wirkung auch bezüglich benachbarter Wege $q = q_{kl} + \delta q$ zu kennen, um den Weg q_{kl} der geringsten Wirkung bestimmen zu können. Wir werden noch sehen, daß in der Quantenmechanik beides – die Form des Wirkungsintegrals und der Wert des Extremums – von Bedeutung sind.

Wir definieren nun den zu q konjugierten Impuls p durch

$$p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} . \quad (5.49)$$

Wir erhalten die Hamilton - Funktion durch

$$H(p, q) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}, t) \quad (5.50)$$

mit $\dot{q} = \dot{q}(p)$. Die Hamiltonischen Bewegungsgleichungen lauten

$$\begin{aligned} \dot{q}(t) &= \frac{\partial H}{\partial p} , \\ \dot{p}(t) &= - \frac{\partial H}{\partial q} . \end{aligned} \quad (5.51)$$

Sie können ebenfalls aus dem Extremalprinzip $\delta \mathcal{A}$ gewonnen werden. Dazu muß man die Wirkung durch p und q ausdrücken,

$$\mathcal{A}[q(t), p(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \{ p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t), t) \} dt , \quad (5.52)$$

mit der Vorschrift, daß sowohl die generalisierten Koordinaten q als auch die generalisierten Impulse p unabhängig voneinander zu variieren sind.

Als erste Übung wollen wir die klassische Wirkung für den harmonischen Oszillator und für das freie Teilchen berechnen. Wir setzen hierbei der Einfachheit wegen $q(t) = x(t)$.

5.7 Die klassische Wirkung für den harmonischen Oszillator und für das freie Teilchen

Der harmonische Oszillator wird durch die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (5.53)$$

beschrieben. Die Lagrange-Funktion für ein freies Teilchen – ebenso wie die korrespondierende Bewegungsgleichung – ergibt sich einfach durch den Grenzübergang $\omega \rightarrow 0$,

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 . \quad (5.54)$$

Um den klassischen Pfad $x_{kl}(t)$ für den Fall $\omega \neq 0$ zu erhalten, muß die aus (5.53) abgeleitete Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad (5.55)$$

mit den Randwerten

$$x(t_a) = x_a , \quad x(t_b) = x_b \quad (5.56)$$

integriert werden. Die beiden freien Konstanten der allgemeinen Lösung

$$x(t) = c_1 \sin \omega t + c_2 \cos \omega t \quad (5.57)$$

werden durch die Randbedingungen (5.56) folgendermaßen festgelegt

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{x_b \cos \omega t_a - x_a \cos \omega t_b}{\sin \omega T} , \\ c_2 &= \frac{x_a \sin \omega t_b - x_b \sin \omega t_a}{\sin \omega T} , \end{aligned} \quad (5.58)$$

mit

$$T = t_b - t_a . \quad (5.59)$$

Dies kann leicht durch Einsetzen der Koeffizienten c_1 und c_2 in die allgemeine Lösung (5.57) unter Verwendung der trigonometrischen Relation

$$\sin \omega T = \sin \omega t_b \cos \omega t_a - \cos \omega t_b \sin \omega t_a \quad (5.60)$$

geprüft werden.

Die Berechnung der Wirkung für den klassischen Pfad

$$\mathcal{A}_{kl} = \int_{t_a}^{t_b} L dt \quad (5.61)$$

wird durch eine partielle Integration wesentlich vereinfacht

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_{kl} &= \int_{t_a}^{t_b} \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}_{kl}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 x_{kl}^2 \right\} dt \\
 &= \frac{m}{2} x_{kl} \dot{x}_{kl} \Big|_{t_a}^{t_b} - \frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} x_{kl} \{ \ddot{x}_{kl} + \omega^2 x_{kl} \} dt \\
 &= \frac{m}{2} \{ x_{kl}(t_b) \dot{x}_{kl}(t_b) - x_{kl}(t_a) \dot{x}_{kl}(t_a) \} .
 \end{aligned} \tag{5.62}$$

In der zweiten Zeile verschwindet das Integral aufgrund der Bewegungsgleichung (5.55). Wir schreiben den Ausdruck für den klassischen Pfad um

$$\begin{aligned}
 x_{kl}(t) &= \{ x_b (\cos \omega t_a \sin \omega t - \sin \omega t_a \cos \omega t) / \sin \omega T \\
 &\quad + x_a (\sin \omega t_b \cos \omega t - \cos \omega t_b \sin \omega t) / \sin \omega T \} \\
 &= \{ x_b \sin \omega(t - t_a) + x_a \sin \omega(t_b - t) \} / \sin \omega T .
 \end{aligned} \tag{5.63}$$

Damit haben wir auch

$$\dot{x}_{kl}(t) = \omega \{ x_b \cos \omega(t - t_a) - x_a \cos \omega(t_b - t) \} / \sin \omega T . \tag{5.64}$$

Diese Ausdrücke setzen wir in die Wirkung für den klassischen Pfad ein

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_{kl} &= \frac{m}{2} \{ x_b \omega (x_b \cos \omega T - x_a) - x_a \omega (x_b - x_a \cos \omega T) \} / \sin \omega T \\
 &= \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \{ (x_a^2 + x_b^2) \cos \omega T - 2x_a x_b \} .
 \end{aligned} \tag{5.65}$$

Die Wirkung für das freie Teilchens folgt nun sofort durch den Grenzübergang $\omega \rightarrow 0$

$$\mathcal{A}_{kl} = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{T} . \tag{5.66}$$

Man beachte, daß bei der Wirkung für den harmonischen Oszillator im Gegensatz zu der des freien Teilchens die Orte absolut eingehen, da natürlich $x = 0$ ausgezeichnet ist.

Berechnung des Integrals $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$

I_1 bezeichne das bestimmte Integral

$$I_1 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx, \quad (5.67)$$

das von grundlegender Bedeutung ist für alle konkreten Berechnungen im Rahmen der Pfadintegralmethode. Wir verwenden einen Kunstgriff, um I_1 zu ermitteln. Man kann (5.67) auch in einer anderen Variablen ausdrücken

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy. \quad (5.68)$$

Multiplikation von (5.67) und (5.68) ergibt

$$\begin{aligned} I_1^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} e^{-y^2} dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy. \end{aligned} \quad (5.69)$$

Dieses Integral erstreckt sich über die gesamte xy -Ebene. Zur Integration in der Ebene führen wir Polarkoordinaten r, θ ein. Dann gilt $x^2 + y^2 = r^2$ und das Flächenelement lautet $dF = dx dy = r dr d\theta$. Um die gesamte Ebene zu erfassen, läuft θ von 0 bis 2π und r von 0 bis ∞ . Damit folgt

$$I_1^2 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr d\theta = 2\pi \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr, \quad (5.70)$$

da sich die Integration über θ natürlich sofort ausführen läßt. Der Faktor r im Integranden vereinfacht nun die Auswertung des Integrals beträchtlich, denn es gilt offensichtlich

$$\frac{d}{dr} e^{-r^2} = -2r e^{-r^2}. \quad (5.71)$$

Wir erhalten

$$I_1^2 = 2\pi \int_0^{\infty} \left(-\frac{1}{2}\right) \left[\frac{d}{dr} e^{-r^2}\right] dr = -\pi e^{-r^2} \Big|_0^{\infty} = \pi \quad (5.72)$$

oder

$$I_1 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}. \quad (5.73)$$

Da e^{-x^2} eine gerade Funktion ist, folgt auch

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 2 \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \quad (5.74)$$

und somit

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}. \quad (5.75)$$

Berechnung des Integrals $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx$

Damit das Integral konvergiert muß offensichtlich gelten $a > 0$. Wir betrachten zunächst den Spezialfall $b = 0$. Mit Hilfe der Substitution $u^2 = ax^2$ und $dx = 1/\sqrt{a} du$ folgt

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (5.76)$$

wobei wir das Resultat (5.73) verwendet haben.

Wir betrachten nun den allgemeinen Ausdruck mit $b \neq 0$ und führen eine quadratische Ergänzung des Exponenten durch

$$-ax^2 + bx = -(ax^2 - bx + \frac{b^2}{4a}) + \frac{b^2}{4a} = -\left(\sqrt{a}x - \frac{b}{2\sqrt{a}}\right)^2 + \frac{b^2}{4a}. \quad (5.77)$$

Nun substituieren wir wieder $u = \sqrt{a}x - b/(2\sqrt{a})$ mit $dx = 1/\sqrt{a} du$. Dies führt auf

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = e^{b^2/(4a)} \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/(4a)}. \quad (5.78)$$

Berechnung des Integrals $\int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2} e^{b(x_2-x)^2} dx$

Wir schreiben

$$\begin{aligned} I_4 &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2} e^{b(x_2-x)^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1^2-2xx_1+x^2)} e^{b(x_2^2-2xx_2+x^2)} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{(a+b)x^2 - (2ax_1+2bx_2)x + ax_1^2+bx_2^2} dx \\ &= e^{ax_1^2+bx_2^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(a+b)x^2 - (2ax_1+2bx_2)x} dx. \end{aligned} \quad (5.79)$$

Das letzte Integral werten wir mit Hilfe der Relation (5.78) aus. Es folgt

$$\begin{aligned} I_4 &= e^{ax_1^2+bx_2^2} \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp\left\{-\frac{(2ax_1+2bx_2)^2}{4(a+b)}\right\} \\ &= \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp\left\{\frac{-a^2x_1^2 - b^2x_2^2 - 2abx_1x_2}{a+b} + ax_1^2 + bx_2^2\right\} \\ &= \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp\left\{\frac{1}{a+b} ab(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2)\right\}. \end{aligned} \quad (5.80)$$

Damit ergibt sich zusammenfassend

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{a(x_1-x)^2} e^{b(x_2-x)^2} dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp\left\{\frac{ab}{a+b}(x_1 - x_2)^2\right\}. \quad (5.81)$$

5.8 Die Pfadintegraldarstellung des Propagators unter Verwendung der Lagrange-Funktion

Wir wollen nun die Pfadintegraldarstellung unter Einbeziehung der Wirkung im Hamilton-Formalismus zurückführen auf die ursprüngliche Feynman-Formulierung. Dazu betrachten wir ausschließlich Hamilton-Funktionen der Art

$$H(p, q, t) = \frac{p^2}{2m} + V(q, t), \quad (5.82)$$

die aber zur Beschreibung sehr vieler physikalischer Systeme geeignet sind.

Es können die $N + 1$ Impulsintegrationen explizit ausgeführt werden. Der verbleibende Ausdruck mit nur räumlichen Integrationen stellt die ursprüngliche Feynman-Formulierung für den Propagator $G(q_b, t_b; q_a, t_a)$ dar.

$$\begin{aligned} G(q_b, t_b; q_a, t_a) &= \int \mathcal{D}q \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [p \dot{q} - H(p, q, t)] dt \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_{i=1}^N dq_i \right) \left(\prod_{i=1}^{N+1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right) \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N+1} \left[p_i (q_i - q_{i-1}) - \frac{p_i^2}{2m} \epsilon - V(q_i, t_i) \epsilon \right] \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_{i=1}^N dq_i \right) \left(\prod_{i=1}^{N+1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right) \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N+1} \frac{\epsilon}{2m} \left[p_i - \frac{m(q_i - q_{i-1})}{\epsilon} \right]^2 \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N+1} \left[\frac{m(q_i - q_{i-1})^2}{2\epsilon} - V(q_i, t_i) \epsilon \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.83)$$

Die quadratische Ergänzung im Exponenten hat somit $N + 1$ separierbare Gauß-Integrale über die Impulse p_i erzeugt.

Wir verwenden nun die Integralbeziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -ia(x - b)^2 \right\} dx = \sqrt{\frac{\pi}{ia}}. \quad (5.84)$$

Dies führt uns direkt auf

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{2m\hbar} (p_i - \text{const})^2 \right\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{m 2\pi\hbar}{i\epsilon} \right)^{1/2} = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon} \right)^{1/2}. \quad (5.85)$$

Die $N + 1$ -fache Impulsintegration liefert daher einen Faktor $A^{-(N+1)}$ mit

$$A = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m}}. \quad (5.86)$$

Für den Propagator bekommen wir also

$$\begin{aligned} G(q_b, t_b; q_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{A} \left(\prod_{i=1}^N \frac{dq_i}{A} \right) \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_i - q_{i-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(q_i, t_i) \right] \epsilon \right\} \\ &\equiv \int \mathcal{D}'q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q, t) \right] dt \right\} \\ &= \int \mathcal{D}'q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}, t) dt \right\}. \end{aligned} \quad (5.87)$$

Dies ist das gewünschte Resultat. Es entspricht der ursprünglichen Feynman-Formulierung des Pfadintegrals. In (5.87) ist also $\mathcal{D}'q$ in der diskretisierten Version durch

$$\mathcal{D}'q = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{1}{A} \prod_{i=1}^N \frac{dq_i}{A} \quad (5.88)$$

zu ersetzen. Der Exponent in der letzten Zeile von (5.87) ist wieder das klassische Wirkungsfunktional, hier allerdings in der (q, \dot{q}) -Formulierung mit der Lagrange-Funktion. Während die Phasenraum-Formel für quantitative Berechnungen oftmals flexibler ist, ist die Lagrange-Formulierung für das intuitive Verständnis besser geeignet.

5.9 Die Ableitung der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion aus der Schrödinger - Theorie

Feynman hat die Pfadintegrale als Ausgangspunkt benutzt und damit die Quantenmechanik abgeleitet. Man kann aber auch von der Kenntnis der Quantenmechanik ausgehen und die Pfadintegrale ableiten. Wir starten von der Schrödinger - Gleichung. Zur Vereinfachung beschränken wir uns auf eine Dimension im Ortsraum. Dann gilt

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad (5.89)$$

mit dem Hamilton - Operator

$$H = T + V = \frac{1}{2m} p^2 + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V. \quad (5.90)$$

Unser Interesse gilt nun dem Propagator oder der Greenschen Funktion. Die Greensche Funktion erfüllt die Gleichung

$$\left(H_x - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) G(x, t; y, t_0) = -i\hbar \delta(x - y) \delta(t - t_0) . \quad (5.91)$$

Dies wollen wir kurz nachweisen. Einleitend hatten wir bemerkt, daß wir uns zunächst auf die retardierte Greensche Funktion mit

$$G(x, t; y, t_0) = 0 \quad \text{für} \quad t < t_0 \quad (5.92)$$

beschränken. Dann gilt die Definitionsgleichung

$$\Theta(t - t_0) \psi(x, t) = \int G(x, t; y, t_0) \psi(y, t_0) dy , \quad (5.93)$$

wobei Θ die Sprungfunktion bezeichnet. Auf diese Gleichung wenden wir nun den Operator

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_x$$

an. Dabei machen wir von dem Zusammenhang

$$\frac{d}{d\tau} \Theta(\tau) = \delta(\tau) \quad (5.94)$$

zwischen der Ableitung der Sprungfunktion und der δ -Funktion Gebrauch. Wir bekommen

$$\begin{aligned} i\hbar \delta(t - t_0) \psi(x, t) + \Theta(t - t_0) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_x \right) \psi(x, t) = \\ \int \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_x \right) G(x, t; y, t_0) \psi(y, t_0) dy . \end{aligned} \quad (5.95)$$

Der zweite Term auf der linken Seite verschwindet aufgrund der Schrödinger - Gleichung (5.89). Wir sehen nun, daß die Gleichung (5.95) befriedigt wird, wenn die Beziehung (5.91) gilt.

Wir führen nun den Greenschen Operator $\mathcal{G}(t, t_0)$ ein. Für zeitunabhängige Hamilton - Operatoren läßt sich der Greensche Operator darstellen als

$$\mathcal{G}(t, t_0) = \Theta(t - t_0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H (t - t_0) \right\} . \quad (5.96)$$

Die Greensche Funktion ergibt sich in der Ortsdarstellung aus dem Matrixelement des Greenschen Operators mit Eigenfunktionen des Ortsoperators

$$G(x, t; y, t_0) = \langle x | \mathcal{G}(t, t_0) | y \rangle . \quad (5.97)$$

In diesem Kapitel werden wir vielfach für die Wellenfunktionen die Diracsche $bra(\langle x|)$ - und $ket(|y\rangle)$ -Schreibweise verwenden. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir $t_0 = 0$ setzen. Dann gilt für $t > 0$

$$G(x, t; y, 0) = \langle x | \mathcal{G}(t, 0) | y \rangle = \langle x | e^{-iHt/\hbar} | y \rangle . \quad (5.98)$$

Wir schieben nun einen vollständigen Satz von Energieeigenzuständen $|n\rangle$ ein mit $n = 0, 1, \dots$ und

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle . \quad (5.99)$$

Die entsprechenden Wellenfunktionen sind

$$\phi_n(x) = \langle x | n \rangle . \quad (5.100)$$

Damit bekommen wir aus (5.98)

$$G(x, t; y, 0) = \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | e^{-iHt/\hbar} | y \rangle = \sum_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \phi_n^*(y) . \quad (5.101)$$

Dies entspricht gerade der bereits abgeleiteten Darstellung der Greenschen Funktion durch Eigenfunktionen des Hamilton - Operators. Im folgenden gehen wir aus von

$$G(x, t; y, 0) = \langle x | e^{-iHt/\hbar} | y \rangle . \quad (5.102)$$

Das Pfadintegral resultiert nun einfach aus der formalen Identität

$$e^H = \left(e^{H/(N+1)} \right)^{N+1} . \quad (5.103)$$

Wir substituieren $\lambda = it/\hbar$ und schreiben

$$G(x, t; y, 0) = \langle x | e^{-\lambda(T+V)/(N+1)} e^{-\lambda(T+V)/(N+1)} \dots e^{-\lambda(T+V)/(N+1)} | y \rangle , \quad (5.104)$$

wobei das Produkt im Matrixelement $(N + 1)$ -mal auftritt. Nun gilt

$$\begin{aligned} e^{-\lambda(T+V)/(N+1)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-\lambda(T+V)/(N+1)]^n}{n!} = \\ &= 1 - \frac{\lambda(T+V)/(N+1)}{1!} + \frac{\lambda^2(T+V)^2/(N+1)^2}{2!} + \dots = \\ &= 1 - \frac{\lambda T}{N+1} - \frac{\lambda V}{N+1} + \frac{\lambda^2 T^2}{2(N+1)^2} + \frac{\lambda^2 V^2}{2(N+1)^2} + \frac{\lambda^2 TV}{2(N+1)^2} + \frac{\lambda^2 VT}{2(N+1)^2} + \dots . \end{aligned} \quad (5.105)$$

Damit erhalten wir

$$e^{-\lambda(T+V)/(N+1)} = e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} + K \frac{\lambda^2}{(N+1)^2} + \dots \quad (5.106)$$

mit dem Kommutator

$$K = \frac{1}{2}(VT - TV) = \frac{1}{2}[V, T]. \quad (5.107)$$

Dabei haben wir ausgenutzt

$$\begin{aligned} e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} &= \\ &\left(1 - \frac{\lambda T}{N+1} + \frac{\lambda^2 T^2}{2(N+1)^2} + \dots\right) \left(1 - \frac{\lambda V}{N+1} + \frac{\lambda^2 V^2}{2(N+1)^2} + \dots\right) = \\ &1 - \frac{\lambda T}{N+1} + \frac{\lambda^2 T^2}{2(N+1)^2} - \frac{\lambda V}{N+1} + \frac{\lambda^2 V^2}{2(N+1)^2} + \frac{\lambda^2 TV}{(N+1)^2} + \dots \end{aligned} \quad (5.108)$$

Als nächsten Schritt wollen wir nun den Term

$$\left[e^{-\lambda(T+V)/(N+1)}\right]^{N+1} = \left[e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(N+1)^2}\right)\right]^{N+1} \quad (5.109)$$

ersetzen durch

$$\left[e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)}\right]^{N+1}. \quad (5.110)$$

Diese Ersetzung ist bei der Einbeziehung von Operatoren nicht ganz trivial. Bei den notwendigen Umformung müssen wir sorgfältig auf die Reihenfolge der einzelnen Faktoren achten. Wir betrachten zunächst die folgende Differenz

$$\begin{aligned} &\left(e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)}\right)^{N+1} - \left(e^{-\lambda(T+V)/(N+1)}\right)^{N+1} = \\ &\left[e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} - e^{-\lambda(T+V)/(N+1)}\right] \left[e^{-\lambda(T+V)/(N+1)}\right]^N + \\ &e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} \left[e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} - e^{-\lambda(T+V)/(N+1)}\right] e^{-\lambda(T+V)(N-1)/(N+1)} \\ &+ \dots + \left(e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)}\right)^N \left[e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} - e^{-\lambda(T+V)/(N+1)}\right]. \end{aligned} \quad (5.111)$$

Diese Gleichung ist formal eine Identität. Es treten $N+1$ Terme auf, die jeweils als Faktor den Ausdruck

$$e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} - e^{-\lambda(T+V)/(N+1)}$$

enthalten. Diese Differenz ist von der Ordnung $\mathcal{O}(1/N^2)$. Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ verschwindet diese Differenz. Somit bekommen wir

$$G(x, t; y, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | \left(e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)}\right)^{N+1} | y \rangle. \quad (5.112)$$

Dies ist die Trotter Produktformel. Von hier zu den Pfadintegralen sind es nur noch wenige Schritte. Wir fügen in (5.112) jeweils eine 1 in Form einer Vollständigkeitsrelation ein

$$\int dx_j |x_j\rangle \langle x_j| = 1 \quad \text{mit} \quad j = 1, \dots, N. \quad (5.113)$$

Dies führt schließlich auf

$$G(x, t; y, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_N \prod_{j=0}^N \langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/(N+1)} e^{-\lambda V/(N+1)} | x_j \rangle. \quad (5.114)$$

Speziell gilt

$$y = x_0, \quad x = x_{N+1}. \quad (5.115)$$

Der Multiplikationsoperator V ist diagonal im Ortsraum

$$e^{-\lambda V/(N+1)} |x_j\rangle = |x_j\rangle e^{-\lambda V(x_j)/(N+1)}. \quad (5.116)$$

Als nächstes benötigen wir Matrixelemente des Operators $\exp\{-\lambda T/(N+1)\}$ im Ortsraum zwischen verschiedenen Zuständen, zum Beispiel zwischen $\langle \eta |$ und $|\xi\rangle$. Um diese zu ermitteln, führen wir einen vollständigen Satz von Impulseigenzuständen ein

$$1 = \int dp |p\rangle \langle p| \quad (5.117)$$

mit

$$\langle p | \xi \rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} e^{-ip\xi/\hbar}. \quad (5.118)$$

Dies ergibt

$$\begin{aligned} \langle \eta | e^{-\lambda T/(N+1)} | \xi \rangle &= \int dp \langle \eta | e^{-\lambda T/(N+1)} | p \rangle \langle p | \xi \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\lambda p^2/[2m(N+1)]} e^{ip(\eta-\xi)/\hbar}. \end{aligned} \quad (5.119)$$

Solche Gauß - Integrale treten bei Pfadintegralen sehr häufig auf. Wir benutzen die allgemeine Formel

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/(4a)}, \quad (5.120)$$

und wir erhalten

$$\langle \eta | e^{-\lambda T/(N+1)} | \xi \rangle = \sqrt{\frac{m(N+1)}{2\pi\lambda\hbar^2}} e^{-m(N+1)(\eta-\xi)^2/(2\lambda\hbar^2)}. \quad (5.121)$$

Dieses Resultat setzen wir in den Ausdruck für die Greensche Funktion G ein und bekommen

$$G(x, t; y, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_N \left(\frac{m(N+1)}{2\pi\lambda\hbar^2} \right)^{(N+1)/2} \times \prod_{j=0}^N \exp \left[-\frac{m(x_{j+1} - x_j)^2(N+1)}{2\lambda\hbar^2} - \frac{\lambda V(x_j)}{N+1} \right]. \quad (5.122)$$

Wir setzen nun wieder

$$\epsilon = \frac{t}{N+1} = \frac{\hbar\lambda}{i(N+1)} \quad (5.123)$$

und fassen die Faktoren mit den Exponentialausdrücken zusammen

$$G(x, t; y, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{(N+1)/2} \times \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^N \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j) \right] \right\}. \quad (5.124)$$

Dies ist der Pfadintegralausdruck für den Propagator. Wir nehmen nun an, die verschiedenen Punkte y, x_1, \dots, x_N, x sind durch Geraden miteinander verbunden. Dann haben wir einen Streckenzug von y nach x vorliegen. Die Summe in der Exponentialfunktion kann dann als Riemann - Summe eines bestimmten Integrals entlang des Pfades verstanden werden

$$\sum_{j=0}^N \epsilon \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j) \right] \longrightarrow \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x) \right]. \quad (5.125)$$

Der Integrand ist gerade die klassische Lagrange - Funktion

$$L = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x). \quad (5.126)$$

Das Integral selber ist die Wirkung. Damit ist das Argument der Exponentialfunktion gerade $i\mathcal{A}/\hbar$, wobei \mathcal{A} entlang der einzelnen Geraden berechnet wird, die $y, x_1, x_2, \dots, x_N, x$ verbinden. Der Vorfaktor

$$\frac{1}{A} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \quad (5.127)$$

kommt bei dieser Rechnung automatisch heraus, ohne daß wir spezielle Annahmen machen müssen. Erst dieser Normierungsfaktor macht aus dem Pfadintegral einen endlichen Ausdruck. Letztlich haben wir wieder

$$G(x, t; y, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_N}{A} e^{i\mathcal{A}[x]/\hbar}. \quad (5.128)$$

Berechnung des Integrals $\int_0^\infty e^{(i\omega-\epsilon)t} dt$

Wir führen die Integration explizit aus

$$\begin{aligned} I_5 &= \int_0^\infty e^{(i\omega-\epsilon)t} dt = \int_0^\infty e^{i\omega t} e^{-\epsilon t} dt \\ &= \int_0^\infty \cos \omega t e^{-\epsilon t} dt + i \int_0^\infty \sin \omega t e^{-\epsilon t} dt \\ &= \frac{e^{-\epsilon t}}{\omega^2 + \epsilon^2} (-\epsilon \cos \omega t + \omega \sin \omega t) \Big|_0^\infty + i \frac{e^{-\epsilon t}}{\omega^2 + \epsilon^2} (-\epsilon \sin \omega t - \omega \cos \omega t) \Big|_0^\infty \\ &= \frac{\epsilon}{\omega^2 + \epsilon^2} + \frac{i\omega}{\omega^2 + \epsilon^2} = i \frac{\omega - i\epsilon}{(\omega + i\epsilon)(\omega - i\epsilon)} = \frac{i}{\omega + i\epsilon}. \end{aligned} \quad (5.129)$$

Zusammengefaßt folgt also

$$I_5 = \int_0^\infty e^{(i\omega-\epsilon)t} dt = \frac{i}{\omega + i\epsilon}. \quad (5.130)$$

Berechnung des Integrals $\int_0^\infty e^{-a/x^2-bx^2} dx$

Wir substituieren

$$\begin{aligned} y &= x\sqrt{b}, \\ c &= \sqrt{ab}. \end{aligned} \quad (5.131)$$

Dann haben wir [Schu 81]

$$I_6 = \int_0^\infty e^{-a/x^2-bx^2} dx = \frac{1}{\sqrt{b}} \int_0^\infty e^{-c^2/y^2-y^2} dy = f(c). \quad (5.132)$$

Hier ist b eine Konstante. Von der Funktion $f(c)$ bilden wir die Ableitung in bezug auf c

$$\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{1}{\sqrt{b}} \int_0^\infty \left(-\frac{2c}{y^2}\right) e^{-c^2/y^2-y^2} dy. \quad (5.133)$$

Als neue Variable führen wir nun

$$z = \frac{c}{y} \quad (5.134)$$

mit

$$\frac{dz}{dy} = -\frac{c}{y^2}$$

ein. Dies bewirkt auch einen Vorzeichenwechsel aufgrund der nachfolgenden Änderung der Integrationsgrenzen. Es folgt

$$\frac{\partial f}{\partial c} = -\frac{2}{\sqrt{b}} \int_0^\infty e^{-z^2-c^2/z^2} dz = -2f(c). \quad (5.135)$$

Diese Differentialgleichung in bezug auf c läßt sich sofort lösen. Es resultiert

$$f(c) = f(0) e^{-2c}, \quad (5.136)$$

was sich durch Einsetzen in (5.135) leicht nachprüfen läßt. $f(0)$ ist ein Gauß - Integral

$$f(0) = \sqrt{\frac{\pi}{4b}}. \quad (5.137)$$

Damit erhalten wir

$$f(c) = \sqrt{\frac{\pi}{4b}} e^{-2c} \quad (5.138)$$

und schließlich

$$I_6 = \int_0^\infty e^{-a/x^2 - bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{4b}} e^{-2\sqrt{ab}}. \quad (5.139)$$

Berechnung des Integrals $\int_0^\infty e^{-ax^2} x^n dx$

Es sei [Reif 75]

$$I(n) = \int_0^\infty e^{-ax^2} x^n dx \quad (5.140)$$

mit $n \geq 0$. Mit der Substitution

$$x = a^{-1/2} y \quad (5.141)$$

bekommen wir für $n = 0$

$$I(0) = a^{-1/2} \int_0^\infty e^{-y^2} dy = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (5.142)$$

Für $n = 1$ ergibt sich

$$I(1) = a^{-1} \int_0^\infty e^{-y^2} y dy = a^{-1} \left[-\frac{1}{2} e^{-y^2} \right]_0^\infty = \frac{1}{2} a^{-1}. \quad (5.143)$$

Alle Integrale $I(n)$ mit ganzzahligen $n > 1$ können dann auf die Integrale $I(0)$ und $I(1)$ zurückgeführt werden, wenn man nach dem Parameter a differenziert. Tatsächlich gilt

$$I(n) = -\frac{\partial}{\partial a} \left(\int_0^\infty e^{-ax^2} x^{n-2} dx \right) = -\frac{\partial I(n-2)}{\partial a}. \quad (5.144)$$

Dies ist eine Rekursionsbeziehung, die wir so oft wie nötig anwenden können. Zum Beispiel folgt

$$I(2) = -\frac{\partial I(0)}{\partial a} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\partial}{\partial a} (a^{-1/2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{4} a^{-3/2}. \quad (5.145)$$

Wir können aber auch in (5.140) substituieren

$$x = (u/a)^{1/2}. \quad (5.146)$$

Somit folgt

$$dx = \frac{1}{2} a^{-1/2} u^{-1/2} du \quad (5.147)$$

und weiter

$$I(n) = \frac{1}{2} a^{-1/2(n+1)} \int_0^{\infty} e^{-u} u^{1/2(n-1)} du. \quad (5.148)$$

Mit der Definition der Gamma - Funktion $\Gamma(x)$

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-u} u^{x-1} du \quad (5.149)$$

läßt sich (5.148) dann schreiben als

$$I(n) = \int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^n dx = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) a^{-(n+1)/2}. \quad (5.150)$$

Betrachten wir noch einmal das Integral $I(1)$, so gilt speziell

$$I_7 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} x dx = 0, \quad (5.151)$$

da der Integrand eine ungerade Funktion von x ist. Hingegen folgt bei der entsprechenden Erweiterung der unteren Integralgrenze bei $I(2)$

$$I_8 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} x^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} a^{-3/2}. \quad (5.152)$$

5.10 Die Ableitung der Schrödinger - Gleichung aus der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion

Als nächsten Schritt wollen wir ausgehend von der Pfadintegralformulierung der Greenschen Funktion die Schrödinger - Gleichung ableiten. Wir beginnen unsere formale Studien mit dem bereits mehrfach erwähnten linearen Zusammenhang

$$\psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1, \quad (5.153)$$

der auch als Definitionsgleichung für die Greensche Funktion dienen kann. Diese Gleichung erlaubt es, aus der Kenntnis der Wellenfunktion zum Zeitpunkt t_1 und der Greenschen Funktion die Wellenfunktion zu allen Zeiten t_2 zu bestimmen.

Wir untersuchen nun den speziellen Fall, daß sich t_2 von t_1 nur um einen kleinen Wert ϵ unterscheidet. Für kleine Zeitintervalle ϵ können wir nach (5.153) und mit Hilfe der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion schreiben

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} \exp \left\{ \epsilon \frac{i}{\hbar} L \left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\epsilon}, t + \frac{1}{2}\epsilon \right) \right\} \psi(y, t) dy, \quad (5.154)$$

wobei der Normierungsfaktor A zunächst noch nicht spezifiziert werden muß.

Wir betrachten im eindimensionalen Fall die Lagrange - Funktion

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t). \quad (5.155)$$

Dies führt bezüglich (5.154) auf

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{2\epsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V \left(\frac{x+y}{2}, t + \frac{1}{2}\epsilon \right) \right\} \\ \times \psi(y, t) dy. \end{aligned} \quad (5.156)$$

Der Ausdruck $(x-y)^2/\epsilon$ tritt im Argument der ersten Exponentialfunktion auf. Weicht y sehr stark von x ab, so ist dieser Ausdruck sehr groß und der Phasenfaktor weist entsprechenderweise ein stark oszillierendes Verhalten auf. Nur wenn y nahe x ist, können wir signifikante Beiträge zum Integral (5.153) erwarten. Wir führen daher eine Substitution durch

$$y = x + \eta, \quad (5.157)$$

und wir nehmen an, daß es nur für kleine η wesentliche Beiträge zum Integral (5.156) gibt. Damit erhalten wir

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/(2\hbar\epsilon)} e^{-i\epsilon V[(2x+\eta)/2, t+\epsilon/2]/\hbar} \psi(x + \eta, t) d\eta. \quad (5.158)$$

Wir entwickeln nun ψ in eine Potenzreihe. Wir beschränken uns auf Terme der Ordnung ϵ , dies impliziert Terme, die quadratisch in η sind. Den Ausdruck $\epsilon V[(2x + \eta)/2, t + \epsilon/2]$ können wir durch den linksseitigen Wert $\epsilon V(x, t)$ ersetzen. Der Unterschied zwischen beiden Ausdrücken ist von höherer Ordnung in ϵ oder in $\epsilon\eta$. Bei dieser Reihenentwicklung bekommen wir also

$$\begin{aligned} \psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/(2\hbar\epsilon)} \left[1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, t) \right] \\ &\times \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2}\eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta. \end{aligned} \quad (5.159)$$

Betrachten wir nur den führenden Term auf der rechten Seite, so tritt der folgende Faktor auf, der mit $\psi(x, t)$ multipliziert wird

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\eta^2/(2\hbar\epsilon)} d\eta = \frac{1}{A} \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}. \quad (5.160)$$

Auf der linken Seite steht aber nur $\psi(x, t)$. Damit auch im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ beide Seiten von (5.158) oder (5.159) übereinstimmen, folgt

$$A = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m}}. \quad (5.161)$$

Diese Normierungskonstante hatten wir bereits früher abgeleitet. Jedoch haben wir hier einen Weg beschritten, der geeignet ist, auch für kompliziertere Lagrange - Funktionen die Normierungskonstante A zu ermitteln. A muß jeweils so bestimmt werden, daß die Gleichung (5.158) auch für $\epsilon \rightarrow 0$ gilt. Anderenfalls konvergiert das Pfadintegral nicht.

Ferner haben wir nach (5.159) die Integrale zu lösen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/(2\hbar\epsilon)} \eta d\eta = 0 \quad (5.162)$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{A} e^{im\eta^2/(2\hbar\epsilon)} \eta^2 d\eta = \frac{i\hbar\epsilon}{m}. \quad (5.163)$$

Dies ergibt schließlich

$$\psi + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\epsilon}{\hbar} V \psi - \frac{\hbar\epsilon}{2im} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (5.164)$$

Was die Terme in erster Ordnung in ϵ betrifft, ist diese Gleichung erfüllt, sofern gilt

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t) \psi. \quad (5.165)$$

Dies ist die Schrödinger - Gleichung.

5.11 Ausführung der Pfadintegration – Die freie Propagation

Wir führen nun die erste Pfadintegration konkret durch und betrachten als einfachstes Beispiel die Propagation eines freien Teilchens. Die Lagrange - Funktion lautet demnach

$$L = \frac{1}{2}m \dot{x}^2 . \quad (5.166)$$

Für die Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion ergibt sich

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum_{i=1}^{N+1} (x_i - x_{i-1})^2 \right\} dx_1 \dots dx_N \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m} \right)^{-(N+1)/2} . \quad (5.167)$$

In (5.167) liegt ein Satz von Gauß - Integralen der Form $\int \exp\{-ax^2 + bx\} dx$ vor. Das Integral einer Gauß - Funktion führt wieder auf eine Gauß - Funktion. Damit können wir ein Integral nach dem anderen ausführen. Wir verwenden die bereits bewiesene Integralformel

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ a(x_1 - x)^2 \right\} \exp \left\{ b(x_2 - x)^2 \right\} dx = \sqrt{\frac{-\pi}{a+b}} \exp \left\{ \frac{ab}{a+b} (x_1 - x_2)^2 \right\} \quad (5.168)$$

und führen dann die folgende Integration durch

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m} \right)^{-2/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right\} dx_1 \\ = \left(\frac{2\pi i\hbar \cdot 2\epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar(2\epsilon)} (x_2 - x_0)^2 \right\} . \end{aligned} \quad (5.169)$$

Im nächsten Schritt multiplizieren wir dieses Resultat mit

$$\left(\frac{2\pi i\hbar\epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} (x_3 - x_2)^2 \right\}$$

und integrieren wieder, dieses Mal aber über die Variable x_2 . Das Resultat ist ähnlich wie in (5.169), mit der Ausnahme, daß wir diesmal $(x_2 - x_0)^2$ ersetzen durch $(x_3 - x_0)^2$ und daß an zwei Stellen 2ϵ durch 3ϵ ersetzt wird. Wir bekommen also

$$\left(\frac{2\pi i\hbar \cdot 3\epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar(3\epsilon)} (x_3 - x_0)^2 \right\}$$

und nach N Schritten

$$\left(\frac{2\pi i\hbar \cdot (N+1)\epsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar(N+1)\epsilon} (x_{N+1} - x_0)^2 \right\}$$

Es ist

$$(N + 1) \epsilon = t_b - t_a . \quad (5.170)$$

Damit bekommt man für die Amplitude schließlich

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left(\frac{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right\} . \quad (5.171)$$

G entspricht genau der Greenschen Funktion für ein freies Teilchen, die auch im Rahmen der Schrödinger - Theorie abgeleitet wird.

Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir durch Bildung des Absolutbetragsquadrates

$$P(t_b, t_a) dx = \frac{m}{2\pi \hbar (t_b - t_a)} dx . \quad (5.172)$$

Die Pfadintegralmethoden haben uns also dazu gedient, die Greensche Funktion zu ermitteln. Mit der Kenntnis der Greenschen Funktion können wir nun zahlreiche Prozesse der Quantenmechanik, beispielsweise Streuprozesse, berechnen. In dem gerade diskutierten Fall der freien Bewegung ist es natürlich sehr viel einfacher, die Greensche Funktion mit traditionellen Methoden der nichtrelativistischen Quantenmechanik abzuleiten.

5.12 Abseparation des klassischen Pfades

Wir werden uns nun einige mathematische Techniken erarbeiten, um auch weitere Summen über Pfade ausführen zu können. Die Pfade nehmen eine relativ einfache Gestalt an, wenn in der zugehörigen Lagrange - Funktion die Variablen und deren Zeitableitung höchstens in quadratischer Form auftreten. Dann sind die bei der Pfadintegration auftretenden Integrale vom Gauß-Typ.

Es sei

$$L = a(t) \dot{x}^2 + b(t) \dot{x} x + c(t) x^2 + d(t) \dot{x} + e(t) x + f(t) . \quad (5.173)$$

Diese Lagrange - Funktion ist allgemeiner als notwendig. Um die Wirkung zu ermitteln, müssen wir die Lagrange - Funktion über die Zeit in den Grenzen zwischen t_a und t_b integrieren. Dabei können wir den Term $d(t) \dot{x}$ partiell integrieren. Es verbleibt dann eine Konstante sowie ein Term proportional zu x , der natürlich mit dem ursprünglichen Term $e(t) x$ zusammengefaßt werden kann. Dies impliziert, daß der Term $d(t) \dot{x}$ von Anfang an unberücksichtigt bleiben kann.

Wir wollen den Pfadintegralausdruck für die Greensche Funktion auswerten

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \right\} \mathcal{D}'x(t). \quad (5.174)$$

Es sei wieder $x_{kl}(t)$ der klassische Pfad zwischen den spezifizierten Endpunkten x_a und x_b sowie

$$\mathcal{A}_{kl}[b, a] = \mathcal{A}[x_{kl}(t)] \quad (5.175)$$

die Wirkung für die Bewegung entlang des klassischen Pfades. Damit können wir einen beliebigen Pfad $x(t)$ ausdrücken durch

$$x = x_{kl} + y. \quad (5.176)$$

Der Unterschied zwischen dem klassischen Pfad $x_{kl}(t)$ und dem aktuellen Pfad $x(t)$ ist $y(t)$. In der diskretisierten Version ist $dx_i = dy_i$ und im allgemeinen folgt

$$\mathcal{D}'x(t) = \mathcal{D}'y(t). \quad (5.177)$$

Für das Wirkungsintegral folgt

$$\mathcal{A}[x(t)] = \mathcal{A}[x_{kl}(t) + y(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left\{ a(t) (\dot{x}_{kl}^2 + 2 \dot{x}_{kl} \dot{y} + \dot{y}^2) + \dots \right\} dt. \quad (5.178)$$

Wir fassen alle Terme zusammen, in denen y nicht auftritt. Es resultiert

$$\mathcal{A}[x_{kl}(t)] = \mathcal{A}_{kl}. \quad (5.179)$$

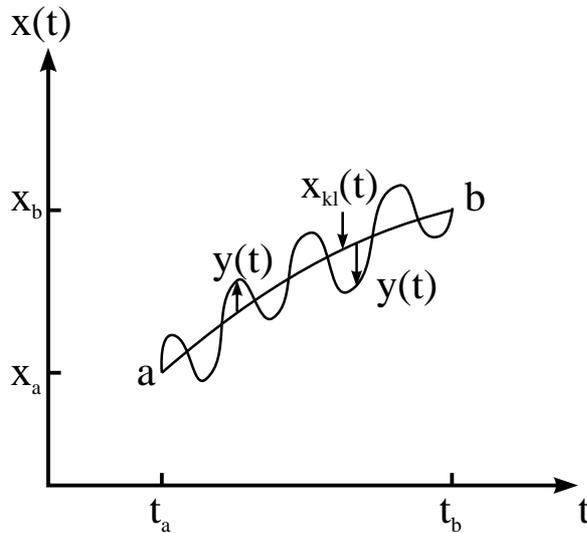
Alle Terme, die y oder \dot{y} als linearen Faktor beinhalten, verschwinden nach der Integration. Schließlich war nach dem Hamilton - Prinzip der klassische Pfad $x_{kl}(t)$ gerade durch diese Bedingung bestimmt worden.

Damit folgt

$$\mathcal{A}[x(t)] = \mathcal{A}_{kl} + \int_{t_a}^{t_b} \left\{ a(t) \dot{y}^2 + b(t) \dot{y} y + c(t) y^2 \right\} dt. \quad (5.180)$$

Das Integral über alle Pfade hängt nicht vom klassischen Pfad ab. Für die Greensche Funktion haben wir daher

$$G(b; a) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{kl} \right\} \int_0^1 \left[\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} (a(t) \dot{y}^2 + b(t) \dot{y} y + c(t) y^2) dt \right\} \right] \mathcal{D}'y(t). \quad (5.181)$$



Figur 6: Aufgetragen sind der klassische Pfad $x_{kl}(t)$ sowie ein aktueller Pfad $x(t)$ zwischen den Endpunkten a und b mit den Koordinaten (x_a, t_a) und (x_b, t_b) . Der Unterschied zwischen $x(t)$ und $x_{kl}(t)$ ist $y(t)$. Ein positiver und ein negativer Wert von $y(t)$ sind schematisch durch die Pfeile angegeben.

Da alle Pfade $y(t)$ bei $y = 0$ starten und enden, kann das Integral über alle Pfade nur von den Zeitpunkten t_a und t_b an den Endpunkten abhängen. Damit folgt

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{kl}[b, a] \right\} F(t_b, t_a). \quad (5.182)$$

Damit ist die Greensche Funktion G bestimmt bis auf eine Funktion F , die nur von t_a und t_b abhängt. Ein ähnliches Vorgehen ist auch für allgemeinere Lagrange - Funktionen möglich. In jedem Fall gilt für quadratische Formen in der Lagrange - Funktion $G \sim \exp\{i \mathcal{A}_{kl}/\hbar\}$.

Wir führen nun eine Näherungsbetrachtung bezüglich der Bewegung eines Teilchens in einem äußeren Potential durch. Wir nehmen an, es gilt $\mathcal{A} \gg \hbar$. Dann tragen nur Pfade in der Nähe des klassischen Pfades zum Pfadintegral bei. Wir entwickeln daher

$$V(x) = V(x_{kl} + y) = V(x_{kl}) + y V'(x_{kl}) + \frac{y^2}{2} V''(x_{kl}) + \frac{y^3}{6} V'''(x_{kl}) + \dots \quad (5.183)$$

Insbesondere wenn die dritte und alle höheren Ableitungen des Potentials um den klassischen Pfad sehr klein sind, erhalten wir wieder als sehr gute Näherung eine quadratische Form. Dies entspricht gerade der Wentzel - Kramers - Brillouin (WKB) Näherung in der Quantenmechanik.

5.13 Die Greensche Funktion für das Potential des harmonischen Oszillators

Für den klassischen harmonischen Oszillator mit der Lagrange - Funktion

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \quad (5.184)$$

folgt mit $T = t_b - t_a$ für die klassische Wirkung

$$\mathcal{A}_{kl} = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_a x_b] . \quad (5.185)$$

Dieses Resultat wurde bereits explizit abgeleitet.

Schreiben wir die Greensche Funktion in der Form

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = e^{i\mathcal{A}_{kl}/\hbar} F(t_b, t_a) \quad (5.186)$$

mit

$$F(t_b, t_a) = \int_0^0 \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [a(t) \dot{y}^2 + b(t) \dot{y} y + c(t) y^2] dt \right\} \right) \mathcal{D}'y(t) , \quad (5.187)$$

so folgt nach Einsetzen der klassischen Wirkung

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = F(T) \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} [(x_a^2 + x_b^2) \cos(\omega T) - 2x_a x_b] \right\} . \quad (5.188)$$

Der Ausdruck für $F(T)$ muß noch ausgewertet werden.

Wir haben also das Pfadintegral für den harmonischen Oszillator

$$G(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x_a}^{x_b} \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[\frac{1}{2} m (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \right] dt \right\} \right) \mathcal{D}'x(t) \quad (5.189)$$

reduziert auf das Problem, die folgende Funktion zu berechnen

$$F(T) = \int_0^0 \left(\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{1}{2} m (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2) \right] dt \right\} \right) \mathcal{D}'y(t) . \quad (5.190)$$

Wir lösen dieses Pfadintegral mit einer Methode, die generell sehr wichtig ist für die Handhabung von Pfadintegralen. Da alle Pfade $y(t)$ von 0 bei $t = 0$ nach 0 bei $t = T$ gehen, können wir solche Pfade als Fourier - Sinusreihe ausdrücken mit der Fundamentalperiode T

$$y(t) = \sum_n a_n \sin \frac{n\pi t}{T} . \quad (5.191)$$

Wir können dann die verschiedenen Pfade als Funktion der Entwicklungskoeffizienten a_n auffassen.

Für ein freies Teilchen haben wir bereits $F(T)$ ausgerechnet, es folgte

$$F(T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}}. \quad (5.192)$$

Für $\omega = 0$ muß dies auch für das Problem des harmonischen Oszillator ergeben.

Wir drücken nun das Integral über die Wirkung durch Fourier - Reihen aus

$$\begin{aligned} \int_0^T \dot{y}^2 dt &= \sum_n \sum_m \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T \cos \frac{n\pi t}{T} \cos \frac{m\pi t}{T} dt \\ &= \frac{1}{2} T \sum_n \left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2. \end{aligned} \quad (5.193)$$

Dabei haben wir ausgenutzt, daß gilt

$$\int_0^{2\pi} \cos(mx) \cos(nx) dx = \pi \delta_{m,n} \quad \text{für } m, n \neq 0.$$

Für den Potentialterm folgt ähnlich

$$\int_0^T y^2 dt = \frac{1}{2} T \sum_n a_n^2. \quad (5.194)$$

Das Einteilen der Zeitdauer T in diskrete Schritte der Länge ϵ entspricht der Berücksichtigung einer endlichen Zahl $N + 1$ von Koeffizienten a_n . Das Pfadintegral wird dann

$$\begin{aligned} F(T) &= \mathcal{J} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\exp \left\{ \sum_{n=1}^{N+1} \frac{im}{2\hbar} \left[\left(\frac{n\pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} \right) \\ &\quad \frac{da_1}{A} \frac{da_2}{A} \dots \frac{da_{N+1}}{A} \end{aligned} \quad (5.195)$$

mit

$$A = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar}{m}}. \quad (5.196)$$

\mathcal{J} bezeichnet die Jakobi - Determinante der Transformation von den einzelnen y_i auf die a_i .

Das Resultat einer solchen Integration ist wieder die Lösung eines Gauß - Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left(\frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2 \right\} \frac{da_n}{A} = \left(\frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2}. \quad (5.197)$$

Damit ist das Pfadintegral proportional zu

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left(\frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2} = \left(\prod_{n=1}^{N+1} \left(\frac{n^2 \pi^2}{T^2} \right)^{-1/2} \right) \left(\prod_{n=1}^{N+1} \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-1/2} \right). \quad (5.198)$$

Der erste Faktor auf der rechten Seite hängt nicht von ω ab und kann daher mit der Jakobi - Determinante und anderen Faktoren zu einer Konstante \mathcal{C} zusammengefaßt werden. Der zweite Faktor hat als Grenzwert

$$\left(\frac{\sin(\omega T)}{\omega T} \right)^{-1/2} \quad \text{für } N \rightarrow \infty, \text{ d.h. } \epsilon \rightarrow 0.$$

Damit bekommen wir

$$F(T) = \mathcal{C} \left(\frac{\sin(\omega T)}{\omega T} \right)^{-1/2}, \quad (5.199)$$

wobei \mathcal{C} unabhängig von ω ist. Für das freie Resultat ($\omega = 0$) fanden wir das Resultat (5.192). Damit folgt schließlich als vollständige Lösung für den harmonischen Oszillator

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)} \right)^{1/2}. \quad (5.200)$$

5.14 Die Eigenfunktionen für das Potential des harmonischen Oszillators

In guten Vorlesungen zur Quantenmechanik werden die Eigenfunktionen für das Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (5.201)$$

des harmonischen Oszillators als Standardbeispiel abgeleitet. Wir rufen uns die erzielten Resultate zurück in das Gedächtnis.

Ausgehend von der stationären Schrödinger - Gleichung

$$\widehat{H}\phi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_n}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \phi_n = E_n \phi_n \quad (5.202)$$

erhält man als Lösung die Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.203)$$

sowie die Eigenfunktionen

$$\phi_n = (2^n n!)^{-1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} H_n(y) e^{-y^2/2}. \quad (5.204)$$

Hierbei haben wir die abkürzende Bezeichnung

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (5.205)$$

eingeführt. Die Hermiteschen Polynome $H_n(y)$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, \\ H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= (2y)^2 - 2, \\ H_3(y) &= (2y)^3 - 6(2y) \end{aligned} \quad (5.206)$$

und generell durch

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \quad (5.207)$$

Die Figur zeigt ein Oszillatorpotential sowie schematisch die Lage der äquidistanten Energieeigenwerte. Weiterhin ist die Grundstruktur der Eigenfunktionen ersichtlich.

Wir wollen nun zeigen, wie man diese Resultate auch durch die Kenntnis der Greenschen Funktion ableiten kann. Für die Greensche Funktion fanden wir mit Hilfe der Pfadintegralrechnung die explizite Darstellung

$$\begin{aligned} G(x_2, T; x_1; 0) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)} \right)^{1/2} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2 \hbar \sin(\omega T)} \left[(x_1^2 + x_2^2) \cos(\omega T) - 2x_1 x_2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.208)$$

Andererseits läßt sich die Greensche Funktion allgemein durch die Eigenfunktionen und Energieeigenwerte in der folgenden Form ausdrücken

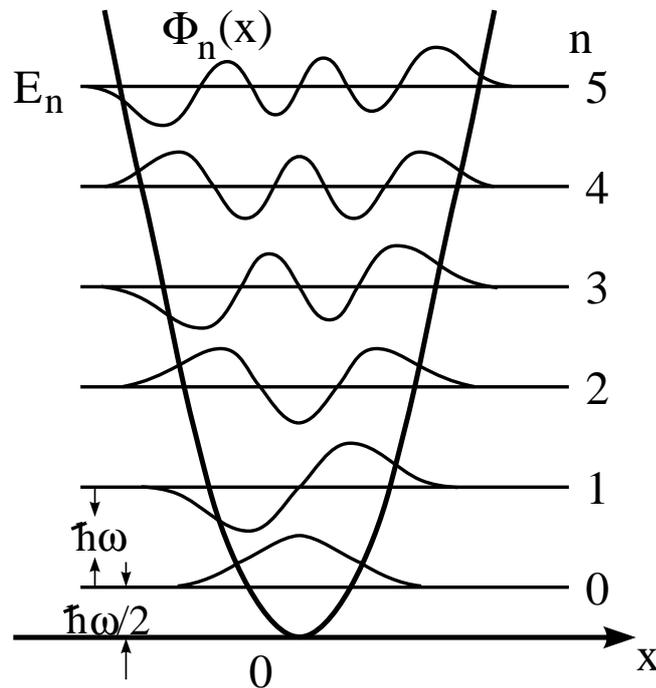
$$G(x_2, T; x_1, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n T \right\} \phi_n(x_2) \phi_n^*(x_1). \quad (5.209)$$

Wir verwenden nun die trigonometrischen Relationen

$$\begin{aligned} i \sin(\omega T) &= \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1 - e^{-2i\omega T}), \\ \cos(\omega T) &= \frac{1}{2} e^{i\omega T} (1 + e^{-2i\omega T}). \end{aligned} \quad (5.210)$$

Damit können wir Gleichung (5.208) schreiben als

$$\begin{aligned} G(x_2, T; x_1, 0) &= \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} (1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left[(x_1^2 + x_2^2) \left(\frac{1 + e^{-2i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} \right) - \frac{4x_1 x_2 e^{-i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.211)$$



Figur: Die Energieeigenwerte und Eigenfunktionen $\phi_n(x)$ für das Oszillatorpotential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.

Wir wollen nun eine Reihenentwicklung dieses Ausdrucks vornehmen, so daß wir die einzelnen Terme in Gleichung (5.209) identifizieren können. Aufgrund des ersten Faktors $e^{-i\omega T/2}$ im Ausdruck (5.211) ist klar, daß die einzelnen Terme in der gesuchten Entwicklung die Faktoren

$$e^{-i\omega T/2} e^{-in\omega T}$$

aufweisen werden mit $n = 0, 1, 2, \dots$. Dies impliziert wiederum durch einen Vergleich mit (5.209), daß die Energien in der Tat gegeben sind durch

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Um auch die Wellenfunktion zu ermitteln, müssen wir die Entwicklung wirklich durchführen. Wir entwickeln (5.211) bis zur Ordnung $n = 2$

$$G(x_2, T; x_1, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \dots\right) \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2) - \frac{m\omega}{\hbar}(x_1^2 + x_2^2)(e^{-2i\omega T} + \dots) + \frac{2m\omega}{\hbar}x_1 x_2 e^{-i\omega T} + \dots\right\}. \quad (5.212)$$

Die Entwicklung einer der Exponentialfunktionen in eine Reihe liefert

$$G(x_2, T; x_1, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\right\} e^{-i\omega T/2} \left(1 + \frac{1}{2} e^{-2i\omega T}\right) \times \\ \left[1 + \frac{2m\omega}{\hbar} x_1 x_2 e^{-i\omega T} + \frac{4m^2\omega^2}{2\hbar^2} x_1^2 x_2^2 e^{-2i\omega T} - \frac{m\omega}{\hbar} (x_1^2 + x_2^2) e^{-2i\omega T} + \dots\right]. \quad (5.213)$$

Von dieser Entwicklung betrachten wir den Term niedrigster Ordnung und vergleichen ihn mit dem entsprechenden Term niedrigster Ordnung in der Eigendarstellung (5.209) der Greenschen Funktion. Es resultiert

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\right\} \exp\{-i\omega T/2\} \\ = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E_0 T\right\} \phi_0(x_2) \phi_0^*(x_1). \quad (5.214)$$

Daraus folgt offensichtlich $E_0 = \hbar\omega/2$ und

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right\}. \quad (5.215)$$

Als Phasenwahl haben wir ϕ_0 reell gewählt. Dies stimmt mit unseren bisherigen Kenntnissen aus der Quantenmechanik überein. Der Term nächst höherer Ordnung in dieser Entwicklung lautet

$$\exp\{-i\omega T/2\} \exp\{-i\omega T\} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\right\} \frac{2m\omega}{\hbar} x_1 x_2 \\ = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}E_1 T\right\} \phi_1(x_2) \phi_1^*(x_1). \quad (5.216)$$

Daraus folgt sofort $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ und

$$\phi_1(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \phi_0(x). \quad (5.217)$$

Der nächste Term entspricht dem Energieeigenwert $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$. Der hierzu gehörige Teil der Eigenfunktion, der von x_1 und x_2 abhängt, lautet

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\right\} \left[\frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2} x_1^2 x_2^2 - \frac{m\omega}{\hbar}(x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2}\right].$$

Dies muß dasselbe sein wie $\phi_2(x_2) \phi_2^*(x_1)$. Der Ausdruck in der eckigen Klammer kann umgeschoben werden in

$$\frac{1}{2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x_1^2 - 1\right) \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x_2^2 - 1\right).$$

Damit ergibt sich

$$\phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right) \phi_0(x). \quad (5.218)$$

Auch dieses Resultat kann wieder verglichen werden mit der bekannten Lösung der Schrödinger - Gleichung. Wir finden vollständige Übereinstimmung. Die Fortführung dieser Studien, um auch die Eigenfunktionen $\phi_n(x)$ mit $n > 2$ zu bestimmen, ist evident.

Damit haben wir gezeigt, daß die Greensche Funktion alle notwendigen Informationen enthält, um Eigenfunktionen und Energieeigenwerte ableiten zu können.

6 Supersymmetrie

6.1 Einführung

Die Supersymmetrie (SUSY) in ihrer eleganten mathematischen Form mag für den Anfänger zunächst kompliziert erscheinen. Um so mehr erstaunt es, daß der Einstieg in dieses Forschungsgebiet schon mit Elementarkenntnissen aus der Quantenmechanik vollzogen werden kann. Die in diesem Kapitel hergeleiteten Grundaussagen bleiben in allen noch so raffinierten SUSY-Modellen gültig. Diese Ausführungen sind in leicht modifizierter Form dem Buch: H. Kalka, G. Soff, (Teubner, Stuttgart, 1997) entnommen.

Die Supersymmetrie beschreibt Transformationen von bosonischen in fermionische Zustände und umgekehrt. In der Quantenmechanik wird die SUSY-Transformation durch einen supersymmetrischen Operator Q vermittelt:

$$Q |\text{Boson}\rangle \propto |\text{Fermion}\rangle \quad \text{und} \quad Q |\text{Fermion}\rangle \propto |\text{Boson}\rangle \quad . \quad (6.1)$$

Das Proportionalitätszeichen \propto weist darauf hin, daß hier noch eine spezielle Normierung erforderlich ist.

Mit der Bezeichnung Boson und Fermion ist eine Reihe von grundlegenden physikalischen Eigenschaften verknüpft. Einen ersten Eindruck vermittelt die Tabelle, deren Begriffe später noch ausführlich erklärt werden. Die wichtigsten Fakten sind: Bosonen tragen ganz- und Fermionen halbzahligen Spin; bei Drehungen verhalten sich daher Bosonen wie Tensoren und Fermionen wie Spinoren. In der klassischen Physik werden Bosonen durch c -Zahlen beschrieben. Im Gegensatz dazu verwendet man für Fermionen eine neue Sorte von Zahlen: die Grassmann- oder a -Zahlen. Nach der Quantisierung werden aus Zahlen Operatoren, die bei Bosonen Kommutator- und bei Fermionen Antikommutator-Relationen genügen. Unter dem Kommutator bzw. Antikommutator zweier Größen F und G versteht man dabei:

Kommutator	$[F, G] := FG - GF$
Antikommutator	$\{F, G\} := FG + GF$

(6.2)

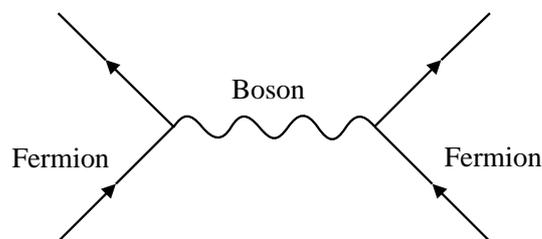
Die Konsequenzen dieser algebraischen Strukturen sind enorm: So folgt für die Fermionen das einschränkende Pauli-Prinzip, wonach jeder Zustand durch maximal *ein* Teilchen besetzt werden kann. Bosonen hingegen dürfen in beliebiger Zahl quantenmechanische Zustände bevölkern. Vollkommen neue Einblicke liefert dagegen die Quantenfeldtheorie: Wie in der Abbildung veranschaulicht, werden alle zwischen “Materieteilchen” (Fermionen) herrschenden Kräfte durch

Die mathematischen und physikalischen Eigenschaften von Bosonen und Fermionen.

BOSON	FERMION
Spin ganzzahlig	Spin halbzahlig
Tensor	Spinor
c -Zahl	a -Zahl
Kommutator-Relationen	Antikommutator-Relationen
Bose-Statistik	Pauli-Prinzip
Übermittler der Kräfte	Materieteilchen
klassischer Limes	reines Quantenobjekt

den Austausch von Bosonen beschrieben. Schließlich sei erwähnt, daß Bosonen auch in der klassischen Mechanik existieren, während Fermionen reine Quantenobjekte sind.

Kurz und gut: Bosonen und Fermionen weichen in ihren Eigenschaften so stark voneinander ab, daß eine fundamentale Symmetrie zwischen ihnen lange Zeit nicht zu erwarten war. Erst Mitte der 70er Jahre ist es mit der Entdeckung der Supersymmetrie gelungen, diese beiden zueinander vollkommen fremden Welten zusammenzuführen. Die radikalen Konsequenzen dieser neuen Symmetrietransformation werden wir Schritt für Schritt im weiteren kennenlernen.



Die Kräfte zwischen den Materieteilchen (Fermionen) werden durch Bosonen übertragen.

6.2 Das einfachste supersymmetrische Modell

Wir beginnen mit dem einfachsten supersymmetrischen Modell ohne Wechselwirkung. Wichtig ist, daß dieses Modell zwei Arten von Teilchen (Quasiteilchen oder Elementaranregungen) beinhalten muß: Bosonen und Fermionen. Dazu verwenden wir den Formalismus der zweiten Quantisierung, welcher die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen zuläßt.

Die Notation erfolgt in Dirac-Schreibweise mit $|u\rangle$, $|v\rangle$ als Zustände im Hilbertraum. Das Skalarprodukt im Hilbertraum sei mit $\langle u|v\rangle$ bezeichnet, und es gilt $\langle u|v\rangle^* = \langle v|u\rangle$, wobei der

Stern komplexe Konjugation bedeutet. Jedem Operator A läßt sich das Matrixelement $\langle u|A|v\rangle := \langle u|Av\rangle$ zuordnen. Der zu A *adjungierte* Operator A^\dagger ist durch die Beziehung $\langle A^\dagger u|v\rangle = \langle u|Av\rangle$ oder

$$\langle v|A^\dagger|u\rangle^* = \langle u|A|v\rangle \quad (6.3)$$

definiert. Zu den wohl wichtigsten Operatoren der Quantenmechanik gehören:

$$\begin{array}{ll} \text{hermitesche Operatoren} & \iff A^\dagger = A \\ \text{unitäre Operatoren} & \iff U^\dagger U = U U^\dagger = 1 \quad . \end{array}$$

Hermitesche Operatoren besitzen reelle Eigenwerte; unitäre Operatoren lassen das Skalarprodukt invariant, $\langle Uu|Uv\rangle = \langle u|U^\dagger U|v\rangle = \langle u|v\rangle$. Der Operator heißt *positiv*, wenn sein Eigenwertespektrum nichtnegativ ist.

6.3 Erzeuger und Vernichter

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Eigenschaften der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bereitgestellt. Dabei müssen wir zwischen bosonischen und fermionischen Operatoren unterscheiden.

Beginnen wir mit den Bosonen. In der sogenannten Besetzungszahldarstellung wird ein Zustand $|n_B\rangle$ durch die Anzahl n_B der Bosonen charakterisiert. Den Einteilchenoperator, der die Bosonenzahl erhöht (erniedrigt), bezeichnet man als Erzeuger b^+ (Vernichter b^-):

$$b^+|n_B\rangle = \sqrt{n_B + 1}|n_B + 1\rangle \quad \text{und} \quad b^-|n_B\rangle = \sqrt{n_B}|n_B - 1\rangle .$$

Per Definition ist $b^-|0\rangle = 0$, was besagt, daß aus einem Zustand $|0\rangle$ ohne Teilchen, auch *Vakuum* genannt, kein Teilchen entfernt werden kann. Wird nun mit dem Operator

$$N_B = b^+ b^- \quad (6.4)$$

ein Boson zuerst vernichtet und danach wieder erzeugt, dann bleibt der Zustand bis auf eine Skalierung unverändert:

$$N_B|n_B\rangle = b^+ b^-|n_B\rangle = b^+ \sqrt{n_B}|n_B - 1\rangle = n_B|n_B\rangle .$$

Da N_B die Teilchenzahl n_B zum Eigenwert besitzt, bezeichnet man ihn als Teilchenzahl- oder Besetzungszahl-Operator. Genauso berechnet man den Kommutator

$$[b^-, b^+] |n_B\rangle = (b^- b^+ - b^+ b^-) |n_B\rangle = (n_B + 1 - n_B) |n_B\rangle = |n_B\rangle .$$

Das Ergebnis gehört zu den fundamentalen Vertauschungsrelationen, welche ein Bosonen-System vollständig definieren:

$$\boxed{\text{Bosonen: } [b^-, b^+] = 1, \quad [b^+, b^+] = [b^-, b^-] = 0} \quad . \quad (6.5)$$

Die Symbole 1 und 0 bezeichnen hier den Eins- und Nulloperator.

Die Matrixelemente der Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren besitzen eine einfache Struktur:

$$\langle n_B | b^- | n'_B \rangle = \sqrt{n'_B} \langle n_B | n'_B - 1 \rangle = \sqrt{n'_B} \delta_{n_B, n'_B - 1}, \quad (6.6)$$

$$\langle n_B | b^+ | n'_B \rangle = \sqrt{n'_B + 1} \langle n_B | n'_B + 1 \rangle = \sqrt{n'_B + 1} \delta_{n_B, n'_B + 1}. \quad (6.7)$$

Das sind Matrizen mit Einträgen nur in einer Nebendiagonale. Mit (6.3) folgt aus (6.6) und (6.7)

$$\begin{aligned} \langle n_B | (b^-)^\dagger | n'_B \rangle &= \langle n'_B | b^- | n_B \rangle^* = \sqrt{n_B} \delta_{n'_B, n_B - 1} \\ &= \sqrt{n'_B + 1} \delta_{n_B, n'_B + 1} = \langle n_B | b^+ | n'_B \rangle, \end{aligned}$$

also $b^+ = (b^-)^\dagger$. Wegen $(b^+)^\dagger = (b^-)^{\dagger\dagger} = b^-$ sind b^+ und b^- zueinander adjungiert. Der Teilchenzahl-Operator ist hingegen hermitesch, da $N_B^\dagger = (b^+ b^-)^\dagger = (b^-)^\dagger (b^+)^\dagger = b^+ b^- = N_B$.

Durch wiederholtes Anwenden von b^+ auf den Vakuumzustand $|0\rangle$ können wir uns jeden beliebigen Zustand erzeugen:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= b^+ |0\rangle, \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} b^+ |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} b^+ b^+ |0\rangle, \\ &\vdots \\ |n_B\rangle &= (n_B!)^{-1/2} (b^+)^{n_B} |0\rangle. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Da man hier wie auf einer Leiter von Zustand zu Zustand klettert, bezeichnet man b^+ (aber auch b^-) oft als Leiter- oder Stufenoperator.

Für die Fermioperatoren f^+ und f^- , welche die Fermionenzahl n_F erhöhen und erniedrigen, gelten ähnliche Beziehungen wie bei den Bosonen:

$$f^+ |n_F\rangle = \sqrt{n_F + 1} |n_F + 1\rangle \quad \text{und} \quad f^- |n_F\rangle = \sqrt{n_F} |n_F - 1\rangle.$$

Der Teilchenzahl-Operator

$$N_F = f^+ f^- \quad (6.9)$$

Betrachten wir ein Ensemble aus zwei oder mehr Teilchen einer Sorte, dann verhalten sich Bosonen und Fermionen unterschiedlich, wenn man sie in ein System mit verschiedenen Energiezuständen bringt. Das ist in der Abbildung angedeutet: Während sich Fermionen aufgrund des Pauli-Prinzips auf die verschiedenen Niveaus verteilen, neigen die Bosonen dazu, den Zustand möglichst geringer Energie einzunehmen und ihn mehrfach zu besetzen. Man sagt, Bosonen und Fermionen gehören unterschiedlichen Statistiken an.

6.4 SUSY-Operatoren

Supersymmetrie kann man nur in einem Modell studieren, welches sowohl Bosonen als auch Fermionen enthält; der Zustandsraum des einfachsten Modells wird daher von den Produktzuständen

$$|n_B n_F\rangle = |n_B\rangle |n_F\rangle \quad \text{mit} \quad n_B = 0, 1, \dots, \infty \quad \text{und} \quad n_F = 0, 1 \quad (6.13)$$

aufgespannt. Entsprechend der beiden Werte, die n_F annehmen kann, unterscheidet man zwei Klassen: die bosonischen Zustände $|\text{Boson}\rangle$ mit $n_F = 0$ und die fermionischen Zustände $|\text{Fermion}\rangle$ mit $n_F = 1$.

Die einfachsten SUSY-Operatoren, welche bosonische und fermionische Zustände ineinander umwandeln, sind gegeben durch

$$\begin{aligned} Q_+ |n_B n_F\rangle &\propto |n_B - 1, n_F + 1\rangle, \\ Q_- |n_B n_F\rangle &\propto |n_B + 1, n_F - 1\rangle, \end{aligned} \quad (6.14)$$

wobei der Normierungsfaktor später bestimmt wird. Der Operator Q_+ vernichtet ein Boson und erzeugt ein Fermion; der Operator Q_- bewirkt das Gegenteil. Da n_F nur auf die Werte 0 und 1 beschränkt ist, folgt

$$\begin{aligned} Q_- |\text{Boson}\rangle &= 0 & \text{und} & & Q_+ |\text{Fermion}\rangle &= 0, \\ Q_+ |\text{Boson}\rangle &\propto |\text{Fermion}\rangle & \text{und} & & Q_- |\text{Fermion}\rangle &\propto |\text{Boson}\rangle. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Aus (6.14) ist ersichtlich, daß Q_+ und Q_- Zweiteilchenoperatoren sind. Um ihre Eigenschaften näher zu bestimmen, müssen wir sie auf die uns vertrauten Erzeuger und Vernichter zurückführen. Als naheliegender Ansatz für beide SUSY-Operatoren empfiehlt sich

$$Q_+ = b^- f^+ \quad \text{und} \quad Q_- = b^+ f^-. \quad (6.16)$$

Entscheidend ist, daß beide Operatoren den *gleichen* Vorfaktor aufweisen, den wir hier aus Gründen der Einfachheit mit 1 festgelegt haben. Q_+ und Q_- sind zueinander adjungiert, $(Q_\pm)^\dagger = Q_\mp$.

Die Fermioperatoren aus (6.11) verfügen über die Eigenschaft $(f^+)^2 = 0$ bzw. $(f^-)^2 = 0$, die man *Nilpotenz* nennt. Wegen (6.16) überträgt sie sich auf die SUSY-Operatoren,

$$Q_+^2 = Q_-^2 = 0. \quad (6.17)$$

Die Nilpotenz von Q_\pm liefert uns den Schlüssel beim Auffinden des *supersymmetrischen Hamiltonoperators* H_S . Supersymmetrie bedeutet: *Bei jeder Transformation, welche die Q 's vermitteln, bleibt die Energie des Systems erhalten.* Die algebraische Bedingung, der H_S zu gehorchen hat, ist demzufolge

$$[H_S, Q_\pm] = 0. \quad (6.18)$$

Bereits der einfache Ansatz

$$H_S = \{Q_+, Q_-\} \quad (6.19)$$

erfüllt diese Forderung, denn es gilt wegen (6.17)

$$\begin{aligned} [H_S, Q_+] &= Q_+Q_-Q_+ + Q_-Q_+Q_+ - Q_+Q_+Q_- - Q_+Q_-Q_+ = 0, \\ [H_S, Q_-] &= Q_+Q_-Q_- + Q_-Q_+Q_- - Q_-Q_+Q_- - Q_-Q_-Q_+ = 0. \end{aligned}$$

Mit den Gleichungen (6.16), (6.18) und (6.19) ist unser Ziel eigentlich schon erreicht und das einfachste SUSY-Modell konstruiert – bis auf einen Schönheitsfehler: die Operatoren Q_\pm sind nicht hermitesch! Anstelle der beiden nicht-hermiteschen Operatoren Q_+ und Q_- lassen sich aber zwei hermitesche Operatoren einführen:

$$Q_1 = Q_+ + Q_- \quad \text{und} \quad Q_2 = -i(Q_+ - Q_-), \quad (6.20)$$

die wegen (6.17) antivertauschen,

$$\begin{aligned} \{Q_1, Q_2\} &= i\{Q_+, Q_-\} - i\{Q_-, Q_+\} \\ &= i\{Q_+, Q_-\} - i\{Q_+, Q_-\} = 0. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Für den hermiteschen Operator Q_1 gilt im Gegensatz zu (6.15) nun die SUSY-Transformation (6.1), wobei $Q = Q_1$. Desweiteren erhält der supersymmetrische Hamiltonoperator (6.19) eine besonders einfache Gestalt:

$$\boxed{H_S = Q_1^2 = Q_2^2}. \quad (6.22)$$

Die Forderung

$$[H_S, Q_1] = [H_S, Q_2] = 0 \quad (6.23)$$

ist damit auch erfüllt. Die Gleichung (6.22) besagt außerdem, daß zwei SUSY-Transformationen hintereinander ausgeführt wieder den ursprünglichen Zustand (Energie-Eigenzustand) ergeben.

Unser Modell beruht auf zwei SUSY-Operatoren. Dabei haben wir die Wahl zwischen zwei Sätzen, die sich zwar mittels (6.20) ineinander überführen lassen, in ihren Eigenschaften aber doch sehr unterschiedlich sind:

